

深中心行为图形表示方法的探讨

阮圣央 张砚华 郑秉茹 杨锡权 吉秀江

(中国科学院半导体研究所)

1982年11月11日收到

提 要

利用几个特征能量参数,导出了表征 SRH 中心四个率参数相对比率大小的一组简单的关系式。这些关系能借助于几幅分区图形来形象地表示。以估算 p-n 结内深中心有效发射范围作为实例,说明了利用这样的图形来解决一些实际问题是很方便的。对早先已有的图形表示方法来说,可视为是一种发展和补充。

符 号

n, p	导带电子和价带空穴浓度	$\frac{kT}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}$
c_n, c_p	深中心对电子和对空穴的热发射率	
c_{ns}, c_{sp}	深中心对电子和对空穴的热俘获率	E_i^*
G_n, G_p	导带电子和价带空穴的非热产生率	本文定义的修正本征 Fermi 能级。
G_{nT}, G_{pT}	深中心上电子和空穴的非热填充率	$E_i^* = E_i - \frac{kT}{2} \ln \left(g \frac{c_n}{c_p} \right)$
g	深能级被电子占据的简并化因子	以 E_i^* 为中心时 E_T 的反射象。 $E'_T = 2E_i^* - E_T$
N_C, N_V	导带底和价带顶的有效态密度	E_{Fn}, E_{Fp}
N_T	深中心态密度	电子和空穴的准 Fermi 能级
n_T, p_T	被电子和被空穴占据的深中心密度	E_{Fn}^0, E_{Fp}^0
R_N	稳态下深中心的占据因子。 $R_N = \frac{n_T(\infty)}{p_T(\infty)}$	$p-n$ 结的 P 侧和 n 侧中性区内的平衡 Fermi 能级
E_C, E_V	导带底和价带顶能量	τ
E_T	深能级能量	σ_n, σ_p
E_i	本征 Fermi 能级。 $E_i = \frac{E_C + E_V}{2} +$	C_n, C_p
		率方程中深中心对电子和对空穴的热发射项
		率方程中深中心对电子和对空穴的热俘获项

一、引言

Shockley-Read、Hall 和 Sah 等^[1-3]提出和发展的载流子非平衡动力学原理已经被广泛地利用来分析各种和深中心有关的物理现象,如寿命、光电导、发光、结电容和电流的弛豫等等。这些现象中常常包含着在各种温度和掺杂条件下以及在不同的载流子注入和抽取状态下载流子的产生、复合与陷落过程。这些过程对半导体材料和器件的很多特性均会产生重要的影响。对这些现象的一般性分析涉及如下形式率方程组的求解

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn}{dt} = \sum_i (c_n^i n_T^i - c_n^i n p_T^i) + G_n \\ \dots \dots \end{array} \right. \quad (1a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn_T^i}{dt} = -c_n^i n_T^i + c_n^i n p_T^i + c_p^i p_T^i - c_p^i p n_T^i + G_{nT} - G_{pT} \\ \dots \dots \end{array} \right. \quad (1b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dp}{dt} = \sum_i (c_p^i p_T^i - c_p^i p n_T^i) + G_p \end{array} \right. \quad (1c)$$

在普遍情况下，这样方程组的求解是十分困难甚至是不可能的。因而许多现象的分析与实验结果的处理都是根据具体的对象对方程组中各项进行一定的取舍，从而使算式简化后才完成的。

C. T. Sah^[4,5] 在研究和发展 SRH 中心的动力学原理过程中，曾提出过若干图形表示方法。这些图形生动地概括了非平衡过程中深中心的行为及其在不同条件下的转化，给理论概念的描述和实际问题的简化处理带来很大方便。

近几年来，包括各种电容、电流方法在内的结实验技术取得了很大发展^[6,7]，成为深能级电学参数测量的最灵敏和方便的技术之一。由于对结空间一般作耗尽近似处理，大大简化了实验分析。但随着人们对实验精确性的进一步追求，以及测量深中心空间分布和电学参数电场效应等的需要，又促使许多作者对理想耗尽的模型进行修正，并在实验的设计和分析中对结空间内深中心有效发射区域的界限问题作了不同程度的考虑。在涉及这样的问题时，我们受到 Sah 利用图形表示方法的启发，根据一些简单的推导，得到了几幅新的图形，并利用它们来估算深中心有效发射区两端的边界，非常直接而方便地取得了结果，从而帮助了我们进行某些实验方法的设计构思。以下我们对这样的图形表示作一介绍。

