

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**Caracterização de níveis de defeitos próximos à banda de
valência em GaAs implantado com prótons***

Matheus Coelho Adam

Monografia elaborada sob a orientação do prof. Dr. Henri Ivanov Boudinov e co-orientação do pesquisador Dr. Artur Vicente Pfeifer Coelho como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Física.

Porto Alegre

2010

*Trabalho parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Resumo

No presente trabalho, foi utilizada a técnica de Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS - *Deep Level Transient Spectroscopy*) para identificar e caracterizar níveis profundos com energias mais próximas à da banda de valência do GaAs introduzidos por implantação de prótons. Dois níveis foram identificados: um com energia $E_{t_1} = E_v + 0.08\text{eV}$ e seção de choque de captura de lacunas $\sigma_{p_1} = 4 \times 10^{-15}\text{cm}^2$; e outro com energia $E_{t_2} = E_v + 0.1\text{eV}$ e seção de choque $\sigma_{p_2} = 2.5 \times 10^{-15}\text{cm}^2$. A evolução da concentração destes defeitos com a temperatura para passos de tratamento térmico rápido também foi estudada. O tratamento térmico rápido dessas amostras a temperaturas entre 150 e 200°C causa o surgimento de um terceiro nível profundo. Para todos os defeitos, uma etapa de forte diminuição na concentração foi identificada a temperaturas em torno de 250 a 300°C. A variação da taxa de emissão do primeiro nível (E_{t_1}, σ_{p_1}) com o campo elétrico pôde ser descrita utilizando-se, simultaneamente, o efeito Poole-Frenkel e a teoria de tunelamento auxiliado por fônons. O ajuste dos dados experimentais aponta para uma transição de estado de carga do tipo $0/-$. Já a taxa de emissão do segundo nível (E_{t_2}, σ_{p_2}) varia com o campo elétrico seguindo apenas a teoria de tunelamento auxiliado por fônons, sendo a transição $+/0$ a mais provável.

Abstract

Deep Level Transient Spectroscopy was employed to characterize levels introduced by proton implantation with energies closer to GaAs valence band. Two deep levels were identified: peak 1, with energy $E_{t_1} = E_v + 0.08 \text{ eV}$ and hole capture cross section $\sigma_{p_1} = 4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$; and peak 2, with energy $E_{t_2} = E_v + 0.1 \text{ eV}$ and hole capture cross section $\sigma_{p_1} = 2,5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$. Level concentration evolution was also studied using different rapid thermal annealing steps. Another level became evident after annealing steps at the temperature range $150^\circ\text{C} \leq T \leq 200^\circ\text{C}$. All levels suffered a strong concentration reduction after annealing steps at $250^\circ\text{C} \leq T \leq 300^\circ\text{C}$. The measured hole emission rate dependence on the electric field for peak 1 could be described using both the Poole-Frenkel effect and the phonon-assisted tunneling theory, pointing to a $0/-$ charge state model. For peak 2, the behavior observed is completely described by the phonon-assisted tunneling theory, being the $+/0$ transition the most probable one.

Agradecimentos

Agradeço à minha família pelo apoio psicológico e financeiro dado durante os 4 anos e meio de graduação e à Grazi pela sua companhia e seu amor.

Gostaria de agradecer, em especial, aos meus orientadores Artur e Henri pela paciência, dedicação, amizade e por seus ensinamentos.

Por fim, um grande abraço aos colegas do Laboratório de Microeletrônica.

Sumário

Resumo	ii
Abstract	iii
Agradecimentos	iv
Artigos Publicados	vii
Lista de Figuras	viii
Lista de Símbolos	xi
1 Introdução	1
1.1 Motivações	1
1.2 Isolação Elétrica por Implantação de Íons	1
1.3 Objetivos	3
1.4 Estrutura do Trabalho	4
2 Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS)	5
2.1 Dinâmica Eletrônica de Estados Profundos	5
2.2 Transiente de Capacitância em uma Região de Depleção	7
2.3 A Medida DLTS (Parte I)	10
2.4 A Medida DLTS (Parte II): Método das Janelas de Taxas de Emissão	13
3 Mecanismos de Emissão de Portadores	16
3.1 Processos de Emissão de Portadores	16

Sumário	vi
3.1.1 Efeito Poole-Frenkel	17
3.1.2 Tunelamento auxiliado por fônons	18
3.1.2.1 Teoria de Pons e Makram-Ebeid para o processo de tunelamento auxiliado por fônons	18
3.1.2.2 Teoria de Karpus e Perel para o processo de tunelamento auxiliado por fônons	19
3.2 Medida da Taxa de Emissão como Função do Campo Elétrico	19
4 Procedimentos Experimentais	21
4.1 Equipamentos Utilizados	21
4.2 Preparação das Amostras	24
5 Resultados e Discussões	25
5.1 DLTS	25
5.1.1 Estabilidade Térmica dos Defeitos	27
5.2 Medidas da Dependência da Taxa de Emissão com o Campo Elétrico	28
6 Conclusões e Perspectivas	31
6.1 Conclusões	31
6.2 Perspectivas	32
Referências	33
A Resistência de Folha	35
B <i>Deep levels fine structure in proton implanted p-type GaAs</i>	37

Artigos Publicados

1. DALPONTE, M.; ADAM, M. C.; BOUDINOV, H. I.; GONCHAROVA, L. V.; FENG, T.; GARFUNKEL, E.; GUSTAFSSON, T. Effect of excess vacancy concentration on As and Sb doping in Si. *Journal of Physics D, Applied Physics*, v. 42 (2009) 165106.
2. COELHO, A. V. P.; ADAM, M. C.; BOUDINOV, H. I. Deep levels fine structure in proton implanted p-type GaAs. *Journal of Physics D, Applied Physics*, v. 43 (2010) 205104.

Lista de Figuras

1.1	Dois dos processos de isolação elétrica em GaAs: (a) <i>Mesa Etching</i> e (b) Isolação elétrica por implantação de prótons.	2
1.2	Evolução da resistência de folha (R_s) com a fluência de prótons para GaAs tipo-n com concentração de folha de portadores de $7 \times 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ na curva A e $6,8 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$ em B. Referência [3].	3
2.1	Processo de captura e emissão de elétron e lacuna por um nível profundo com energia E_t e densidade P_t contendo uma densidade p_t de lacunas. O semiconductor tem nível de Fermi E_F , densidade n de elétrons na banda de condução (E_c) e uma densidade p de lacunas na banda de valência (E_v).	6
2.2	Ilustração do uso de uma zona de depleção para o monitoramento do transiente de capacitância devido à emissão de portadores de níveis profundos.	8
2.3	Medidas de transientes de capacitância a diferentes temperaturas e um espectro Box-Car DLTS correspondente às mesmas.	11
2.4	Espectro DLTS de GaAs tipo-n ($n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) implantado com uma dose de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ de prótons.	11
2.5	Cálculo do espectro DLTS, à diferentes taxas, obtidos variando-se t_1 e t_2	12
2.6	<i>Plot</i> de Arrhenius para o primeiro pico do espectro DLTS mostrado na figura 2.4.	13
2.7	Transiente de capacitância medido e ideal. Nota-se que o transiente medido tem um tempo de recuperação, devido ao equipamento de medida, que é igual a t_0	14

