

## Математическое моделирование электронных процессов и кинетика ионизации глубоких уровней

Александр В. Буданов,	<sup>1</sup>	budanova9@gmail.com
Евгений А. Татохин,	<sup>1</sup>	tea.vsu@mail.ru
Геннадий И. Котов,	<sup>1</sup>	giktv@mail.ru
Дмитрий С. Сайко	<sup>2</sup>	dmsajko@mail.ru

<sup>1</sup> кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394066, Россия

<sup>2</sup> кафедра высшей математики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394066, Россия

**Реферат.** Предложена математическая модель кинетики перезарядки глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводника, учитывающая процессы обмена носителями заряда между глубокими уровнями и обеими разрешенными зонами, которая адекватно описывает неэкспоненциальный характер релаксации ёмкости. Разработан метод определения спектра глубоких электронных состояний, обладающий большей точностью и разрешающей способностью по сравнению с традиционными методами, использующими приближение времени релаксации. Представлены результаты численного эксперимента с использованием предлагаемой в работе модели кинетики перезарядки глубоких уровней в рамках предложенных приближений. Учёт генерационных и рекомбинационных составляющих процесса перезарядки всей совокупности глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводника приводит к выводу о том, что кинетика ионизации этих центров, в общем случае, не подчиняется бальцовской статистике. Учёт процессов обмена зарядами между различными глубокими уровнями оказывает существенное влияние на кинетику их перезарядки. Результаты численного анализа показывают, что процесс ионизации глубоких уровней имеет более сложный характер, чем подразумевают стадийные кинетики. Сделан вывод о том, что в большинстве случаев все стадийные кинетики при релаксационной спектроскопии глубоководных центров будут приводить к значительной методологической погрешности в определении параметров. Из результатов численного анализа следует, что плотность поверхностных электронных состояний оказывает существенное влияние в целом на кинетику перезарядки всех глубоких уровней. Проведенный с использованием данной математической модели анализ перезарядки донорных глубоких уровней выявил не только особенности ионизации глубоких уровней в полупроводнике, но и позволил дать ответ на некоторые вопросы, характерные для всей релаксационной спектроскопии глубоких уровней в целом.

**Ключевые слова:** глубокие уровни, нестационарная спектроскопия глубоких уровней, кинетика ионизации глубоких уровней

## Math modeling of electronic processes and deep level ionization kinetic

Aleksandr V. Budanov,	<sup>1</sup>	budanova9@gmail.com
Evgenii A. Tatokchin,	<sup>1</sup>	tea.vsu@mail.ru
Gennadii I. Kotov,	<sup>1</sup>	giktv@mail.ru
Dmitrii S. Sayko	<sup>2</sup>	dmsajko@mail.ru

<sup>1</sup> heat engineering and power system department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, Russia

<sup>2</sup> higher mathematics department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394066, Russia

**Summary.** Mathematical model of kinetics of charge deep levels in the forbidden band of the semiconductor, which takes into account the processes of carriers charge exchange between deep levels and both allowed bands, which adequately describes the nature of the non-exponential relaxation capacity, is proposed. A method for determining the spectrum of deep level transient spectroscopy having greater accuracy and resolution in comparison with traditional methods using a relaxation time approximation. The results of numerical experiments using the kinetics charge deep levels model in the frameworks of proposed approximations are presented. Account of generational and recombination components of charge exchange processes of all deep levels in the forbidden band of the semiconductor leads to the conclusion that the kinetics of ionization of these centers, in general, does not obey the Boltzmann statistics. Account of charge exchange processes between the deep levels a significantly effects on their recharge kinetics. Numerical analysis results show that the processes of deep levels ionization are more complicated than the staged-type kinetics. It is shown that in most cases staged-type kinetics at deep level transient spectroscopy leads to significant methodological error in the parameters determination. From the results of numerical analysis follows, that the density of surface electronic states has a significant impact on the overall recharged kinetics of deep levels. Donor deep levels recharge analysis revealed not only the features of the deep levels ionization in semiconductors, but also allowed to answer some questions that are typical to all deep-level transient spectroscopy in general.

**Keywords:** deep level, deep level transient spectroscopy, kinetics for ionizing the deep levels

Для цитирования

Буданов А. В., Татохин Е. А., Котов Г. И., Сайко Д. С. Математическое моделирование электронных процессов и кинетика ионизации глубоких уровней // Вестник ВГУИТ. 2016. № 2. С. 78–81. doi:10.20914/2310-1202-2016-2-78-86

For citation

Budanov A. V., Tatokchin E. A., Kotov G. I., Sayko D. S. Math modeling of electronic processes and deep level ionization kinetic. *Vestnik VSUET* [Proceedings of VSUET]. 2016. no 2 pp. 78–81 (in Russ.). doi:10.20914/2310-1202-2016-2-78-86

## Введение

Интерес к изучению спектра глубоких энергетических состояний в запрещённой зоне полупроводниковых материалов обусловлен тем, что они влияют на их параметры гораздо сильнее, чем мелкие центры локализации заряда [1]. Современная спектроскопия глубоких уровней (ГУ), в основном, сосредотачивает своё внимание только на определении параметров глубокоуровневых центров, таких как энергия ионизации, сечение захвата и концентрация. При этом вопрос об их состоянии в данный момент времени при конкретной температуре и напряжении остаётся не до конца изученным. Необходимость формирования таких представлений о кинетике перезарядки ГУ обусловлена двумя причинами. Во-первых, все методики спектроскопии ГУ являются релаксационными, то есть поведение каждого глубокоуровневого центра подчиняется закономерностям неравновесной статистики. Ввиду сложности этих закономерностей для анализа спектральных зависимостей используются упрощённые модели кинетики перезарядки ГУ [1–3].