二、数学推导和图形表示

假定在我们讨论的范围内细致平衡原理始终适用，即对某一深中心

$$\left\{ \begin{array}{l} c_n = g c_n N_c \exp \frac{E_T - E_C}{kT} \end{array} \right. \quad (2a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} c_p = g^{-1} c_p N_V \exp \frac{E_V - E_T}{kT}. \end{array} \right. \quad (2b)$$

同时假定系统非简并化，因此导带电子和价带空穴浓度符合以下的 Boltzmann 统计关系：

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_c \exp \frac{E_{Fn} - E_C}{kT} \end{array} \right. \quad (3a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p = N_V \exp \frac{E_V - E_{Fp}}{kT}. \end{array} \right. \quad (3b)$$

从以上两点基本假定出发，可得如下一组形式简单的关系式：

$$\frac{c_n}{c_n n} = g \exp \frac{E_T - E_{Fn}}{kT} \quad (4a)$$

$$\frac{c_p}{c_p p} = g^{-1} \exp \frac{E_{Fp} - E_T}{kT} \quad (4b)$$

$$\frac{c_n}{c_p} = g \exp \frac{2(E_T - E_i^*)}{kT} \quad (4c)$$

$$\frac{c_n n}{c_p p} = g^{-1} \exp \frac{E_{Fn} + E_{Fp} - 2E_i^*}{kT} \quad (4d)$$

$$\frac{c_n}{c_p p} = \exp \frac{E_{Fp} - E'_T}{kT} \quad (4e)$$

$$\frac{c_p}{c_n n} = \exp \frac{E'_T - E_{Fn}}{kT} \quad (4f)$$

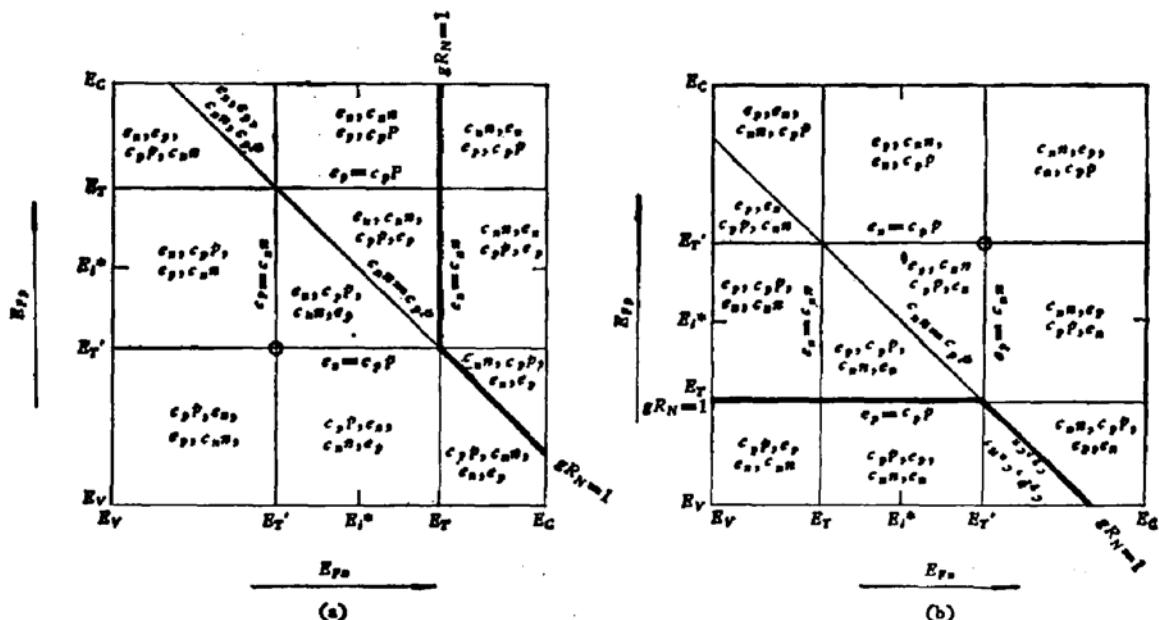
在推导中, 我们引入了两个特征能量参数 E_i^* 和 E'_T , 它们的定义分别是

$$E_i^* = E_i - \frac{kT}{2} \ln \left(g \frac{c_n}{c_p} \right), \quad (5a)$$

$$E'_T = 2E_i^* - E_T. \quad (5b)$$

式 (5a) 表明, E_i^* 实际上可看成是一个经修正的本征 Fermi 能级。修正量的大小取决于深中心对电子和对空穴俘获几率的比值与简并化因子的乘积 $g \frac{c_n}{c_p}$ 。如若 $g \frac{c_n}{c_p} = 10^3$, 则修正量约为 $3.5kT$ 。此外, 由式 (5b) 不难看出, E'_T 乃是以 E_i^* 为基准时深能级 E_T 的对称反射像。