2.8	Taxa de emissão para o máximo do sinal, $e_p(T_{\text{pico}})$, em função de t_m	14
3.1	Possíveis processos de emissão de lacunas na presença de campo elétrico. 1 - Poole-Frenkel; 2 - Tunelamento auxiliado por fônons; 3 - Tunelamento direto.	16
3.2	Ilustração do procedimento experimental para a obtenção de um transiente devido à emissão de centros localizados espacialmente em uma fina região de profundidades correspondente a um valor efetivo de campo elétrico. O caso (a) representa o transiente medido para um pulso entre V_r e V_{p1} ; (b) mostra o caso de um pulso entre V_r e V_{p2} e (c) ilustra a subtração dos dois casos anteriores.	20
4.1	Diagrama esquemático para o sistema de medidas DLTS.	21
4.2	(a) Visão geral do sistema. (b) Continuação da visão geral. (c) Criostato aberto. (d) Porta amostra.	22
4.3	Evaporadora resistiva.	23
4.4	(a) Visão geral do forno de recozimento rápido. (b) Tubo de quartzo onde é posto o porta amostra. (c) Porta amostra e lâmpadas halógenas.	23
4.5	Resumo esquemático do processo de preparação de amostras.	24
5.1	Espectros DLTS comparando a amostra como crescida e a amostra implantada com prótons. Para o cálculo do espectro, utilizamos $e_p(T_{\text{pico}}) = 50 \text{ s}^{-1}$	25
5.2	Plot de Arrhenius do nível referente ao pico 1.	26
5.3	Plot de Arrhenius do nível referente ao pico 2.	26
5.4	Efeito dos tratamentos térmicos rápidos sobre os picos no espectro DLTS. Para o cálculo do espectro, utilizamos $e_p(T_{\text{pico}}) = 50 \text{ s}^{-1}$	27
5.5	(a) Tentativa de identificação do efeito Poole-Frenkel e (b) do efeito de tunelamento auxiliado por fônons nos dados obtidos para o pico 1.	28
5.6	Ajuste dos dados obtidos para o pico 1 usando a soma do efeito Poole-Frenkel e do efeito de tunelamento auxiliado por fônons (descrição teórica de Pons e Makram-Ebeid).	29

5.7	(a) Tentativa de identificação do efeito Poole-Frenkel e (b) do efeito de tunelamento auxiliado por fônons nos dados medidos para o pico 2.	29
5.8	Ajuste dos dados obtidos para o pico 2 usando a teoria de tunelamento auxiliado por fônons de Karpus e Perel. Os parâmetros utilizados foram: $e_{p_0} = 50,4 \text{ s}^{-1}$ e $\tau = 1,48 \times 10^{-12} \text{ s}$	30
A.1	Representação geométrica de uma amostra para a definição da resistência de folha, R_s	35

Lista de Símbolos

$\langle v_p \rangle$	-	Velocidade térmica das lacunas
A	-	Área do dispositivo
C	-	Capacitância
c_n	-	Taxa de captura de elétrons
c_p	-	Taxa de captura de lacunas
D	-	Dose implantação
D_{Th}	-	Dose de limiar
E_{bar}	-	Energia da barreira do defeito
E_c	-	Energia da banda de condução
E_F	-	Energia ou nível de Fermi
e_F	-	Termo da taxa de emissão de lacunas relacionado ao processo de emissão por tunelamento auxiliado por fônons
e_n	-	Taxa de emissão de elétrons
e_p	-	Taxa de emissão de lacunas
e_{p0}	-	Taxa de emissão de lacunas a campo zero
E_t	-	Energia de um nível profundo
E_v	-	Energia da banda de valência
\vec{F}	-	Campo elétrico aplicado
h	-	Constante de Planck
\hbar	-	Constante de Planck dividida por 2π
J_m	-	Função de Bessel do primeiro tipo
k	-	Constante de Boltzmann
m_p^*	-	Massa efetiva da lacuna
M_v	-	Número de máximos da banda de valência
n	-	Concentração de elétrons
N_a	-	Concentração de dopantes aceitadores
N_c	-	Densidade de estados no fundo da banda de condução
N_d	-	Concentração de dopantes doadores

N_v	- Densidade de estados no topo da banda de valência
P_t	- Concentração total de defeitos relacionado ao nível profundo com energia E_t
p_t	- Concentração de níveis profundos cheios
p_t/P_t	- Ocupação de um nível profundo
\hat{p}_t/P_t	- Ocupação de um nível profundo em equilíbrio termodinâmico
p	- Concentração de lacunas
q	- Carga do elétron
R_s	- Resistência de folha
S	- Sinal DLTS
S_a	- Constante de acoplamento (Fator de fator Huang-Rhys)
T	- Temperatura
t_0	- Tempo de recuperação do instrumento de medida
t_m	- Tempo total de medida do transiente de capacitância
T_{pico}	- Temperatura referente ao máximo do pico no espectro DLTS
T_t	- Taxa de introdução do defeito referente ao nível com energia E_t
V_b	- Altura da barreira no lado do metal
V_{ms}	- Curvatura da banda do semiconductor na interface com o metal
V_p	- Tensão do pulso
V_r	- Tensão reversa aplicada
w	- Função peso a ser utilizada no cálculo do sinal DLTS
x_d	- tamanho da depleção
Z	- Estado de carga do defeito
Δ_{bar}	- Variação energética da altura da barreira do defeito
Δ_C	- Variação da capacitância
Δ_m	- Altura da barreira para o tunelamento auxiliado por fônons
ϵ	- Constante dielétrica do material
ϵ_0	- Permissividade elétrica do vácuo
γ_p	- Fator gama (constante utilizada no cálculo da taxa de emissão)
μ_n	- Mobilidade dos elétrons
μ_p	- Mobilidade das lacunas
Π_m	- Probabilidade de encontrar a lacuna no quase-nível com energia dada por $E_t - m\hbar\omega$
ρ	- Densidade de carga
σ_p	- Seção de choque de captura de lacunas
τ	- Tempo de tunelamento
τ_{ref}	- Tempo de referência da janela de taxas de emissão
ω	- frequência característica dos fônons interagentes com o portador aprisionado

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivações

Os dispositivos semicondutores estão presentes em praticamente todos os bens produzidos pela indústria eletro-eletrônica, constituindo a base de um dos setores econômicos mais dinâmicos do planeta. Quantitativamente, a indústria de semicondutores movimentou mundialmente \$249 bilhões no ano de 2008 e a expectativa para esse ano é que alcance os \$260 bilhões [1]. Por isso, podemos afirmar que a indústria de semicondutores é um dos setores mais importantes na economia global atualmente. Dentro deste gigantesco mercado, circuitos integrados (CIs) de arseneto de gálio, GaAs, ocupam lugar de destaque principalmente em aplicações como optoeletrônica devido à sua banda proibida direta e circuitos de alta frequência por causa da alta mobilidade de elétrons ($\mu_n = 8500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) que é, aproximadamente, seis vezes maior que a mobilidade dos elétrons no silício, à temperatura ambiente.

