

# ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

УДК 548.571; 548.73

## ЗАРЯДОВАЯ МОДЕЛЬ РЕКОМБИНАЦИОННЫХ СВОЙСТВ КЛАСТЕРОВ ДЕФЕКТОВ

В.М.Ленченко, Ю.Ю.Логинов\*

*Модель Шокли-Рида расчета времени жизни электронов и дырок в полупроводниках адаптируется к случаю, когда кластеризация точечных дефектов в полупроводниках (например, при высокотемпературном отжиге или закалке) приводит к образованию микродефектов как многозарядных центров, заряжаемых отрицательно в n-полупроводниках и положительно в p-полупроводниках. Для неосновных носителей заряда (ННЗ) такие кластеры являются кулоновскими ямами, стекание ННЗ в которые приводит к их рекомбинации с основными носителями тока. Проведены количественные оценки зависимости скорости рекомбинации ННЗ от размеров кластеров, концентрации в них локальных уровней и глубины их залегания в запрещенной зоне. Показано, что кластеризация точечных рекомбинационных центров повышает их рекомбинационную эффективность на порядки по сравнению со случаем их однородного распределения по кристаллу.*

В высоколегированных полупроводниках вакансии, собственные междоузельные атомы и примеси участвуют в образовании большого разнообразия нано- и микродефектов, концентрация и структура которых зависят от технологии обработки полупроводников [1,2]. В частности в монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского, нанообразования могут содержать всего лишь четыре атома кислорода [3]. Большинство микродефектов являются электрически-активными и имеют отрицательный заряд в n-полупроводниках и положительный – в p-полупроводниках. Подобными свойствами обладают и разупорядоченные области или кластеры дефектов (KD), образованные под воздействием облучения частицами высоких энергий [4]. К разряду KD мы будем относить и электрически-активные примесно-дефектные скопления технологического происхождения типа А-, В- и D-микродефектов.

Рассмотрим рекомбинационные свойства KD, учитывая, что ограничивающим фактором для захвата основных носителей заряда является кулоновский барьер KD, а для неосновных носителей заряда — скорость их диффузионно-дрейфового переноса в матрице кристалла, а также эффективный радиус их захвата в потенциальную яму, образованную зарядом KD.

Определим заряд KD по формуле

$$Q_k = q\nu_k f_k,$$

где  $q$  — элементарный заряд,  $\nu_k$  — число локальных уровней отдельного KD в запрещенной зоне полупроводника,  $f_k$  — их коэффициент заполнения.

Тогда потенциал на периферии KD запишется

$$\varphi_k = \frac{Q_{km} f_k}{4\pi\epsilon_0\epsilon, r_k}, \quad (1)$$

где  $r_k$  — геометрический радиус KD,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость материала.

Скорее всего, многозарядные кластеры обладают амфотерными свойствами: в n-полупроводнике они заряжаются отрицательно, а в p-полупроводнике — положительно. Для простоты мы будем рассматривать рекомбинацию ННЗ в n-полупроводниках с KD акцепторного типа. Большинство кислородсодержащих KD с атомами кислорода в замещающем состоянии, а также KD, состоящие из акцепторных А- и Е-центров, подходят под эту категорию.

При этом KD донорного типа с более глубоким залеганием локальных уровней, чем у основной легирующей примеси, будут нейтральны, и только в p-полупроводнике они заряжаются и становятся эффективными стоками для неравновесных дырок. Следует предполагать, что имеются и KD смешанного типа, состоящие как из донорного, так и из акцепторного типов пространственно

разделенных точечных дефектов. Они описываются двухуровневой моделью локальных центров и временем рекомбинации ( $\tau_r$ ) электронов и дырок в объеме такого КД. В этом случае заряд КД должен определяться по формуле

$$Q_k = q \cdot (\nu_a f_a + \nu_d f_d), \quad (2)$$

где  $\nu_a$  и  $\nu_d$  — количество акцепторных и донорных уровней в составе КД,  $f_a$  и  $f_d$  — их коэффициенты заполнения. Захват носителей тока на уровни КД будет лимитироваться кулоновским барьером, вероятность преодоления которого определяется больцмановским фактором

$$f_k = \exp(-g\varphi_k/\theta), \quad (3)$$

где  $\theta = kT$ ,  $\varphi_k$  (см. уравнение (1)).