式 (4a-f) 表明, 深中心四个“率参量”(即 c_n 、 c_p 、 $c_n n$ 和 $c_p p$) 的相对比率大小, 基本上是由 E_T 、 E_i^* (或 E'_T)、 E_{Fn} 和 E_{Fp} 等四个能量在带隙中的相对位置来决定。如果 $g =$



(a) 电子发射陷阱 $E_T > E_i^*$, $c_n > c_p$

(b) 空穴发射陷阱 $E_T < E_i^*$, $c_p > c_n$

图 1 电子和空穴准 Fermi 能级处于带隙中不同位置时深能级各率参量的大小次序变化情况。
带圆圈的点表示等同点 (E'_T , E'_T)。加粗的实线为方程 $gR_N = 1$ 所确定的深中心稳态等占据线

1, (即使 $g \approx 1$, 但由于 kT 在通常情况下是个很小的量, g 的作用比起后面的指数因子来也是很次要的.) 则我们可以把式 (4a—f) 所描写的一组大小关系用两幅分区图形来表示, (见图 1(a)、(b))

图 1(a) 和 (b) 分别代表深能级 E_T 在修正本征 Fermi 能级以上和以下的情形. 显而易见, 这两种情形分别与关系 $c_n > c_p$ 和 $c_p > c_n$ 相对应. (参见式 (4c)) 在以 E_{Fn} 和 E_{Fp} 为坐标轴的直角坐标系中, 这两幅图又各被五条直线划分为十二块区域. 每条直线分别代表某两个率参数相等的关系. (参见式 4a, b, d, e, f) 在每块区域中我们按数值由大到小的顺序把各率参数的符号排队列出.

这样我们就得到了两幅用来描写各率参数相对大小变化情况的新的图形. 下面我们再来研究率方程 (1b) 中各发射、俘获项在不同情况下的大小关系.

在自由载流子浓度 n 和 p 不随时间改变以及 $G_{nT} = G_{pT} = 0$ 的情况下, 方程 (1b) 有如下的指数弛豫解

$$n_T(t) = [n_T(0) - n_T(\infty)] \exp(-t/\tau) + n_T(\infty) \quad (6)$$

其中

$$\tau = (c_n + c_p + c_n n + c_p p)^{-1} \quad (6a)$$

$$n_T(\infty) = (c_p + c_n) \tau N_T \quad (6b)$$

此处 τ 为指数过程的弛豫时间常数, $n_T(\infty)$ 则是稳态条件下被电子占据的深中心浓度.

如果考虑深中心被电子和空穴占据的比例因子 R , 则

$$R = \frac{n_T(\infty)}{N_T - n_T(\infty)} = \frac{c_p + c_n n}{c_n + c_p p} \quad (7)$$

利用式 (4e), (4f) 和式 (7), 我们又可得到另一组表征深中心各发射、俘获项 (以下简称“项”) 相对大小的新的关系式:

$$\left| \frac{\mathcal{E}_n}{C_n} \right|_{t \rightarrow \infty} = \frac{c_n n_T(\infty)}{c_n n p_T(\infty)} = \frac{1 + \exp(E'_T - E_{Fn})/kT}{1 + \exp(E'_T - E_{Fp})/kT} \quad (8a)$$

$$\left| \frac{\mathcal{E}_p}{C_p} \right|_{t \rightarrow \infty} = \frac{c_p p_T(\infty)}{c_p p n_T(\infty)} = \frac{1 + \exp(E_{Fp} - E'_T)/kT}{1 + \exp(E_{Fn} - E'_T)/kT} \quad (8b)$$

$$\left| \frac{\mathcal{E}_n}{\mathcal{E}_p} \right|_{t \rightarrow \infty} = \frac{c_n n_T(\infty)}{c_p p_T(\infty)} = \frac{1 + \exp(E_{Fn} - E'_T)/kT}{1 + \exp(E'_T - E_{Fp})/kT} \quad (8c)$$

$$\left| \frac{C_n}{C_p} \right|_{t \rightarrow \infty} = \frac{c_n n p_T(\infty)}{c_p p n_T(\infty)} = \frac{1 + \exp(E_{Fp} - E'_T)/kT}{1 + \exp(E'_T - E_{Fn})/kT} \quad (8d)$$

$$\frac{\mathcal{E}_n}{C_p} = \frac{c_n n_T}{c_p p n_T} = \exp(E_{Fp} - E'_T)/kT \quad (8e)$$

$$\frac{\mathcal{E}_p}{C_n} = \frac{c_p p_T}{c_n n p_T} = \exp(E'_T - E_{Fn})/kT \quad (8f)$$