No processo de fabricação de CIs de GaAs, um importante passo é a isolamento elétrica entre dispositivos adjacentes, a qual pode ser alcançada por meio de diferentes técnicas. A figura 1.1 ilustra dois dos tipos de isolamento elétrica entre dispositivos eletrônicos: *Mesa Etching* [2] e isolamento elétrica por implantação iônica. Dentre estas, a isolamento por implantação iônica tem ganhado cada vez mais destaque. Isso porque essa técnica mantém a planaridade da lâmina, utiliza um número reduzido de passos tecnológicos e a resistência da camada implantada pode aumentar até seis ordens de grandeza.

1.2 Isolamento Elétrica por Implantação de Íons

A técnica de isolamento elétrica por implantação iônica consiste em aumentar drasticamente a resistividade elétrica de regiões de GaAs devido a defeitos introduzidos pela implantação. Esses defeitos estão relacionados a níveis profundos na banda proibida e atuam como “armadilhas” para os portadores livres. Com isso, há uma redução da concentração dos mesmos e temos o aumento

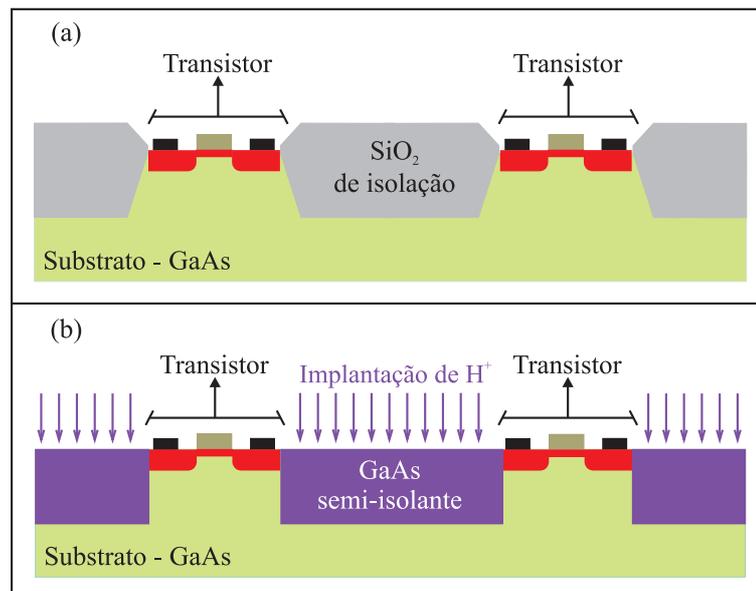


Figura 1.1: Dois dos processos de isolamento elétrico em GaAs: (a) *Mesa Etching* e (b) *Isolamento elétrico por implantação de prótons*.

da resistividade do semiconductor. Além disso, os defeitos também são centros espalhadores, o que contribui para o aumento da resistividade através da diminuição do valor da mobilidade de elétrons e lacunas.

Podemos distinguir diferentes regiões na curva de isolamento elétrica mostrada na figura 1.2: na primeira, correspondente a baixas fluências, a resistência de folha* mostra um acréscimo pequeno com o acúmulo da dose de implantação, revelando que a concentração de dopantes ainda é muito superior à concentração de defeitos introduzidos e que, conseqüentemente, a concentração e a mobilidade dos portadores livres, na região condutiva, ainda não haviam sido significativamente alterados. À medida em que a fluência vai sendo acumulada, a concentração de níveis profundos aumenta e se torna comparável à de dopantes. Assim, não só ocorre um decréscimo significativo na concentração de portadores livres, como também ocorre uma diminuição na mobilidade dos mesmos, acarretando em um notável acréscimo na resistência de folha medida (de quatro a seis ordens de grandeza para menos de uma ordem de grandeza de acréscimo na fluência acumulada). Até então, a resistividade na camada dopada era bem menor que no substrato, de forma que, ao medirmos a resistência de folha, pensando em um modelo simples de resistores em paralelo, estávamos medindo basicamente o valor correspondente à região dopada. Com o acúmulo da dose de prótons, no entanto, a resistividade na região dopada se torna comparável àquela do substrato. Assim, aumentando-se mais ainda a dose irradiada, chegamos a um valor a partir do qual a resistência de folha medida praticamente não aumenta, correspondendo à resistência de folha do substrato semi-isolante. Esta dose é chamada de dose de limiar, D_{Th} . Acumulando ainda mais fluência de prótons sobre a amostra, não se nota, praticamente, mudança no valor medido de R_s . Isto ocorre até que a quantidade de defeitos na região

*Para maiores detalhes sobre o que é resistência de folha, veja o apêndice A.

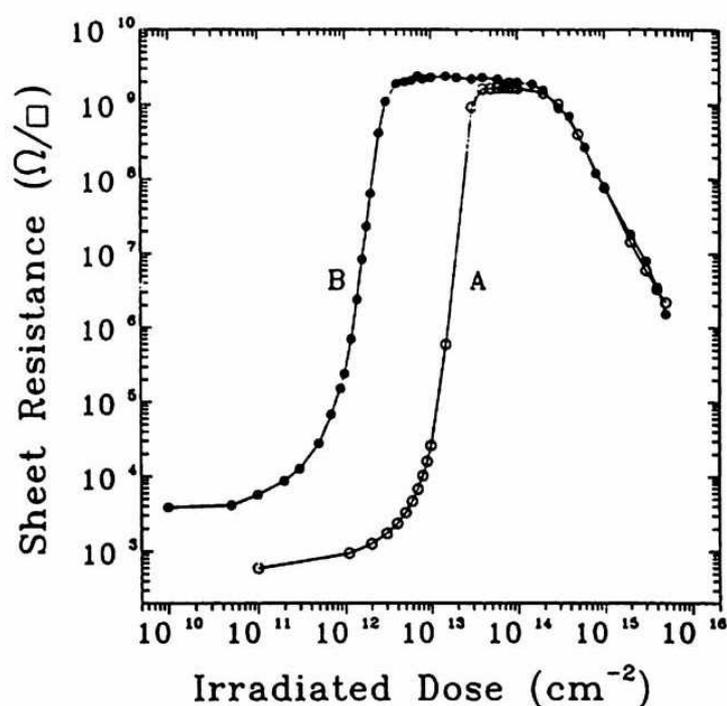


Figura 1.2: Evolução da resistência de folha (R_s) com a fluência de prótons para GaAs tipo-n com concentração de folha de portadores de $7 \times 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ na curva A e $6,8 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$ em B. Referência [3].

epitaxial torne-se alta o suficiente para que se comece a observar condução entre defeitos (o chamado efeito *hopping*). Este mecanismo depende, basicamente, da concentração de níveis profundos criados pelos defeitos oriundos da implantação.