Это влечёт за собой значительное увеличение методологической погрешности определения параметров этих центров [4]. Для снижения величины данной погрешности необходимо определить допустимые границы упрощения соответствующих математических моделей. Во-вторых, все полупроводниковые приборы, использующие принцип переключения, работают при неравновесных условиях, то есть поведение как свободных, так и связанных зарядов в них подчиняются тем же закономерностям неравновесной статистики.

Поскольку ГУ играют значительную роль в процессах термической генерации и рекомбинации неравновесных носителей заряда, то формирование чётких представлений о кинетике их ионизации позволит определить пути оптимизации функционирования таких приборов.

В настоящее время для анализа кинетики перезарядки дискретных ГУ используются стадийные модели [1–5]. Они предполагают, что каждый глубокоуровневый центр ионизируется в определённом узком интервале температур. Дальнейшее увеличение температуры не приводит к значительному изменению его состояния. Границы этого интервала определяются в первую очередь глубиной дискретного уровня. Величина же сечения захвата ГУ и его концентрация влияют, в большей степени, на скорость увеличения заряда на нём. Ионизированный ГУ при более высоких температурах уже не вносит

существенного вклада в изменение, например, ёмкости диода Шоттки или  $p$ - $n$ -перехода.

Таковыми свойствами обладает в первую очередь «одноуровневые» модели, в которых учитывается либо только термическая генерация носителей заряда с уровня в одну из разрешённых зон [1–2], либо как в работе [3] для ГУ, находящихся в середине запрещённой зоны, термоэмиссия электронов в зону проводимости и перезхват электронов из валентной зоны на ионизированный донор. Достоинством «одноуровневых» моделей является относительная простота их использования при анализе спектров ГУ. К числу недостатков следует отнести тот факт, что в них не учитываются процессы обмена носителями заряда между уровнями, а также процессы рекомбинации заряда на ГУ.

Частично устранить эти недостатки позволили «двухуровневые» модели [4, 5]. В работе [4] предложена кинетика перезарядки двух ГУ с учётом процессов термоэмиссии электронов с ГУ в зону проводимости, а также процессов обмена носителями заряда между уровнями и обеими разрешёнными зонами. В свою очередь в работе [5], была рассмотрена «двухуровневая» модель на базе кинетики Шокли–Рида, учитывающая помимо вышеназванных ещё и процессы рекомбинации свободных носителей заряда через эти ГУ. Рассматриваемые модели являются более точными, чем «одноуровневые». Тем не менее они также не лишены стадийного характера.

Деление процесса перезарядки ГУ в запрещённой зоне полупроводника на стадии является искусственным приёмом с одной стороны, облегчающим определение параметров центров локализации заряда, с другой – искажающим реальную картину этого явления. Перезарядка ГУ представляет собой непрерывный динамический процесс, характер которого определяется не только временем, температурой и величиной напряжения, подаваемого на структуру, но и совокупностью параметров всех уровней в запрещённой зоне полупроводника.

В связи со сказанным, целью работы является: во-первых, создание адекватной модели кинетики перезарядки дискретных глубокоуровневых центров в запрещённой зоне полупроводника, учитывающей влияние каждого из них на процессы генерации и рекомбинации свободных носителей заряда, во-вторых, применение данной модели для анализа характера ионизации донорных уровней в запрещённой зоне арсенида галлия (GaAs) – полупроводника, широко используемого в современной электронике.

## 1.1 Кинетика перезарядки глубоких уровней

Кинетика перезарядки ГУ в работе рассматривается без учёта влияния на процесс внешнего электрического поля. Для полупроводника, у которого в запрещённой зоне имеется  $m$  дискретных глубоких донорных уровней, будем считать, что при каждом значении температуры  $T$  на гетероструктуру подаётся импульс прямого напряжения смещения, и переводит систему из состояния термодинамического равновесия в отсутствие внешнего кулоновского поля в состояние термодинамического равновесия при наличии такового. После снятия со структуры внешнего напряжения система зарядов самопроизвольно возвращается в исходное состояние.

Все процессы, приводящие к перезарядке каждого конкретного ГУ, сопровождаются либо поглощением, либо выделением энергии в той или иной форме в единице объёма полупроводника. Для любого  $i$ -го энергетического состояния можно определить мгновенное значение объёмной плотности тепловой мощности процесса перезарядки, которая равна

$$\omega(i, t, T) = A(i, t, T) [N_i - n(i, t, T)] - B(i, t, T) n(i, t, T), \quad (1)$$

где  $i$ -ое энергетическое состояние характеризуется четырьмя параметрами ( $\sigma_p(i)$  – сечение захвата для дырок,  $\sigma_n(i)$  – сечение захвата для электронов,  $N_i$  – концентрация и  $E_i$  – энергия),  $t$  – время,  $A(i, t, T)$  – мгновенная мощность, поглощаемая при данной температуре  $T$  в процессе перезарядки  $i$ -го энергетического состояния,  $n(i, t, T)$  – концентрация дырок на  $i$ -ом энергетическом состоянии,  $B(i, t, T)$  – мгновенная мощность, выделяемая при данной температуре в процессе перезарядки  $i$ -го энергетического состояния. Следует отметить, что величины  $\omega(i, t, T)$ ,  $A(i, t, T)$  и  $B(i, t, T)$  с одной стороны являются функциями непрерывных переменных  $t$  и  $T$ , с другой – функциями дискретной переменной  $i$ .