С учетом барьера для скоростей захвата электронов и дырок на КД акцепторного типа в полупроводниках следует записать выражения:

$$R_n = N_k C_n \gamma_k n (1 - f_k) \nu_k; \quad (4)$$

$$R_p = N_k C_p (\gamma_k)^{-1} p f_k \nu_k. \quad (5)$$

Здесь  $N_k$  — концентрация кластеров, в каждом из которых  $\nu_k$  локальных (акцепторных) уровней,  $f_k$  — их фактор заполнения,  $C_n$  и  $C_p$  — скорости безбарьерного захвата ННЗ на уровни КД. Для электронов

$$C_n = 4\pi r_k^2 \bar{V}_n, \quad (6)$$

где  $r_k$  — геометрический радиус КД,  $\bar{V}_n$  — средняя тепловая скорость электронов. Для дырок из-за их малой концентрации скорость захвата лимитируется коэффициентом диффузии  $D_p$  и поэтому

$$C_p = 4\pi R_k D_p. \quad (7)$$

Здесь  $R_k$  — внешний радиус КД, определяемый уравнением

$$\frac{qQ_k}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_k} = \theta, \quad (8)$$

где

$$\theta = kT, Q_k = q\nu_k f_k, \quad (9)$$

$\epsilon\epsilon_0$  — абсолютная диэлектрическая проницаемость среды.

Обратные потоки ННЗ из КД в объем полупроводника также зависят от заряда КД, увеличивая выброс электронов с акцепторных уровней на фактор  $\gamma_k^{-1} > 1$  и уменьшая выброс дырок на  $\gamma < 1$ . Поэтому мы их можем представить в виде

$$J_n = N_k \nu_k f_k n_1 C_n / \gamma; \quad (10)$$

$$J_p = N_k \nu_k (1 - f_k) p_1 C_p \gamma. \quad (11)$$

Здесь  $n_1$  и  $p_1$  — равновесные концентрации электронов и дырок в полупроводнике, в котором уровень Ферми совпадает с локальным уровнем КД.

Выражения (4) и (5), а также (10) и (11) при  $\gamma = 1$  и  $\nu_k = 1$  совпадают с их аналогами для точечных незаряженных центров:

$$n_1 = Z_n e^{\frac{\epsilon_k - \epsilon_c}{\theta}}, p_1 = Z_p e^{\frac{\epsilon_v - \epsilon_k}{\theta}}, \quad (12)$$

где  $Z_n$  и  $Z_p$  — плотности состояний соответственно для электронов в свободной зоне и дырок — в валентной.

С учетом обозначений (4), (5), (10) и (11) уравнения рекомбинационно-генерационной кинетики запишутся

$$\frac{dn}{dt} = g + J_n - R_n - \frac{\Delta n}{\tau_n}, \quad (13)$$

$$\frac{dp}{dt} = g + J_n - R_p - \frac{\Delta p}{\tau_p}, \quad (14)$$

где  $g$  — скорость генерации электронно-дырочных пар (например, при освещении),  $\tau_n$  и  $\tau_p$  — время их жизни в безкластерном полупроводнике. Точнее,  $\tau_n$  и  $\tau_p$  — это времена релаксации ННЗ, которые только в стационарном режиме, когда  $\frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = g$ , совпадают с временем жизни ННЗ  $\tau_o$  и при этом  $\tau_n = \tau_p = \tau_o$ . Учет вклада КД в скорость рекомбинаций осуществляется по формуле

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_o} + \frac{1}{\tau_k}. \quad (15)$$

Здесь второй член связан с КД и может быть определен из уравнений (13) и (14), которые в стационарном режиме с учетом (4), (5), (10) и (11) переписываются как

$$g^* = N_k \nu_k C_n^* [(1 - f_k)n - n_1^* f_k] = N_k \nu_k C_p^* [p f_k - p_1^* (1 - f_k)] \quad (16)$$

Здесь  $g^* = g - (\Delta n / \tau_o)$  — часть генерируемых электронно-дырочных пар, рекомбинируемых с участием КД. Величины  $C_n^*$ ,  $C_p^*$ ,  $n_1^*$  и  $p_1^*$  отличаются от соответствующих параметров точечных рекомбинационных центров фактором  $\gamma$ :

$$C_n^* = C_n \gamma, C_p^* = C_p \gamma^{-1}, n_1^* = n_1 \gamma^{-1} \text{ и } p_1^* = p_1 \gamma. \quad (17)$$