A técnica de isolamento por implantação torna-se atraente para aplicações, primeiramente, por manter a lâmina plana, enquanto que outras técnicas para isolamento em arseneto de gálio utilizam *etching* da camada condutiva, o que prejudica a planaridade da mesma. Além disso, a técnica é de fácil introdução no processo de fabricação uma vez que requer apenas uma litografia e uma implantação iônica, passos tecnológicos padrões na indústria de microeletrônica.

1.3 Objetivos

O aperfeiçoamento e otimização da etapa de isolamento por implantação é altamente dependente do estudo, identificação e caracterização dos defeitos que são responsáveis por esse processo. Então, o presente trabalho de pesquisa tem por objetivo avaliar a contribuição de níveis profundos próximos à banda de valência para o processo de isolamento elétrica em GaAs por implantação de prótons. Para isso, traçamos as seguintes metas:

- identificação dos níveis pela obtenção da energia e seção de choque de captura de lacunas;

- identificação da estabilidade térmica dos mesmos;
- estudo dos mecanismos de emissão de portadores em função do campo elétrico aplicado.

1.4 Estrutura do Trabalho

Este texto está organizado da seguinte forma: os próximos dois capítulos, capítulos 2 e 3, explicam a teoria necessária para a realização das medidas de DLTS e da taxa de emissão de portadores como função do campo elétrico, respectivamente; no capítulo 4 são apresentados os equipamentos que foram utilizados ao longo do trabalho e como as amostras foram preparadas; no capítulo 5 apresentamos os resultados obtidos e, por fim, no capítulo 6 concluímos o trabalho e sugerimos perspectivas para o mesmo.

Capítulo 2

Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS)

Antes de explicarmos a técnica de DLTS, é importante descrever o comportamento de captura e emissão de portadores por níveis profundos* bem como o transiente de capacitância de uma zona de depleção quando exposta a pulsos de tensão. Começaremos pelo primeiro.

2.1 Dinâmica Eletrônica de Estados Profundos

Existem quatro processos que definem a dinâmica eletrônica de um estado profundo: captura de elétrons, captura de lacunas, emissão de elétrons e emissão de lacunas. O processo de captura é caracterizado por uma seção de choque σ que é uma área efetiva e representa a probabilidade de capturar um portador de carga. Se considerarmos p lacunas livres movendo-se com velocidade térmica média $\langle v_p \rangle$, $p \langle v_p \rangle$ é o fluxo de lacunas (lacunas por unidade de área e por unidade de tempo), e a taxa de captura de lacunas c_p é

$$c_p = \sigma_p \langle v_p \rangle p, \quad (2.1)$$

onde σ_p é a seção de choque de captura de lacunas.

A ocupação do nível é determinada pela competição entre os processos de emissão e captura, ilustrados na figura 2.1 para um semiconductor tipo-p. É válido ressaltar que, como neste trabalho estudaremos GaAs tipo-p, todas as definições serão feitas em relação a lacunas, ao invés de elétrons como usualmente. Lacunas são emitidas e elétrons são capturados por níveis ocupados (com a lacuna), enquanto lacunas são capturadas e elétrons são emitidos por níveis desocupados (sem a lacuna). Desse

*Para semicondutores tipo-p, consideramos um nível profundo aquele cuja energia é maior que a energia do nível de Fermi.

modo, a variação da concentração de níveis ocupados p_t é

$$\dot{p}_t \equiv \frac{dp_t}{dt} = (c_p + e_n)(P_t - p_t) - (e_p + c_n)p_t, \quad (2.2)$$

onde e_n e e_p são as taxas de emissão de elétrons e lacunas, respectivamente, P_t é a concentração total de níveis e $(P_t - p_t)$ é a concentração de níveis desocupados. Considerando um nível com energia E_t suficientemente próximo da banda de valência (e_n e c_n são desprezíveis devido a probabilidade de comunicação das lacunas com a banda de valência ser muito maior do que a probabilidade de comunicação dos elétrons com a banda de condução [4]) e estando o sistema em estado estacionário ($\dot{p}_t = 0$), temos

$$e_p p_t = c_p (P_t - p_t)$$

e, com isso, obtemos que a ocupação (p_t/P_t) de nível E_t é

$$\frac{p_t}{P_t} = \frac{c_p}{c_p + e_p}. \quad (2.3)$$

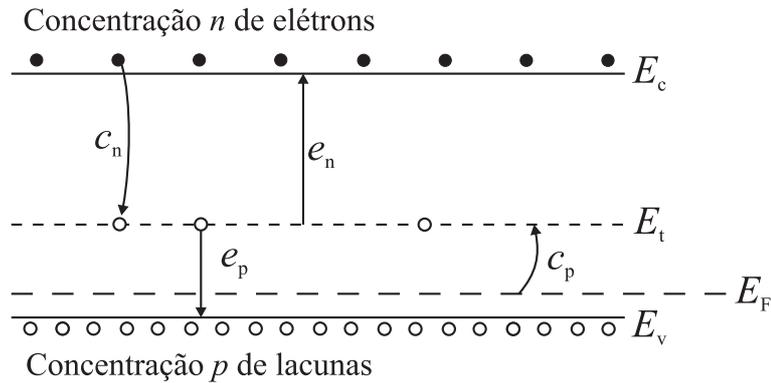


Figura 2.1: Processo de captura e emissão de elétron e lacuna por um nível profundo com energia E_t e densidade P_t contendo uma densidade p_t de lacunas. O semiconductor tem nível de Fermi E_F , densidade n de elétrons na banda de condução (E_c) e uma densidade p de lacunas na banda de valência (E_v).

Quando o sistema está em equilíbrio termodinâmico, a ocupação também é definida pela função distribuição de Fermi-Dirac. Para um nível profundo, a ocupação em equilíbrio termodinâmico, \hat{p}_t/P_t , é

$$\frac{\hat{p}_t}{P_t} = \left[1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (2.4)$$

onde k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e E_F é o nível ou a energia de Fermi. Combinando as equações (2.3) e (2.4) temos

$$\frac{e_p}{c_p} = \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right). \quad (2.5)$$

Sabemos que para um semiconductor não-degenerado [5] a concentração de lacunas livres é

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right), \quad (2.6)$$

onde a densidade de estados no topo da banda de valência, N_v , é dada por

$$N_v = 2M_v \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2} \quad (2.7)$$

e M_v é o número de máximos da banda de valência, m_p^* é a massa efetiva da lacuna e h é a constante de Planck.

Tabela 2.1: Fatores γ para silício e arseneto de gálio. Referência [6].