Очевидно, что для каждого значения  $T$  перераспределение энергии, путём перехода носителей заряда из одного энергетического состояния на другое, будет осуществляться в направлении  $\omega(i, t, T) = \min_i$ . Кроме того, для данной температуры при выполнении условия  $\forall i \omega(i, t, T) = \text{const}$  в полупроводнике

достигается термодинамическое равновесное распределение зарядов. Исходя из этого, кинетику перезарядки ГУ, можно описать в виде следующего дифференциально-разностного уравнения

$$\frac{\partial n(i, t, T)}{\partial t} = \begin{cases} -\frac{\omega(i, t, T) - \omega(i+1, t, T)}{E_i - E_{i+1}} & \forall i \in [0, m] \\ \frac{\omega(i, t, T) - \omega(i-1, t, T)}{E_i - E_{i-1}} & i = m+1 \end{cases} \quad (2)$$

Граничные условия для системы уравнений (1–2) имеют вид:

$$\begin{cases} i=0, E_i = E_c, n(i, t, T) = [N_c(T) - n_e(t, T)], N_i = n_e(t, T) \\ i=m+1, E_i = E_v, n(i, t, T) = p(t, T), N_i = N_v(T) \end{cases}, \quad (3)$$

где  $E_c$  – нижний край зоны проводимости (ЗП),  $E_v$  – верхний край валентной зоны (ВЗ),  $N_c(T)$  – эффективная плотность состояний в ЗП,  $N_v(T)$  – эффективная плотность состояний в ВЗ,  $n_e(t, T)$  – концентрация свободных электронов в ЗП,  $p(t, T)$  – концентрация свободных дырок в ВЗ. Поскольку в зоне проводимости нет дырок, то величина  $n(0, t, T)$  интерпретируется как концентрация свободных мест для электронов.

Помимо граничных условий, на систему уравнений (1–2) налагаются начальные условия

$$\begin{cases} n_e(0, T) = n_{e0}(T) \\ p(0, T) = p_0(T) \\ n(i, 0, T) = n_0(i, T), \forall i \in [0, m+1] \end{cases}, \quad (4)$$

где  $n_{e0}(T)$  и  $p_0(T)$  – соответственно концентрации свободных электронов и дырок в начальный момент времени,  $n_0(i, T)$  – концентрация дырок на энергетических состояниях.

В уравнении (1) величина коэффициентов  $A(i, t, T)$  и  $B(i, t, T)$  определяется совокупностью процессов генерации и рекомбинации зарядов как в разрешённых зонах, так и на ГУ. Поэтому их можно представить в следующем виде

$$\begin{cases} A(i, t, T) = \alpha_n(i, t, T) + \alpha_p(i, t, T) \\ B(i, t, T) = \beta_p(i, t, T) + \beta_n(i, t, T) \end{cases}, \quad (5)$$

$$\alpha_n(i, t, T) = \sum_{j=0}^{i-1} [\sigma_n(i) V_n(T) n(j, t, T) \exp\left(\frac{E_i - E_j}{kT}\right) (E_j - E_i)] \quad (6)$$

поглощаемая мощность, обусловленная термоэмиссией электронов с  $i$ -го ГУ на дырки,

находящиеся на более высоких энергетических состояниях,  $k$  – постоянная Больцмана.

Для  $i = m + 1$  выполняются условия:

$$\sigma_n(i) = \sigma_p(j), V_n(T) = V_p(T).$$

Здесь  $V_p(T)$  и  $V_n(T)$  – тепловые скорости дырок и электронов соответственно. Последнее условие соответствует рекомбинации дырок на  $j$ -ых уровнях, за счёт перехода на них электронов из валентной зоны.

$$\alpha_p(i, t, T) = \sum_{j=i+1}^{m+1} \left[ \sigma_p(j) V_p(T) n(j, t, T) \exp\left(\frac{E_j - E_i}{kT}\right) (E_i - E_j) \right]. \quad (7)$$

Это соотношение описывает прирост энергии в единицу времени на  $i$ -ом энергетическом состоянии, обусловленный переходом с него электронов на дырки, расположенные на более низких уровнях, с последующей рекомбинацией этих зарядов. На это уравнение налагается граничное условие  $\sigma_p(m+1) = \sigma_n(i)$ , которое характеризует процесс рекомбинации электрона с ГУ и свободной дырки из валентной зоны.

Коэффициент

$$\beta_p(i, t, T) = \sum_{j=i+1}^{m+1} \left[ \sigma_n(j) V_n(T) [N_j - n(j, t, T)] \exp\left(\frac{E_j - E_i}{kT}\right) (E_i - E_j) \right]. \quad (8)$$

есть мощность, выделяемая при переходе на дырки, находящиеся на  $i$ -ом ГУ, электронов с более низких энергетических состояний. Как и в предыдущем случае, для этого соотношения имеется граничное условие  $\sigma_n(m+1) = \sigma_p(i)$ , которое характеризует процесс перехода электронов из валентной зоны на ионизированный ГУ.

Аналогично

$$\beta_n(i, t, T) = \sum_{j=0}^{i-1} \left[ \sigma_p(j) V_p(T) [N_j - n(j, t, T)] \exp\left(\frac{E_i - E_j}{kT}\right) (E_j - E_i) \right]. \quad (9)$$

есть энергия, выделяемая в единицу времени при переходе на дырки, находящиеся на  $i$ -ом энергетическом состоянии, электронов с более высоких уровней.

На это уравнение налагаются условия: при  $i = m + 1$   $\sigma_p(i) = \sigma_n(j)$ ,  $V_p(T) = V_n(T)$ , которые соответствуют рекомбинации дырок в валентной зоне за счёт падения на них электронов с более высоких уровней.

1.2 Анализ характера ионизации дискретных глубоких донорных уровней в арсениде галлия.