这一组关系表明, 各“项”的相对比率大小也只决定于 E_{Fn} , E_{Fp} 和 E_T 几个能量在带隙中的相对位置. 仿照图 1, 我们可以把这一组关系画成图 2 来表示.

图 2(a) 中有四条直线把整个空间划分为八块区域, 其中两条为横坐标轴和纵坐标轴, 另外两条和坐标轴呈 45° 角, 它们分别和某两个“项”相等的关系相对应 (参见式

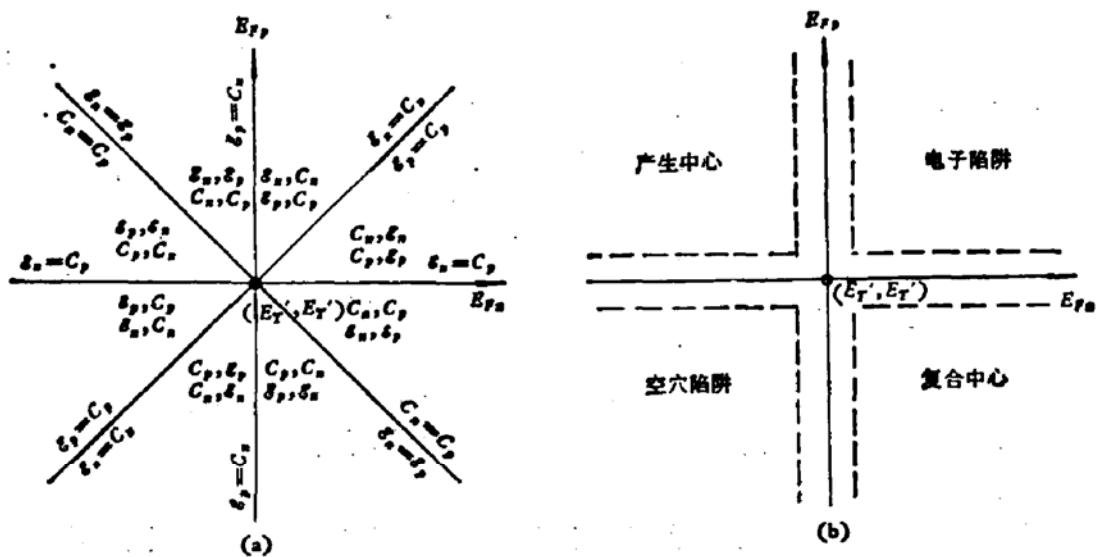


图 2

(a) 在静态条件下电子和空穴准 Fermi 能级处于带隙中不同位置时各发射、俘获项的大小次序变化情况。(b) 各象限中深能级的行为特征。四个“项”相等的坐标原点 (E_T^*, E_T') 即文献 [5] 所称的“等同点”。

(8a)–(8f)). 同样, 我们也在每个区域内按数值从大到小的顺序把各“项”的名称标出。

如果我们援用 Sah 在文献[5]中所用过的有关电子陷阱、产生中心、空穴陷阱和复合中心的定义, 则不难看到, 此图的 I、II、III、IV 象限内各点正好分别具备这四类中心的特性, 而坐标原点也就是那里定义过的, 满足 $\mathcal{E}_n = \mathcal{E}_p = C_n = C_p$ 关系的“等同点”。因此可以说, 这幅图除开所取坐标参量的差别外, 所表现的物理内容和文献[5]中的图 2、3 在本质上是相同的。不过为了使我们说明问题的体系与原有的某些经典的说法相关联, 在这里仍把这样的图形截出。

由式 (8a)–(8d) 可看到, 在每个象限内, 在离坐标轴几个 kT 以外的广大区域内, 四“项”中最大的两者就近似相等且居绝对统治地位。也就是说, 在这样的广大区域内, 以上四类中心的行为特征都是表现得异常逼真的。图 2(b) 正表现着这样的意思。