Semiconductor	$\gamma(\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{K}^{-2})$
Si tipo-n	$1,07 \times 10^{21}$
Si tipo-p	$1,78 \times 10^{21}$
GaAs tipo-n	$2,30 \times 10^{20}$
GaAs tipo-p	$1,70 \times 10^{21}$

Substituindo as equações (2.1), (2.6) e o valor usual de $\langle v_p \rangle = (3kT/m_p^*)^{1/2}$ na equação (2.5), chega-se que a taxa de emissão de elétrons é

$$e_p(T) = \gamma_p T^2 \sigma_p \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{kT}\right), \quad (2.8)$$

onde $\gamma_p = 2\sqrt{3}M_v(2\pi)^{3/2}k^2m_p^*h^{-3}$ é uma constante para cada semiconductor como mostrado na tabela 2.1.

Podemos observar que a taxa de emissão é função da temperatura, da energia do nível e da seção de choque do mesmo. Essa relação será aplicada posteriormente quando explicarmos a medida de DLTS.

2.2 Transiente de Capacitância em uma Região de Depleção

Nessa seção, iremos considerar uma concentração P_t de um determinado defeito no semiconductor que introduz um nível profundo na banda proibida com energia E_t . A concentração de níveis cheios é p_t . A convenção adotada é a mesma do capítulo anterior: o nível está cheio com a lacuna e vazio sem ela.

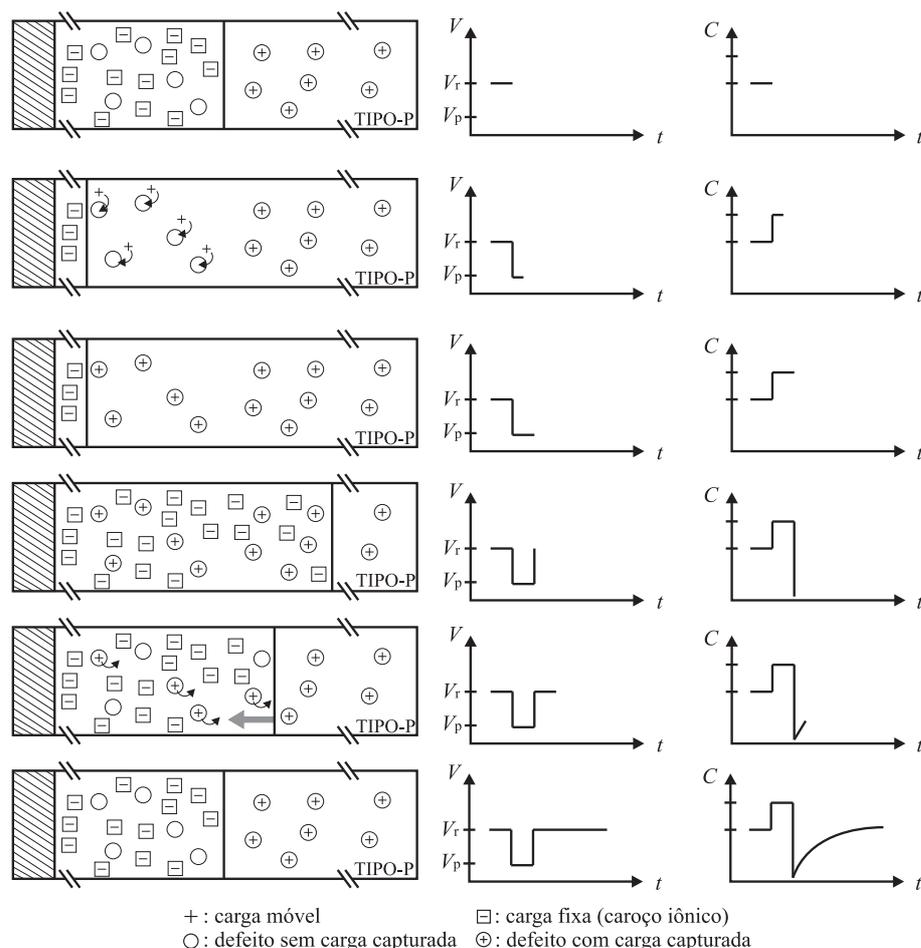


Figura 2.2: Ilustração do uso de uma zona de depleção para o monitoramento do transiente de capacitância devido à emissão de portadores de níveis profundos.

A figura 2.2 mostra a evolução temporal de um diodo metal semiconductor (tipo-p) quando sujeito a uma tensão reversa V_r e a um pulso de tensão V_p . Para uma melhor compreensão, mostramos o dispositivo em perfil onde temos o metal (parte hachurada), a depleção do semiconductor e a parte restante neutra do semiconductor. Dividimos o processo em seis passos temporais. Note que, em cada passo, o dispositivo tem quatro pares de traços paralelos. Eles significam que estamos considerando apenas uma parte do dispositivo nessa representação. No primeiro passo temporal, o dispositivo encontra-se em estado estacionário apenas com V_r aplicado e na zona de depleção possui cargas fixas e defeitos vazios. Este estado é definido a partir do instante em que todos defeitos já emitiram a lacuna e os mesmos encontram-se sem ela, pois o processo de captura não ocorre dentro da zona de depleção uma vez que os portadores livres são expulsos pelo campo elétrico. No segundo passo, o pulso de tensão começa a ser aplicado. Notamos que a zona de depleção diminui e todos defeitos que antes estavam vazios e agora se encontram fora da depleção começam a capturar algumas das cargas livres do semiconductor. No terceiro, o pulso ainda existe e os defeitos fora da depleção estão, em sua maioria, cheios. Isso porque $E_t > E_{F_p}$, onde E_{F_p} é o quase-nível de Fermi de lacunas. Observe, não significa que as lacunas uma vez capturadas pelos defeitos fora da depleção permaneçam sempre

capturadas. O que ocorre é que como $E_t > E_{F_p}$ fora da depleção, pela distribuição de Fermi-Dirac temos $p_t \approx P_t$. Quando o pulso acaba, quarto passo, notamos que a região depleta se estende além daquela profundidade estacionária para compensar a carga dos portadores que foram capturados. No quinto passo temporal, os defeitos começam a emitir as cargas capturadas fazendo a região de depleção voltar ao seu tamanho inicial e devido à isso, acontece um transiente de capacitância. No último passo, depois de um tempo infinito (teoricamente) o transiente de capacitância acaba e a região de depleção volta ao estado estacionário.