С целью выявления особенностей ионизации ГУ в GaAs при различных температурах, было проведено численное моделирование этого процесса для совокупности шести центров локализации заряда. Для определённости рассмотрим диод Шоттки  $Me - GaAs$ . Параметры этих уровней (таблица 1) были взяты из работы [6]. В работе предполагалось, что  $\forall i \in [1, m] \sigma_n(i) \approx \sigma_p(i)$ . Значение  $\sigma_p(0)$  и  $\sigma_n(0)$ , используемые при вычислении коэффициентов (6, 9), характеризующие прямые переходы зона-зона, оценивались из соотношения

$$\sigma = \left[ \tau_{\text{экс}} V_p(T_0) [N_v(T_0) - p(T_0)] \times \right. \\ \left. \times [N_c(T_0) - n_e(T_0)] \exp\left(-\frac{E_g}{kT_0}\right) \right]^{-1}, \quad (10)$$

где  $\tau_{\text{экс}} = 3,7 \cdot 10^{-7}$  с – экспериментальное значение времени жизни неравновесных носителей заряда при температуре  $T_0 = 300$  К [7],  $p(T_0)$  и  $n_e(T_0)$  – равновесные концентрации свободных носителей в зонах при данной температуре, определяемые из решения уравнения электронейтральности для GaAs с уровнем легирования  $\sim 10^{16}$  см<sup>-3</sup>,  $E_g$  – ширина запрещённой зоны арсенида галлия. При этом предполагалось, что  $\sigma_n(0) = \sigma_p(0) = \sigma$ .

Таблица 1

Параметры глубоких уровней

Table 1

Deep levels parameters

$i$	$E_c - E_i$ , эВ	$\sigma_n(i)$ , см <sup>2</sup>
1	0,13	$3 \cdot 10^{-16}$
2	0,2	$9 \cdot 10^{-16}$
3	0,35	$1,6 \cdot 10^{-14}$
4	0,41	$1,5 \cdot 10^{-14}$
5	0,6	$1,4 \cdot 10^{-13}$
6	0,84	$6 \cdot 10^{-14}$

Будем считать, что импульс напряжения прямого смещения, подаваемого на диод Шоттки и, выводящий систему из термодинамического равновесия, имеет амплитуду и длительность, обеспечивающие для каждой температуры на момент времени  $t = 0$  выполнение условий:

$$n_{e0}(T) = 0; p_0(T) = 0; n_0(i, T) = 0, \forall i \in [0, m + 1].$$

Результаты численного эксперимента с использованием предлагаемой в работе модели кинетики перезарядки ГУ в рамках описанных выше приближений представлены на рисунках 1–3. Из анализа этих зависимостей можно сделать следующие выводы.

Во-первых, рекомбинация заряда на энергетических состояниях оказывает существенное влияние на кинетику перезарядки ГУ. В частности, при релаксации системы в отсутствии внешнего электрического поля интенсивность процесса рекомбинации оказывается выше, чем если существует обратное смещение на диоде. Это приводит к смещению максимумов степеней ионизации ГУ в сторону более высоких температур (рисунки 1–2).

В частности, глубокие уровни  $i=1$  и  $i=2$  (рисунки 1–2, зависимости 1, 2) обычно не наблюдаются на реальных DLTS-спектрах при температурах выше 100 К. В этом случае эти центры локализации заряда регистрируются в температурном интервале от 100 до 200 К (рисунки 1а, 2а, зависимость D). Кроме того, ГУ  $i=5$  и  $i=6$  на реальных спектрах, измеренных при величине обратного смещения, наблюдаются в диапазоне температур (240–280) К и (320–380) К, соответственно. В этом случае ионизация ГУ начинается при температуре (рисунки 1–2, зависимости 5 и D). При этом существенной ионизации ГУ в диапазоне температур не происходит.