近年来, 在结实验的分析中, 对应 n 型材料和 P 型材料的多子注入结实验所观察到的深中心, 经常有人使用“电子发射陷阱”和“空穴发射陷阱”这样的称呼, 但也有不少作者仍把这些中心叫做“电子陷阱”和“空穴陷阱”。从前一类称呼的含义看来, “电子发射陷阱”应指具有 $\epsilon_n \gg \epsilon_p$ 这样一种特性的中心, 而“空穴发射陷阱”则应指具有 $\epsilon_p \gg \epsilon_n$ 这样特性的中心。本文前面已提到, 具有这样两种特性的中心实际上就是能级位置 E_T 在修正本征 Fermi 能级 E_F^* 以上和以下的中心。因此 E_F^* 乃是区分这两类中心的特征标志线。比起一般常用的粗略标志线 E_F 来说, 它考虑了由于对两种载流子俘获几率的差异以及当简并化因子不为 1 时所应有的修正。前面的图 1(a)、(b) 分别表示了这两类发射陷阱的行为。

将图 1 和图 2 对照可看出, “电子发射陷阱”和“空穴发射陷阱”只在某些场合下才分别表现为“电子陷阱”和“空穴陷阱”, 而在其它场合下可表现为产生中心或复合中心, 甚至表现为另一种型号载流子的陷阱。由于“发射陷阱”和“陷阱”的这种本质区别, 所以我们

在本文的讨论中都从名称使用上将它们严格加以区分。

模仿文献 [5] 的作法，在本文图 1、2 中添上一些等占据线也是很容易的。利用式(7)、(4d)–(4f) 和 (5b) 可得出中心的占据因子

$$R_N = g^{-1} \exp \frac{E_{Fn} + E_{Fp} - 2E_i^*}{kT} \cdot \frac{1 + \exp(E'_T - E_{Fn})/kT}{1 + \exp(E_{Fp} - E'_T)/kT}. \quad (9)$$

只要在四个象限中分别讨论，便可得如下的等占据线方程：

$$E_{Fn} = E_T + kT \ln g R_N \quad \text{第 I 象限} \quad (9a)$$

$$E_{Fp} = E_T + kT \ln g R_N \quad \text{第 III 象限} \quad (9b)$$

$$E_{Fn} + E_{Fp} = 2E_i^* + kT \ln g R_N \quad \text{第 IV 象限} \quad (9c)$$

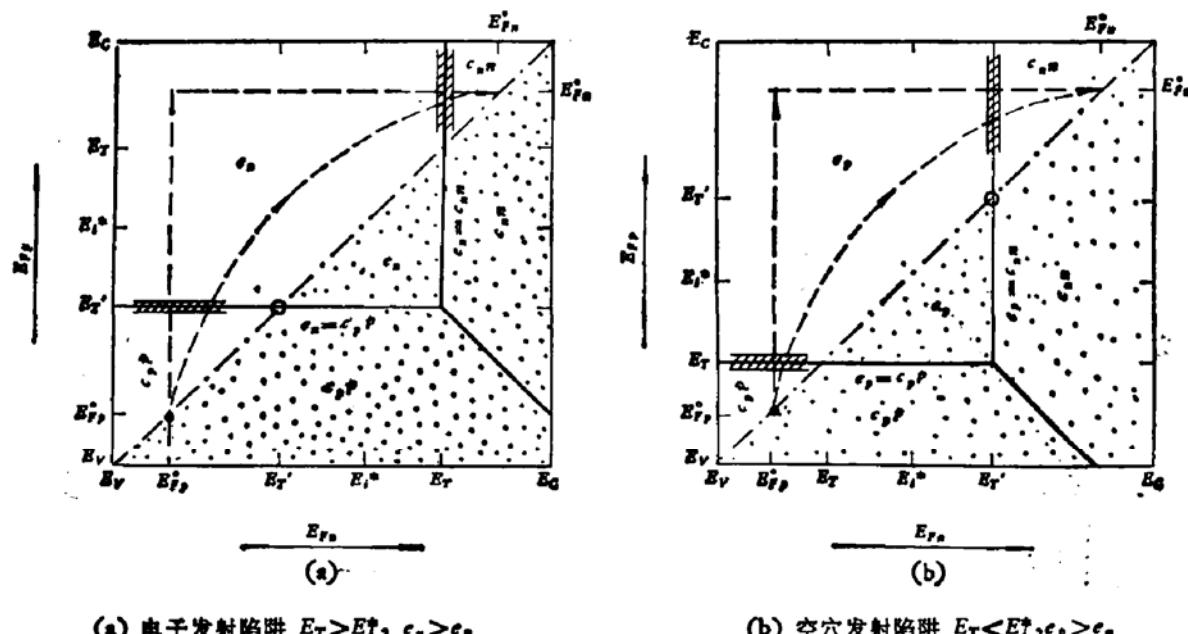
可见，在以上三个象限中，等占据线分别为竖直的、水平的和呈 -45° 倾斜的相互平行的直线簇。