Agora, iremos deduzir uma expressão analítica para o transiente de capacitância mostrado na figura 2.2. Sabemos que a capacitância, C , de uma região de depleção [7] é

$$C = A \left(\frac{\epsilon \epsilon_0 q N_a}{2} \right)^{1/2} \left(V_{ms} - \frac{kT}{q} \right)^{-1/2}, \quad (2.9)$$

onde ϵ é a constante dielétrica do semicondutor, ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo, N_a é a concentração de dopantes aceitadores, uma vez que o semicondutor é tipo-p, A é a área do dispositivo, $V_{ms} = V_b + V_r$ é o potencial na interface semicondutor metal devido à altura da barreira Schottky (V_b) e à tensão reversa aplicada (V_r). q é a carga do elétron. Podemos observar que $-qN_a$ é, usualmente, a contribuição das cargas fixas negativas dentro da depleção. Mas agora existem cargas fixas e cargas relacionadas aos defeitos na zona de depleção. Assumiremos, por simplicidade, que o estado de carga do defeito com a lacuna é 0 e sem ela é -1 , resultando na transição $0/-$. Considerando que eles estejam uniformemente distribuídos, o módulo da concentração de carga relativa aos defeitos na depleção é $\rho_d = q[P_t - p_t(t)]$. Logo, substituindo qN_a por uma densidade de carga $\rho(t) = qN_a + [P_t - p_t(t)]$ na equação (2.9) e supondo que $qV \gg kT$, temos

$$C(t) = C(\infty) \left(1 - \frac{p_t(t)}{N_a + P_t} \right)^{1/2}, \quad (2.10)$$

onde

$$C(\infty) = A \left[\frac{q \epsilon \epsilon_0}{2} (N_a + P_t) \right]^{1/2} V_{ms}^{-1/2}. \quad (2.11)$$

Aproximando que $P_t, p_t(t) \ll N_a$, expandindo em Taylor e retendo apenas termos de até primeira ordem em $p_t(t)/N_a$, obtemos

$$C(t) \approx C(\infty) \left(1 - \frac{p_t(t)}{2N_a} \right). \quad (2.12)$$

Na depleção, temos que a taxa de captura de lacunas c_p é nula devido a expulsão de todos portadores livres pelo campo elétrico existente nessa região. Além disso, vamos considerar novamente $e_n, c_n \approx 0$. Logo, a equação (2.2) se reduz a $\dot{p}_t = -e_p p_t(t)$ para o quinto e sexto passos temporais da figura 2.2. Sendo $p_t(0) = P_t$, a concentração de níveis cheios $p_t(t)$ é dada por

$$p_t(t) = P_t \exp(-e_p t). \quad (2.13)$$

Substituindo (2.13) em (2.12), obtém-se que o transiente de capacitância de uma região de depleção para um semiconductor tipo-p sujeito a um pulso de tensão é

$$C(t) = C(\infty) \left[1 - \frac{P_t \exp(-e_p t)}{2N_a} \right], \quad (2.14)$$

onde a variação da capacitância é dada por

$$\Delta C(t) = C(\infty) - C(t) = C(\infty) \frac{P_t}{2N_a} \exp(-e_p t). \quad (2.15)$$

Simplificando (2.14), a escrevemos como

$$C(t) = C(\infty) - \Delta C(0) \exp(-e_p t). \quad (2.16)$$

2.3 A Medida DLTS (Parte I)

A medida de DLTS consiste em medir o transiente de capacitância de uma zona de depleção em diversas temperaturas e definir um sinal espectroscópico para o tratamento matemático do transiente. Como observamos na equação (2.8), a taxa de emissão dos portadores livres depende da temperatura e, por sua vez, o transiente de capacitância $C(t)$ (equação (2.16)) depende da taxa. Logo, variando-se a temperatura podemos obter diferentes transientes.

Mas normalmente, em uma amostra semicondutora, existe mais de um defeito que introduza níveis profundos na banda proibida. Assim, o transiente medido não será somente devido à emissão de um dado nível, mas sim à soma das contribuições de cada um (devemos, então, substituir o segundo termo do lado direito da equação (2.16) por um somatório em e_p). A idéia da Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos está justamente em separar a contribuição de cada nível para o transiente, gerando um espectro onde cada pico corresponda a uma destas contribuições.

O conceito utilizado no Box-Car DLTS e em diversos outros tipos de DLTS está representado na figura 2.3. Escolhe-se uma janela de taxas de emissão, ou seja, um intervalo de tempo de referência τ_{ref} . Níveis com $e_p^{-1} \ll \tau_{\text{ref}}$ terão emitido as lacunas, para o nosso caso que estamos tratando de um semiconductor tipo-p, em um tempo muito curto e níveis com $e_p^{-1} \gg \tau_{\text{ref}}$ demorarão muito para emitir suas lacunas. Assim, o transiente que ocorre em um intervalo de tempo τ_{ref} será basicamente devido a emissões de níveis com e_p^{-1} da ordem de τ_{ref} , ou seja, cujas taxas de emissão estejam dentro da janela utilizada. Desta forma, mantendo-se a mesma janela e variando a temperatura, a taxa de emissão de cada nível passará por esta faixa de valores em uma determinada região de temperaturas, dando origem a picos como o representado na figura 2.3. No Box-Car, o sinal DLTS, S , é definido por

$$S = C(t_2) - C(t_1) = \Delta C(0) [\exp(-e_p t_1) - \exp(-e_p t_2)], \quad (2.17)$$

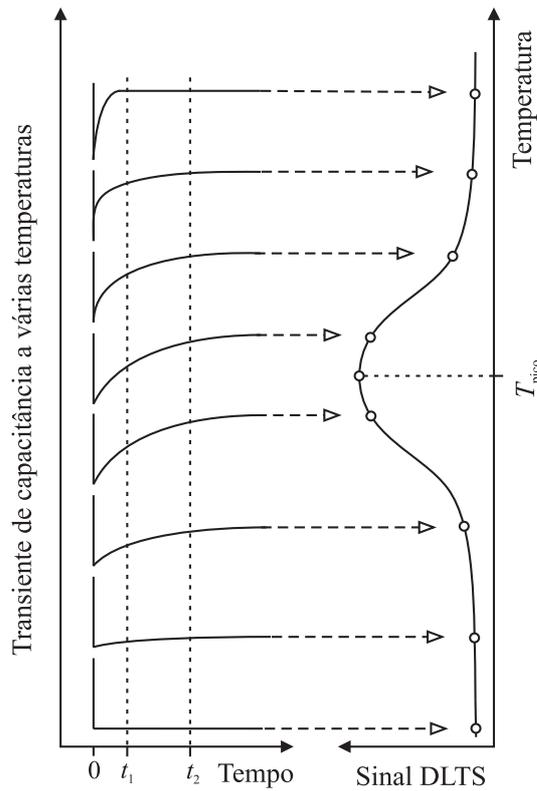


Figura 2.3: Medidas de transientes de capacitância a diferentes temperaturas e um espectro Box-Car DLTS correspondente às mesmas.

onde a taxa de emissão no sinal máximo, $T = T_{\text{pico}}$, é

$$e_p(T_{\text{pico}}) = \frac{\ln(t_2/t_1)}{t_2 - t_1}. \tag{2.18}$$

Um exemplo de um típico espectro DLTS é mostrado na figura 2.4. Observe que variamos