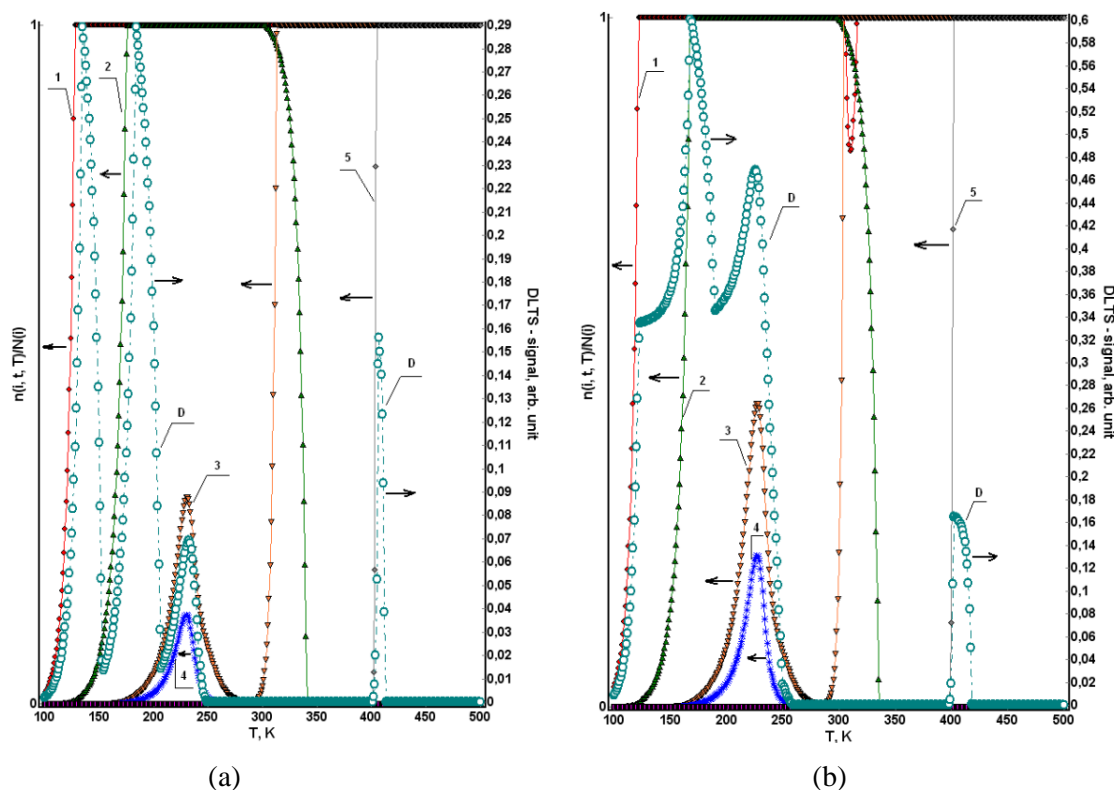


Рисунок 1. Температурные зависимости степени ионизации ГУ (1–5) и DLTS-спектр (D): (а) для момента времени  $t=1$  с, спектр рассчитан при  $t_1=0,1$  с,  $t_2=0,5$  с (б) для момента времени  $t=2$  с, спектр рассчитан при  $t_1=0,01$  с,  $t_2=1,9$  с ( $N_i=10^{13} \forall i \in [1,6]$ )

Figure 1. The temperature dependence of the degree of ionization DL (1–5) and DLTS-spectrum (D): (a) for points in time  $t=1$  s, the spectrum calculated at  $t_1=0,1$  s,  $t_2=0,5$  s (b) for points in time  $t=2$  s, the spectrum calculated at  $t_1=0,01$  s,  $t_2=1,9$  s ( $N_i=10^{13} \forall i \in [1,6]$ )

Во-вторых, учёт генерационных и рекомбинационных составляющих процесса перезарядки всей совокупности ГУ в запрещённой зоне полупроводника приводит к выводу о том, что кинетика ионизации этих центров в общем случае не подчиняется Больцмановской статистике.

Об этом свидетельствуют в первую очередь Аррениусовские зависимости (рисунок 3). Видно, что линейному закону подчиняются только четыре зависимости (рисунок 3, зависимости 1, 1а, 1б, 2). Значения энергий ионизации ГУ, рассчитанные на основании этих данных приведены в таблице 2.

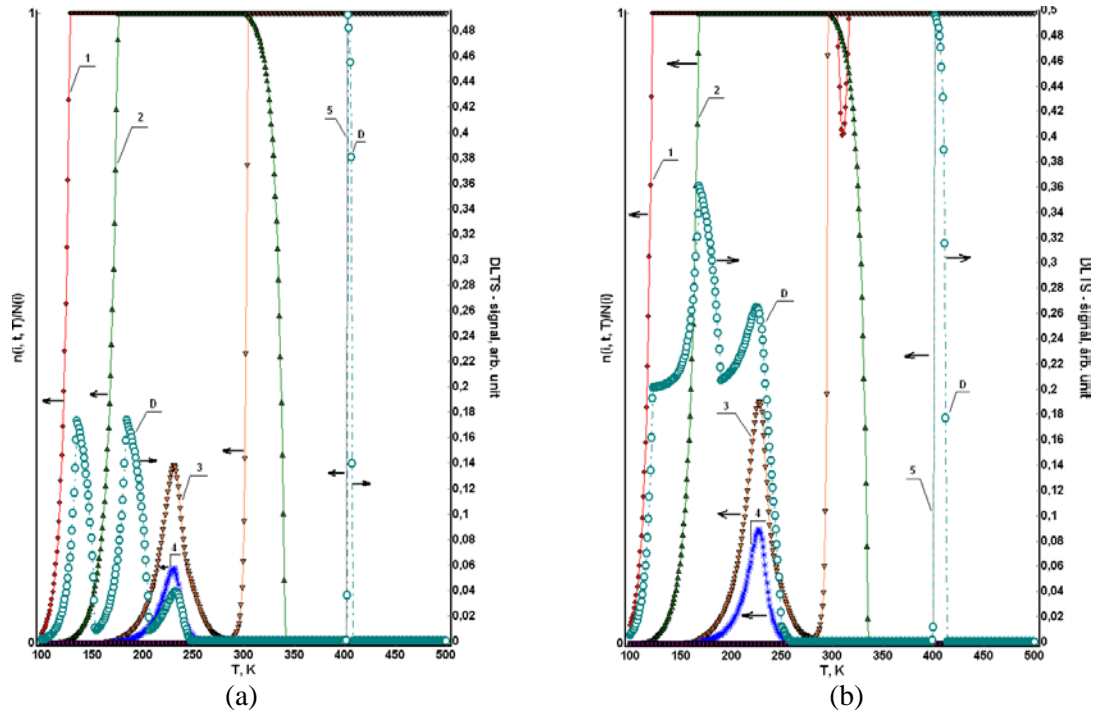


Рисунок 2. Температурные зависимости степени ионизации ГУ (1–5) и DLTS-спектр (D): (a) для момента времени  $t = 1$  с, спектр рассчитан при  $t_1 = 0,1$  с,  $t_2 = 0,5$  с (b) для момента времени  $t = 2$  с, спектр рассчитан при  $t_1 = 0,01$  с,  $t_2 = 1,9$  с ( $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 4] \wedge i = 6$ ;  $N_s \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ )

Figure 2. The temperature dependence of the degree of ionization DL (1–5) and DLTS-spectrum (D): (a) for points in time  $t = 1$  c, the spectrum calculated at  $t_1 = 0,1$  c,  $t_2 = 0,5$  c (b) for points in time  $t = 2$  c, the spectrum calculated at  $t_1 = 0,01$  c,  $t_2 = 1,9$  c ( $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 4] \wedge i = 6$ ;  $N_s \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ )

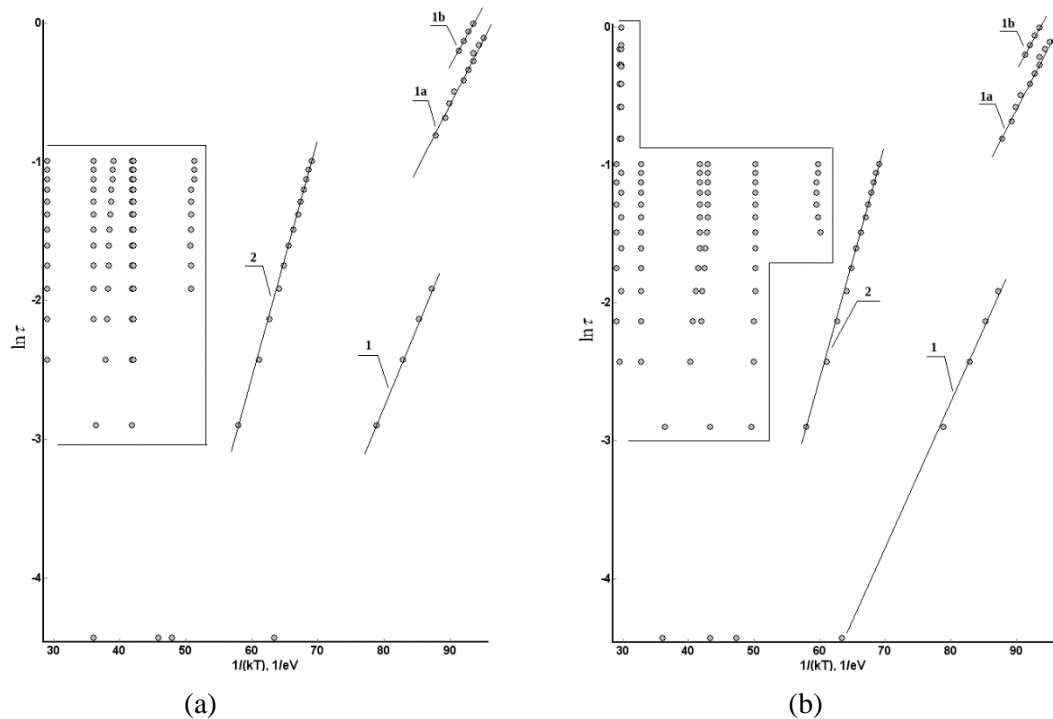


Рисунок 3. Аррениусовские зависимости для ГУ в GaAs, рассчитанные с использованием уравнений (1–2): (a)  $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 6]$ ; (b)  $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 4] \wedge i = 6$ ;  $N_s \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$

Figure 3. Arrhenius dependence for DL in GaAs, calculated using the equations (1–2): (a)  $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 6]$ ; (b)  $N_i i = 10^{13} \forall i \in [1, 4] \wedge i = 6$ ;  $N_s \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$

Таблица 2  
Рассчитанные значения энергии ионизации  
глубоких уровней

Table 2  
Simulated values of deep levels ionization energies

Рисунок	Зависимость	$E_c - E_i$ эВ
3-а	1	0,116
3-а	1а	0,095
3-а	1b	0,085
3-а	2	0,189
3-б	1	0,107
3-б	1а	0,096
3-б	1b	0,096
3-б	2	0,177

Как видно из таблицы 2, больцмановскому закону подчиняются кинетики перезарядки только низкотемпературных центров  $i = 1$  и  $i = 2$ , причём только в определённых временных интервалах (рисунок 3, зависимости 1 и 2). В то же время зависимости 1-а и 1-б на рисунок 3 можно считать проявлением ГУ  $i = 1$ . При этом наблюдается значительная погрешность в определении энергии ионизации, что свидетельствует о незначительном отклонении кинетики перезарядки этого центра от закономерностей больцмановской статистики. В тоже время для других ГУ (рисунок 3, выделенные области) это отклонение является более существенным. Если же исходить из предположения, что это не так, тогда следует вывод о бесконечно большой энергии ионизации ГУ с  $i > 2$  (зависимости в выделенных областях на рисунке 3 представляют собой практически вертикальные линии).

Очевидно, что электрическое поле, в зависимости от его направления, смещает динамическое равновесие между генерационными и рекомбинационными составляющими процесса перезарядки ГУ. Поэтому при подборе определённой величины напряжения обратного смещения, подаваемого на диод, можно снизить влияние процесса рекомбинации заряда на кинетику перезарядки ГУ, и добиться линеаризации соответствующих аррениусовских зависимостей (это и происходит при измерении реальных DLTS-спектров). Но, при этом оказывается, что получаемые значения энергий ионизации ГУ являются функционально зависимыми от величины напряжения обратного смещения.

В-третьих, процессы обмена зарядами между различными ГУ также оказывают существенное влияние на кинетику их перезарядки. Это приводит к тому, что ГУ, отвечающие условию  $E_i - E_{i+1} < 4kT$ , оказываются принципиально

неразличимыми при DLTS-спектроскопии по методу [2]. Этот факт следует из анализа зависимостей 3, 4 и D (рисунок 1-а, 2-а). Глубокие уровни  $i = 3$  и  $i = 4$  имеют характерные максимумы ионизации ( $T \approx 235$  K) и при этом формируют единственный пик на DLTS-зависимости. В случае построения DLTS-спектра при больших интервалах стробности (рисунок 1-б, 2-б; кривая D), в температурном интервале (100–275) K образуется DLTS-зависимость сложной конфигурации, представляющая собой суперпозицию сигналов от четырёх низкотемпературных ГУ ( $i = 1, 2, 3, 4$ ). При этом главный максимум DLTS-спектра на этом участке совпадает с температурой максимальной ионизации ГУ  $i = 2$ , а побочный – с температурой характерных максимумов ионизации уровней  $i = 3$  и  $i = 4$ . Изложенные факты косвенным образом подтверждаются и экспериментальными результатами. Оценки, проведённые по реальным DLTS-спектрам, показывают, что в температурном диапазоне ионизации ГУ  $i = 3$  и  $i = 4$  регистрируется один центр с энергией  $E = [E_c(0,486 \pm 0,307)]$  эВ. Величина абсолютной погрешности оказывается соизмеримой с энергией ионизации глубоководного центра  $i = 3$ .