Из уравнений (16) с учетом условия нейтральности полупроводника

$$n + N_k \nu_k f_k = p + N_d^+, \quad (18)$$

$$N_d^+ = N_d (n_{1d} / (n_{1d} + n)), \quad (19)$$

где  $n_{1d}$  — концентрация электронов в полупроводнике, в котором уровень Ферми совпадает с локальным уровнем донорного атома, находим следующее выражение для концентрации дырок:

$$p = \frac{C_n^* [(N_a^+ - N_k \nu_k f_k)(1 - f_k) - n_1^* f_k] + C_p^* p_1^* (1 - f_k)}{C_p^* f_k - C_n^* (1 - f_k)}. \quad (20)$$

Для невырожденного полупроводника при комнатной температуре  $n \ll n_{1d} \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и поэтому практически в большинстве случаев  $N_a^+ \approx N_d$ , в том числе и при больших уровнях инжекции электронно-дырочных пар в пределах  $p_o \ll \Delta p \ll N_d$ . В этих случаях в выражении (20) можно заменить  $N_a^+$  на  $N_d$ , что существенно упрощает расчет концентрации дырок по этой формуле, которую мы специально выразили через  $f_k$  как независимый параметр, варьируемый в пределах  $0 \leq f_k \leq 1$  (точнее, в интервалах  $f_{min} \leq f_k \leq f_{max}$ , определяемых условием  $p > 0$ ). Для каждого  $f_k$  последовательно вычисляется  $\gamma$  по формулам (1) – (3),  $R_k$  – (8) – (10),  $C_n^*$ ,  $C_p^*$ ,  $n_1^*$  и  $p_1^*$  – (17) и  $g^*$  – (16). При этом параметры  $n_1$ ,  $p_1$ ,  $p_o$ ,  $C_n$ ,  $C_p$ ,  $r_k$ ,  $N_k$ ,  $\nu_k$ ,  $N_d$  задаются как характеристики полупроводника и содержащихся в нем КД. Время жизни ННЗ, связанное с рекомбинацией их через уровни КД, определяется с помощью (16) и (20) из уравнения

$$\Delta p = p - p_o = g^* \tau_k, \quad (21)$$

где  $p_o n_o = n_i^2$ ,  $n_o = N_d$ .

Таким образом, вместо решения сложных трансцендентных уравнений (16) – (20) для определения  $f_k$ ,  $\Delta p$  и  $\tau_k$  мы вычисляем неизвестные в этих уравнениях по обычным алгебраическим формулам, аргументом в которых выступает параметр  $f_k$ , варьируя который мы находим взаимнооднозначную связь между  $g^*$ ,  $f_k$ ,  $\tau_k$  и другими величинами, входящими в приведенные формулы.

Изложенная процедура расчетов реализована компьютерными методами. Получена серия зависимостей скорости (темпа) рекомбинаций  $1/\tau_k$  от интенсивности генерации ННЗ  $g^*$ , от концентрации КД —  $N_k$  и внутренних их параметров —  $\nu_k, \varepsilon_k, r_k$ , а также для разных  $N_d$  и других параметров полупроводника. Как и ожидалось, кластеризация точечных дефектов в многозарядные центры с тем же числом локальных уровней, акцепторных в п-полупроводниках, и донорных в р-полупроводниках существенно (на порядки) усиливает скорость рекомбинаций ННЗ. В то же время КД акцепторного типа в р-полупроводниках и донорного - в п-полупроводниках ослабляет процесс рекомбинаций при прочих равных условиях (тех же  $C_n, C_p$  и других параметрах).

Сказанное хорошо иллюстрируется рис.1, на котором приведены результаты расчета зависимости скорости рекомбинации ( $\tau_k^{-1}$ ) от числа локальных уровней  $\nu_k$  в каждом КД для кремния с концентрацией доноров  $N_d = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и концентрацией КД  $N_k = 10^{11} \text{ см}^{-3}$ .

Рис.1. Зависимость темпа рекомбинации ННЗ для двух интенсивностей их генерации:

1)  $g^* = 10^{18} \text{ см}^{-3}\text{с}^{-1}$ ; 2)  $g^* = 10^{20} \text{ см}^{-3}\text{с}^{-1}$

Установлено, что такие КД являются светочувствительными образованиями: при слабых уровнях генерации ННЗ ( $g^*\tau k \ll N_d$ ) скорость рекомбинации слабо зависит от степени кластеризации ( $\nu k$ ) и фактически пропорциональна  $N_k\nu k$ . В то же время при больших  $g^*$ , когда  $g^*\nu k \leq N_d$ , эти дефекты заряжаются и этим объясняется возрастание скорости рекомбинации на несколько порядков (см. рис.1, кривая 2) при увеличении  $\nu_k$  в несколько раз. На рис.2 показаны зависимости  $\tau - k - 1$  от  $g^*$  для ряда  $\nu_k$  в пределах от 1 до 10.