在图 1(a)、(b) 中我们特别标出对应 $gR_N = 1$ 的等占据线轨迹。当中心为电子发射陷阱时，它在第 I 象限中为由 $E_{Fn} = E_T$ 所确定的竖直线；在到达 (E_T, E'_T) 点后，拐成 -45° 斜线；然后在第 IV 象限内延伸。（见图 1(a)）在此线右侧的区域内 $gR_N > 1$ ，但只要离线几个 kT 以外，便可认为中心完全被电子占据；在此线左侧区域内 $gR_N < 1$ ，但只要离线几个 kT 以外即可认为中心完全被空穴占据。当中心为空穴发射陷阱时， $gR_N = 1$ 对应的等占据线在第 III 象限内为由 $E_{Fp} = E_T$ 所表示的水平线，在到达 (E'_T, E_T) 点后拐成 -45° 斜线，然后在第 IV 象限内延伸（见图 1(b)）。与上类似，在离线几个 kT 以上或以下的区域即可认为中心分别被电子或空穴完全占据。由于推导所用近似，因此拐点附近的轨迹是有误差的。

以上的几幅分区图形在实际使用中将会给我们带来许多方便之处。首先它给出各种情况下深能级各个率参量或各发射、俘获项相对大小的详细资料，便于我们在分析具体问题时进行合理的取舍来实现问题的简化。其次是它们指出了各种情况下深中心所表现的行为特征及其转化规律，这就有助于对非平衡动力学的一般原理作形象化的理解。第三，从这些图形可以直接导出某些物理规律。以下我们仅借助图形表示来对 p-n 结区中深中心有效发射范围进行估算，作为实例。

三、p-n 结区内深中心有效发射范围的估算

从分区图形 1(a)、(b) 几乎可以一目了然地完成这种估算。为了清楚起见，我们把图 1(a)、(b) 加以简化，只取各区域中占统治地位的一个率参量，这样每幅图中均只包含三个区，即 c_{nn} 、 c_{pp} 和 c_n （或 c_p ）占优势的区域。（如图 3(a)、(b) 所示）除此之外，我们画出与方程 $E_{Fn} = E_{Fp}$ 相对应的 45° 斜线，此线相当于系统的热平衡或 p-n 结的零偏状态。在斜线右下侧的阴影区内， $E_{Fn} > E_{Fp}$ ，显然这与载流子的注入状态或 p-n 结的正偏状态相对应。在斜线左上侧的非阴影区内， $E_{Fp} > E_{Fn}$ ，显然这与载流子的抽取状态或 p-n 结的反偏状态相对应。在反偏 p-n 结样品中，当我们把观察点从 P 侧中性区穿越整个势垒区移到 n 侧中性区时，就相当于在图 3(a)、(b) 中从 (E_{Fp}^0, E_{Fn}^0) 点沿某一条带箭头的虚线走到 (E_{Fn}^0, E_{Fn}^0) 点。这里 E_{Fp}^0 和 E_{Fn}^0 分别为 P 侧中性区和 n 侧中性区中两种