В-четвёртых, из результатов численного анализа (рисунки 1, 2) следует, что процесс ионизации ГУ имеет более сложный характер, чем подразумевают стадийные кинетики, упомянутые выше. Например, кинетики, предлагаемые в работах [1–6, 8–10], не в состоянии объяснить существование экстремумов на температурных зависимостях степени ионизации для центров:  $i = 3$  и  $i = 4$  в диапазоне температур (175–275) K (рисунки 1, 2, зависимости 3, 4);  $i = 1$  в диапазоне температур (300–325) K (рисунки 1а, 2b, зависимости 1). Помимо этого, не объясняют они и того факта, что на ГУ  $i = 4$  и  $i = 2$  (рисунки 1–2, зависимости 4 и 2) при температурах 250 и 350 K соответственно, происходит полная рекомбинация дырок. В то же время, для других ГУ степень ионизации остаётся практически неизменной. Из всего этого следует вывод о том, что в большинстве случаев все стадийные кинетики [1–6] при релаксационной спектроскопии глубоководных центров будут приводить к значительной методологической погрешности в определении параметров этих ГУ. Максимальная же методологическая погрешность будет достигаться при определении концентраций центров, в случае использования кинетики перезарядки ГУ, предложенной в работах [1, 2].

В-пятых, как отмечалось в работе [3], глубоководные центры, лежащие ближе к середине запрещённой зоны полупроводника, из-за эффективного обмена зарядами с обеими разрешёнными зонами, оказывают существенное влияние на характер релаксации ёмкости. В случае арсенида галлия такими центрами являются поверхностные электронные состояния (ПЭС) ( $i = 5$ ). Из результатов численного анализа следует, что плотность поверхностных электронных состояний (ПЭС) оказывает существенное влияние в целом на кинетику перезарядки всех ГУ в GaAs. Сравнительный анализ DLTS-зависимостей (D) представленных на рисунках 1а – 2а и 1а – 2б, показывает, что увеличение концентрации ПЭС всего лишь на полпорядка приводит к существенному перераспределению амплитуд всех DLTS-пигов. Поскольку, согласно [1, 2], амплитуда DLTS-пика определяется концентрацией глубоководных центров, незначительное увеличение концентрации ПЭС приводит к значительной погрешности в определении концентрации других ГУ. Увеличение же концентрации ПЭС на два порядка приводит к тому, что область «нелинейности» на арсенидовских зависимостях, представленных на рисунке 3б (выделенная область), становится существенно шире, чем такая же область на рисунке 3а.

Кроме того, из сравнительного анализа данных, приведённых в таблице 2, следует, что концентрация ПЭС оказывает влияние и на точность определения энергий ионизации ГУ. Из всего сказанного можно сделать вывод, что

ПЭС выступают в качестве мостика, обеспечивающего рекомбинацию дырок на ГУ за счёт электронов из валентной зоны. Кроме того, по всей видимости, именно ПЭС ответственны за отмеченную выше рекомбинацию дырок на ГУ  $i = 4$  и  $i = 2$ . Тот факт, что плотность ПЭС является, вообще говоря, слабо контролируемым параметром, может служить объяснением существенного различия экспериментальных DLTS-спектров, получаемых на образцах из арсенида галлия одной и той же марки.

### Заключение

Рассмотрение модели кинетики перезарядки ГУ как динамического процесса энергообмена, обусловленного переходами зарядов в полупроводнике из одного энергетического состояния в другое, позволяет однозначно исследовать характер ионизации всей совокупности дискретных глубоких уровней, существующих в этом материале, с учётом процессов генерации и рекомбинации зарядов. Проведённый с использованием данной математической модели анализ перезарядки донорных глубоких уровней в арсениде галлия выявил не только особенности ионизации ГУ в этом полупроводнике, но и позволил дать ответ на некоторые вопросы, характерные для всей релаксационной спектроскопии глубоких уровней в целом. Предложенная в работе модель перезарядки ГУ, несмотря на её относительную сложность, на наш взгляд, может служить базой для разработки новых более точных методик спектроскопии ГУ.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1 Берман Л. С., А. А. Лебедев Ёмкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Л.: «Наука», 1981. 176 с.
- 2 Lang D. V. Deep level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors // J. Appl. Physics. 1974. V. 45. № 7. P. 3023–3033. DOI: 10.1063/1.1663719
- 3 Лебедев А. А. Ёмкостная спектроскопия глубоких уровней при обмене носителями тока с обеими разрешёнными зонами // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31. № 4. С. 437–440.
- 4 Татохин Е. А., Буданов А. В., Бутусов И. Ю. и др. Ёмкостная спектроскопия глубоких уровней при обмене носителями заряда между уровнями и обеими разрешёнными зонами // Вестник ВГУ. 2008. № 2. С. 60–70.
- 5 Mandelis A., Xia J. Deep level photothermal spectroscopy: Physical principles and applications to semi-insulating GaAs band-gap multiple trap states // J. Appl. Phys. 2008. № 103. P. 043704–1 – 043704–17. DOI:10.1063/1.2842401