Индивидуальные особенности КД проявляются при малой их концентрации ( $N_k < 1010 \text{ см}^{-3}$ ) (на рис.2  $N_k = 108^{-3}$ ). Зависимость  $\tau_{k-1}$  от  $g^*$  для  $\nu_k = 5$  представлена на рис.3. в виде серии кривых для разных  $N_k$  в пределах  $108 < N_k < 1012 \text{ см}^{-3}$ . Оценки показывают, что при  $g^* \ll K\tau N_k\nu k$  скорость рекомбинаций в десятки раз больше, чем при  $g^* \gg K\tau N_k\nu k$ , где  $K\tau = 5.7 * 108 \text{ с}^{-1}$  для  $\nu_k = 5$  и  $K\tau = 8.7 * 108 \text{ с}^{-1}$  для  $\nu_k = 10$ . Так что кластеризация точечных рекомбинантных центров без потери их индивидуальных свойств увеличивает их эффективность ( $K\tau$ ) более чем в полтора раза только за счет электризационных эффектов. Это следует также из серии расчетов зависимостей  $\tau_{k-1}$  от  $g^*$  для разных концентраций основной легирующей примеси в полупроводнике (в нашем случае — доноров). Показано, что переход от низких интенсивностей генерации ННЗ ( $g^* \ll g_{\text{П}}$ ) к высоким ( $g^* > g_{\text{П}}$ ) определяется  $g_{\text{П}}$ , которое для  $N_k = 10^{11} \text{ см}^{-3}$ ,  $\nu_k = 5$  и  $\Delta\varepsilon_k = 0.4 \text{ эВ}$  составляет  $1,6 * 10^4 N_d^{-3-1}$ .

Рис.2. Зависимости  $\tau_{k-1}$  от  $g^*$  для ряда  $\tau_k$  в пределах от 1 до 10

Рис.3. Зависимость времени жизни от интенсивности освещения.

Для КД с  $\nu_k = 5$ ,  $r_k = 8,55 \text{ А}$  при различных концентрациях дефектов

В заключение следует отметить, что полученные результаты носят иллюстративный характер: коллективизация локальных уровней при кластеризации точечных дефектов может сделать их квантовыми объектами с иными рекомбинантными свойствами, чем обычная электризация, определяемая только кулоновским фактором  $\gamma$ . Кроме того, в зависимости от технологии полупроводника, его примесного состава, а также при облучении, закалке и других воздействиях могут образоваться скопления не только нано-, но и микродефектов разных размеров и примесного состава. Влияние их на свойства полупроводника не всегда аддитивно (скорее, наоборот). Тем не менее, предложенная выше методика расчетов влияния КД на параметры полупроводников может оказаться полезной и для анализа таких, более сложных случаев.

## Список литературы

- [1] Логинов Ю.Ю. *Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках А2В6* / Ю.Ю.Логинов, П.Б.Браун, К.Дьюроуз. — М: Логос, 2003.
- [2] Пузанов М.И. Классификация ростовых дефектов в кристаллах кремния, выращенных методом Чохральского / М.И.Пузанов, А.М.Эйдензон // Неорг.материалы. — 1995. — Т. 31. — С. 435-443.
- [3] Васильев А.В. *Дефектно-примесные реакции в полупроводниках* / А.В.Васильев, А.И.Баранов. — Новосибирск: Изд. СО РАН, 2001.
- [4] Коноплева Р.Ф. *Особенности радиационного повреждения полупроводников частицами высоких энергий* / Р.Ф.Коноплева, В.Л.Литвинов, Н.А.Ухин. — М: Атомиздат, 1971.

## CHARGE MODEL OF THE CLUSTER DEFECTS RECOMBINATION

V.M.Lenchenko, Y.Y.Loginov

*Shockley-Read's model of the electron and hole lifetime calculation in semiconductors adapted for a case of the point defects clusterization (for example, at high-temperature annealing or quench) that leads to the multicharge microdefects formation as a negatively charged centers in n-semiconductors and a positively charged centers in p-semiconductors. For minority carriers charge such clusters are Coulomb holes, running off minority in which leads to it recombination with the majority carriers. Quantitative estimations of the minority carriers speed recombination are made depending on the size of clusters, concentration of local levels in it and it depth in the energy gap. It is shown, that the point defects clusterization leads to increase of it recombination efficiency on orders in comparison with a case of it homogeneous distribution on a crystal.*