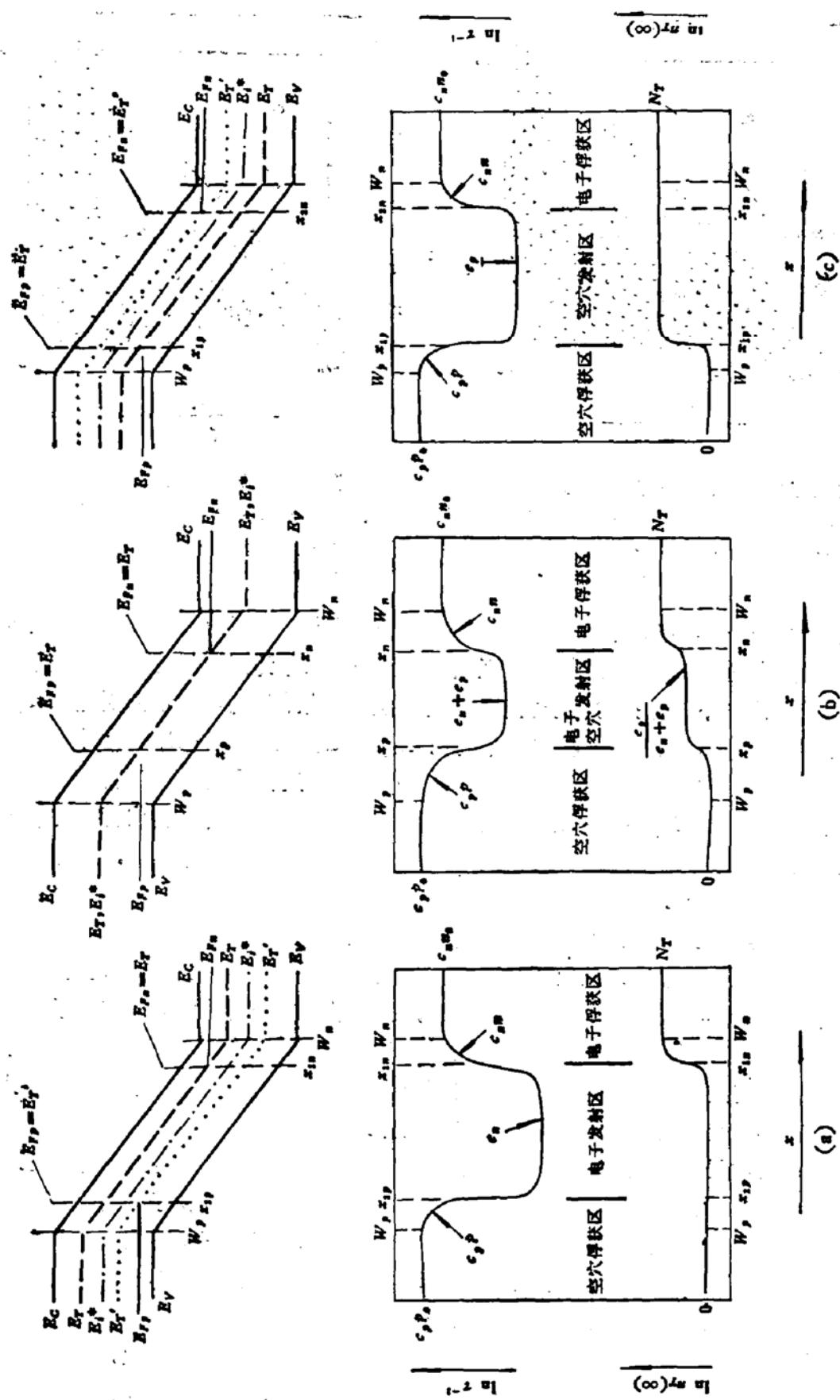
(a) 电子发射陷阱 $E_T > E_{Fp}^0, c_s > c_p$, (b) 空穴发射陷阱 $E_T < E_{Fn}^0, c_s > c_p$

图3 当只取占统治地位的一个率参量时,由图1简化而来的分区图形。阴影部分代表载流子注入区,非阴影部分为抽取区。带箭头虚线表示观察点从反偏 p-n 结的 P 中性区移到 n 中性区时所对应的通过路线。——代表深中心有效发射区边界

载流子统一的 Fermi 能级。不管这种移动沿着哪一条虚线,也不论 E_{Fp}^0 和 E_{Fn}^0 的具体数值如何,只要 E_{Fp}^0 和 E_{Fn}^0 均在 $[E'_T, E_T]$ 区间以外,(因为 E_T 为深能级能量,此条件自然满足)就不难看到如下规律:对电子发射陷阱来说,占统治地位的率参量都要经历 $c_{pp} \rightarrow c_n \rightarrow c_{nn}$ 这样的转化,前、后两个转化点分别在 $E_{Fp} - E'_T$ 和 $E_{Fn} - E_T$ 处;对空穴发射陷阱来说,占统治地位的率参量都要经历 $c_{pp} \rightarrow c_p \rightarrow c_{nn}$ 这样的转化,前、后两个转化点分别在 $E_{Fp} - E_T$ 和 $E_{Fn} - E'_T$ 处。这样,我们就可按深中心行为的转化特征对 p-n 结实行空间划分——即分为空穴俘获区、电子(或空穴)发射区和电子俘获区。这样的分区图见图4(a)、(b)和(c)。