- 6 Денисов А. А., Лактюшин В. Н., Садофьев Ю. Г. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней. // Обзоры по электронной технике. 1985. № 7. С. 54.
- 7 Шалимова К. В. Физика полупроводников. учеб. пособие для студентов. М.: «Энергоатомиздат», 1985. 392 с.
- 8 Гудзев В. В., Зубков М. В., Юлкин А. В. Программно-аналитическая база данных релаксационной спектроскопии глубоких уровней // Вестник РГРТУ. 2011. № 36. С. 75–81.
- 9 Khan A., Masafumi Y. Deep Level Transient Spectroscopy: A Powerful Experimental Technique for Understanding the Physics and Engineering of Photo-Carrier Generation, Escape, Loss and Collection Processes in Photovoltaic Materials // Solar Cells – New Approaches and Reviews. 2015. DOI: 10.5772/59419
- 10 Безрядин Н. Н., Котов Г. И., Каданцев А. В. и др. Методика регистрации и анализа изотермической релаксации ёмкости полупроводниковых гетероструктур // Приборы и техника эксперимента. 2010. № 3. С. 119–122.



## REFERENCES

- 1 Berman L. S. Emkostnaya spektroskopiya glubokich centrov v poluprovodnikach [Capacitive spectroscopy of deep centers in semiconductors] Leningrad, Nauka, 1981 (in Russian).
- 2 Lang D. V. Deep level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors. J. Appl. Physics. 1974, vol. 45, no 7, pp. 3023–3033. DOI: 10.1063/1.1663719
- 3 Lebedev A. A. Capacitive spectroscopy of deep levels in the exchange of carriers with both allowed zones. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and Technology of Semiconductor] 1997, vol. 31, no 4, pp. 437–441. (in Russian).
- 4 Tatokchin E. A. Capacitive spectroscopy of deep levels at carriers exchange between the two levels and allowed bands. *Vestnik VGU*. [Proceedings of VSU], 2008, no. 2, pp. 60–70. (in Russian).
- 5 Mandelis A., Xia J. Deep level photothermal spectroscopy: Physical principles and applications to semi-insulating GaAs band-gap multiple trap states. J. Appl. Phys. 2008, no. 103, pp. 043704–1 – 043704–17. DOI:10.1063/1.2842401
- 6 Denisov A.A., Laktyushin V.N., Sadof'ev Yu.G. Relaxation spectroscopy of deep levels. *Obzory po elektronnoi tekhnike* [Reviews in electronic engineering] 1985, no. 7, pp. 54 (in Russian).
- 7 Shalimova K.V. *Fizika poluprovodnikov* [Semiconductor physics]. Moscow, Energoatomizdat, 1985, 392 p. (in Russian).
- 8 Gudzev V.V., Zubkov M.V., Yulkin A.V. Software and analytical database relaxation spectroscopy of deep levels. *Vestnik RGRTU* [Proceedings of RSREU] 2011, vol. 36, pp. 75–81. (in Russian).
- 9 Khan A., Masafumi Y. Deep Level Transient Spectroscopy: A Powerful Experimental Technique for Understanding the Physics and Engineering of Photo-Carrier Generation, Escape, Loss and Collection Processes in Photovoltaic Materials. *Solar Cells – New Approaches and Reviews*, 2015. DOI: 10.5772/59419
- 10 Bezryadin N.N., Kotov G.I., Kadantsev A.V. Method of recording and analysis of isothermal capacitance relaxation semiconductor heterostructures. *Pribori i tekhnika experimenta* [Instruments and Experimental Techniques] 2010, vol. 3, pp. 119–122. (in Russian).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**Александр В. Буданов** д.ф.-м.н., доцент, зав. каф., кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, budanova9@mail.ru

**Евгений А. Татокчин** к.ф.-м.н., доцент, доцент, кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, tia.vsu@mail.ru

**Геннадий И. Котов** д.ф.-м.н., доцент, профессор, кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, giktv@mail.ru

**Дмитрий С. Сайко** д.ф.-м.н., профессор, зав. каф., кафедра высшей математики, Воронеж. гос. ун-т. инж. техн., пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, dmsajko@mail.ru

## КРИТЕРИЙ АВТОРСТВА

**Дмитрий С. Сайко** предложил методику проведения эксперимента и организовал производственные испытания

**Геннадий И. Котов** обзор литературных источников по исследуемой проблеме, провёл эксперимент, выполнил расчёты

**Александр В. Буданов** консультация в ходе исследования

**Евгений А. Татокчин** написал рукопись, корректировал её до подачи в редакцию и несёт ответственность за плагиат

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ПОСТУПИЛА 14.04.2016

ПРИНЯТА В ПЕЧАТЬ 18.05.2016

## INFORMATION ABOUT AUTHORS

**Aleksandr V. Budanov** Dr. Sci. (Phys.–Math.), associate professor, chief of department, physic, heat engineering and power engineering department, budanova9@mail.ru

**Evgenii A. Tatokchin** Cand. Sci. (Phys.–Math.), associate professor, associate professor of physic, heat engineering and power engineering department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, Russia, tia.vsu@mail.ru

**Gennadii I. Kotov** Dr. Sci. (Phys.–Math.), associate professor, professor of physic, heat engineering and power engineering department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, Russia, giktv@mail.ru

**Dmitrii S. Sayko** Dr. Sci. (Phys.–Math.), professor, chief of department, higher mathematics department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, Russia, dmsajko@mail.ru

## CONTRIBUTION

**Dmitrii S. Sayko** proposed a scheme of the experiment and organized production trials

**Gennadii I. Kotov** review of the literature on an investigated problem, conducted an experiment, performed computations

**Aleksandr V. Budanov** consultation during the study

**Evgenii A. Tatokchin** wrote the manuscript, correct it before filing in editing and is responsible for plagiarism

## CONFLICT OF INTEREST

The authors declare no conflict of interest.

RECEIVED 4.14.2016

ACCEPTED 5.18.2016