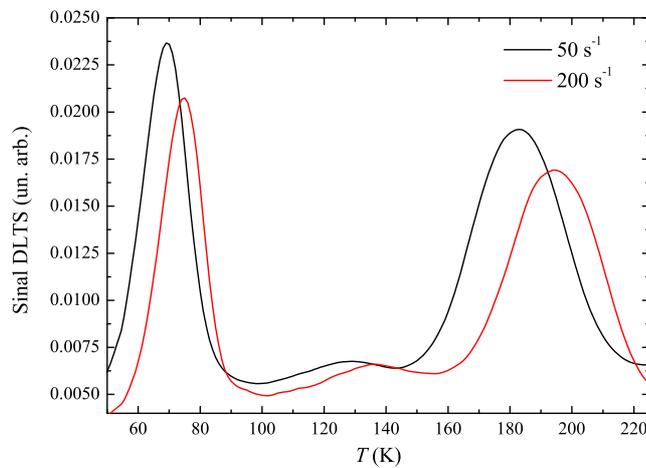


Figura 2.4: Espectro DLTS de GaAs tipo-n ($n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) implantado com uma dose de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ de prótons.

t_1 e t_2 para obtermos taxas de emissão iguais a 50 s^{-1} e 200 s^{-1} no sinal máximo dos picos, ou seja, $e_p(T_{\text{pico}}) = 50 \text{ s}^{-1}$ para a curva preta e $e_p(T_{\text{pico}}) = 200 \text{ s}^{-1}$ para a curva vermelha.

Agora que conhecemos a forma do sinal DLTS, podemos extrair os parâmetros necessários para caracterizarmos um dado nível profundo. Esses parâmetros são: a energia E_t em relação a uma das bandas e sua seção de choque, σ , de captura de portadores. Utilizamos para obtenção de tais parâmetros o *Plot* de Arrhenius:

- calculamos um espectro DLTS, gráfico de $S(T)$ versus T (como mostra a figura 2.4), usando (2.17) a partir das curvas $C(t) \times t$ medidas a diferentes temperaturas;
- variamos t_1 e t_2 e obtemos diferentes valores de $e_p(T_{\text{pico}})$, de acordo com a equação (2.18). A figura 2.5 ilustra isto para o primeiro pico da figura 2.4. Como vemos, T_{pico} também é diferente

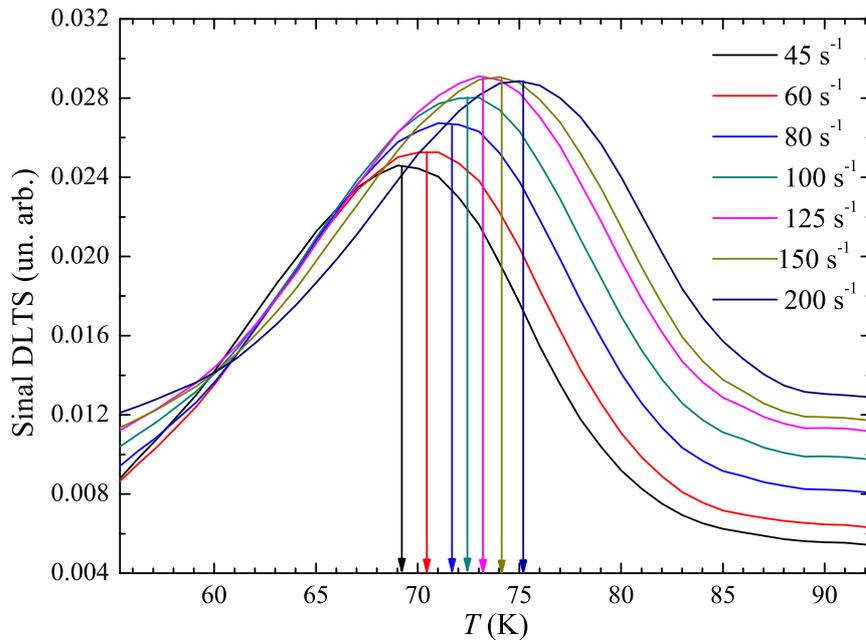


Figura 2.5: Cálculo do espectro DLTS, à diferentes taxas, obtidos variando-se t_1 e t_2 .

para cada valor de $e_p(T_{\text{pico}})$, de acordo com a equação (2.8). Com isso, guardamos os diferentes pares (e_p, T_{pico}) ao variarmos t_1 e t_2 ;

- a equação (2.8) pode ser linearizada como

$$\ln \left(\frac{T_{\text{pico}}^2}{e_p(T_{\text{pico}})} \right) = \frac{(E_t - E_v)}{k} \frac{1}{T_{\text{pico}}} - \ln(\gamma_p \sigma_p). \quad (2.19)$$

- fazemos um gráfico de $1/T_{\text{pico}} \times \ln(T_{\text{pico}}^2/e_p(T_{\text{pico}}))$, o chamado *Plot* de Arrhenius (figura 2.6), para os pares (e_p, T_{pico}) obtidos anteriormente;

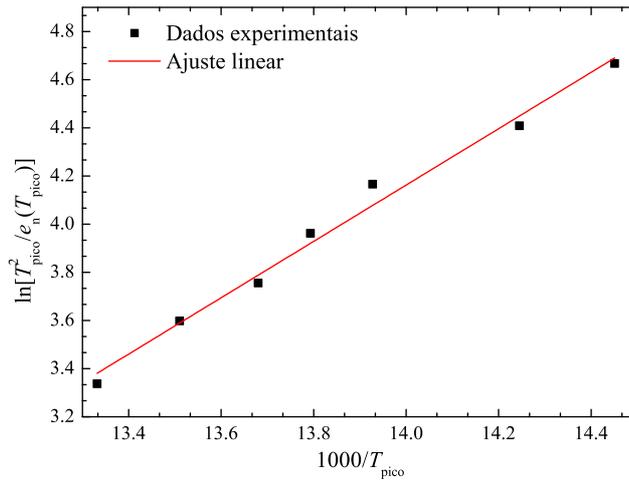


Figura 2.6: Plot de Arrhenius para o primeiro pico do espectro DLTS mostrado na figura 2.4.

- associando a equação (2.19) com a reta $y = ax + b$, obtemos: $a = (E_t - E_v)/k$ que nos fornece a energia do nível e $b = -\ln(\gamma_p \sigma_p)$ de onde podemos extrair a seção de choque de captura do nível.

Até o momento, vimos o tipo mais simples de DLTS devido a sua simplicidade para explicação do princípio físico da medida. Entretanto, devemos abordar, agora, o tipo de DLTS que foi usado neste trabalho.