在结实验中,人们最常用 p^+-n 结或 n^+-p 结来作为样品,并且实验结果是反映浅掺杂质浓度较低一侧内发生的事情。从上面关于 p-n 结中深能级行为转化点的结论可以看出,无论是在 p^+-n 结的 n 侧或是在 n^+-p 结的 P 侧,凡多子发射陷阱的发射区与多子俘获区(也称过渡区或结边缘区)的交界都在多子准 Fermi 能级与深能级 E_T 的交叉处,凡少子发射陷阱的发射区与过渡区的交界都在多子准 Fermi 能级与深能级镜象 E'_T 的交叉处。我们把这两类交界分别称为第一类交界和第二类交界。

在本文引言中已说过,深中心有效发射范围的估算对某些结实验具有重要意义。不少作者曾在工作中讨论过这方面问题^[8,9],但他们讨论的多半是针对多子发射陷阱参数的测量,因而所涉及的也多半是第一类交界。1981年 H. G. Grimmeiss 等发表过一篇专门介绍结测量基本原理的文章^[10],其中在计算 p-n 结内深中心发射电流时,所用的有效发射区第一类边界为 $E_{Fn} - E_T$ 处,这是所有人一致公认的位置;而第二类交界则是规定在价带空穴浓度与第一类边界处的导带电子浓度具有相等数值的空间位置上。显然,这样的选择原则隐含着深中心对两种载流子俘获几率相等的假定。在本文中,我们所提供的



(a) 电子发射陷阱 $E_T > E_T^*$, $e_p \gg e_n$
 (b) 混合发射陷阱 $E_T \approx E_T^*$, $e_p \approx e_n$
 (c) 空穴发射陷阱 $E_T < E_T^*$, $e_p \gg e_n$

图 4 根据深中心行为转化而画出的 p-n 结分区示意图

估算则已考虑了 c_n 和 c_p 不相等情况下所需的修正。

众所周知, 多子发射陷阱参数的测量所涉及的问题较少, 容易做到准确, 因而使用也最多。但在不少的情况下, 少子发射陷阱的测量却具有特殊的重要性, 甚至是必不可少的技术。然而由于它牵涉的问题较多, 在一定程度上限制了它的使用范围。从以上所估算的第二类交界将有助于考虑以下测量项目的建立, 如少子发射陷阱空间分布的测量, 参数电场效应的测量以及在低反偏压条件下如何使结果准确化的测量等等。在这些方面我们作了一些工作, 限于本文讨论范围, 就不在此叙述了。

参 考 文 献

- [1] W. Shockley and W. T. Read, *Phys. Rev.*, **87**, 835(1952).
- [2] R. N. Hall, *Phys. Rev.*, **83**, 228(1951); **87**, 387(1952).
- [3] C. T. Sah, R. N. Noyce and W. Shockley, *Proc. IEE.*, **45**, 1228 (1957).
- [4] C. T. Sah and W. Shockley, *Phys. Rev.*, **109**, 1103(1958).
- [5] C. T. Sah, *Proc. IEEE*, **55**, 654(1967); **55**, 672(1967).
- [6] C. T. Sah, L. Forbes, L. L. Rosier and A. F. Tasch, *Solid-State Electron.*, **13**, 759(1970).
- [7] D. V. Lang, *J. Appl. Phys.*, **45**, 3023(1974).
- [8] G. Vincent, *Appl. Phys.*, **23**, 215(1980).
- [9] H. Lefevre, M. Schulz, *Appl. Phys.*, **12**, 45(1977).
- [10] H. G. Grimmeiss and C. Ovrenf, *J. Phys. E, Sci. Instrum.*, **14**, 1032(1981).

Study of the Graphic Representation for the Behaviour of Deep Centres

Ruan Shengyang, Zhang Yanhua, Zhen Bingru,

Yang Xiquan and Ji Xiujiang

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

Abstract

A group of simple relationships which express the ratios between the four rates of SRH centres has been deduced using several characteristic energy parameters. These relationships can be illustrated by a group of diagrams divided into some regions. These diagrams are very convenient for solving some problems. This has been exemplified by the estimation of the effective ranges for emission region of deep centres in p-n junction. This work may be regarded as a development and a complement for the previous graphic representations.