2.4 A Medida DLTS (Parte II): Método das Janelas de Taxas de Emissão

O Box-Car DLTS nada mais é do que um caso específico de um método de análise de transiente mais geral: o chamado Método das Janelas de Taxas de Emissão. Nesse método, o sinal DLTS é definido como

$$S = \frac{1}{t_m} \int_0^{t_m} C(t)w(t)dt, \quad (2.20)$$

onde $C(t)$ é o transiente de capacitância, $w(t)$ é uma função peso e t_m é o tempo total de medida do transiente. Observe que se $w(t) = t_m[\delta(t - t_2) - \delta(t - t_1)]$ temos o Box-Car DLTS. No presente trabalho, a função peso utilizada para o tratamento matemático do transiente de capacitância é

$$w(t) = \begin{cases} -1 & \text{se } t_0 < t < \frac{t_0 + t_m}{2} \\ 1 & \text{se } \frac{t_0 + t_m}{2} < t < t_m \end{cases}. \quad (2.21)$$

Podemos observar que introduzimos um parâmetro (t_0) que é o tempo de recuperação do instrumento de medida. É importante introduzir esse parâmetro pois, como mostra a figura 2.7, a curva

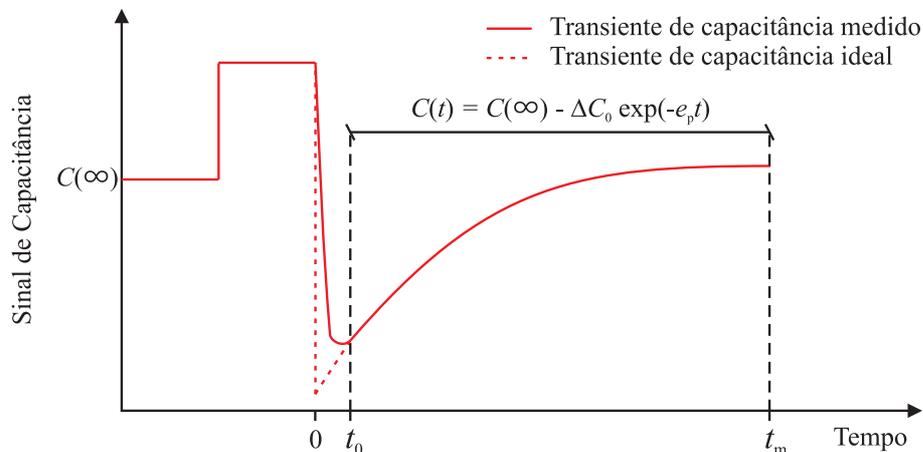


Figura 2.7: Transiente de capacitância medido e ideal. Nota-se que o transiente medido tem um tempo de recuperação, devido ao equipamento de medida, que é igual a t_0 .

do transiente de capacitância é a da equação (2.16) apenas para tempos maiores que t_0 . Deste modo, substituindo (2.16) e (2.21) em (2.20) o sinal DLTS fica

$$S = \frac{\Delta C_0}{e_p t_m} \left[\exp\left(-\frac{e_p t_0}{2}\right) - \exp\left(-\frac{e_p t_m}{2}\right) \right]^2 \quad (2.22)$$

Derivando a equação (2.22) em relação à e_p e igualando a zero para encontrarmos a taxa em que o

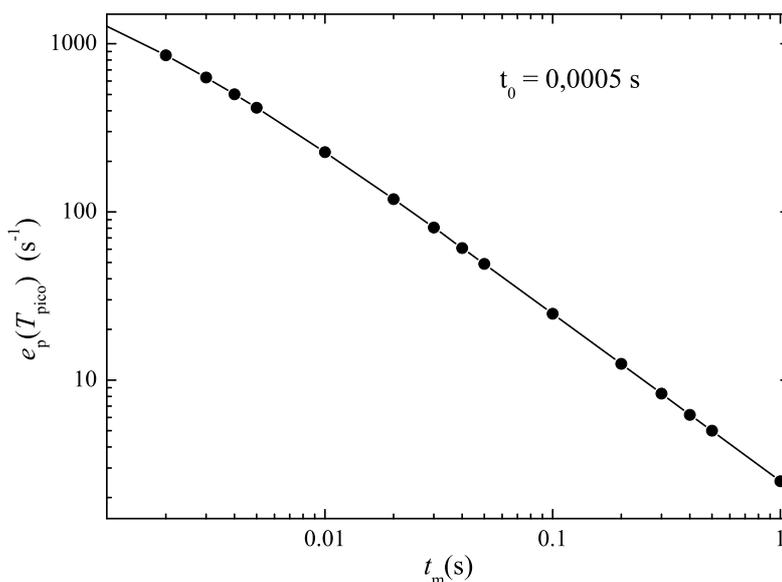


Figura 2.8: Taxa de emissão para o máximo do sinal, $e_p(T_{\text{pico}})$, em função de t_m .

sinal é máximo (que corresponde a $T = T_{\text{pico}}$) chegamos em

$$\frac{1}{e_p} \left[\exp\left(-\frac{e_p t_0}{2}\right) - \exp\left(-\frac{e_p t_m}{2}\right) \right]^2 + t_0 \exp(-e_p t_0) - (t_0 + t_m) \exp\left[-\frac{e_p(t_0 + t_m)}{2}\right] + t_m \exp(-e_p t_m) = 0. \quad (2.23)$$

A equação (2.23) não possui solução analítica. Contudo, podemos resolvê-la numericamente para dados t_0 e t_m . O resultado é mostrado na figura 2.8 para $t_0 = 0,0005$ s e $0,001 \leq t_m \leq 1$ s.

No método das janelas de taxa de emissão, a forma para obtenção dos parâmetros que identificam o nível profundo é a mesma. A única diferença é a forma com que definimos o sinal $S(T)$.

Resumindo, escolhendo t_0 e t_m obtemos o espectro $S(T)$ versus T usando (2.22) sobre os transientes obtidos a diferentes temperaturas. Em seguida, guardam-se os pares (e_p, T_{pico}) obtidos para cada nível através da temperatura do seu correspondente pico. Variam-se, então, t_0 e t_m , e se gera um novo espectro guardando sempre os pares (e_p, T_{max}) . Este procedimento se repete até que se chegue a um número suficiente de pares que possa propiciar um bom ajuste linear no gráfico $\ln(T_{\text{pico}}^2/e_p)$ versus $1/T_{\text{pico}}$, a partir do qual extrairemos os valores de $(E_t - E_v)$ e σ_p para cada nível.

Capítulo 3

Mecanismos de Emissão de Portadores

Nesse capítulo, apresentamos os mecanismos de emissão de portadores, a dependência da taxa de emissão dos mesmos em função do campo elétrico aplicado e explicamos o método de medida utilizado nesse trabalho para identificação desses processos de emissão. Além disso, veremos que a identificação dos mecanismos de emissão pode revelar informações a respeito da forma da barreira de potencial do defeito. Em especial, se o potencial em longo alcance tiver caráter coulombiano atrativo, o estado de carga do defeito pode ser obtido.

3.1 Processos de Emissão de Portadores

Existem três processos básicos de emissão de portadores com o campo elétrico: Poole-Frenkel [8], tunelamento direto e tunelamento auxiliado por fônons [9]. Todos eles atuam no sentido de

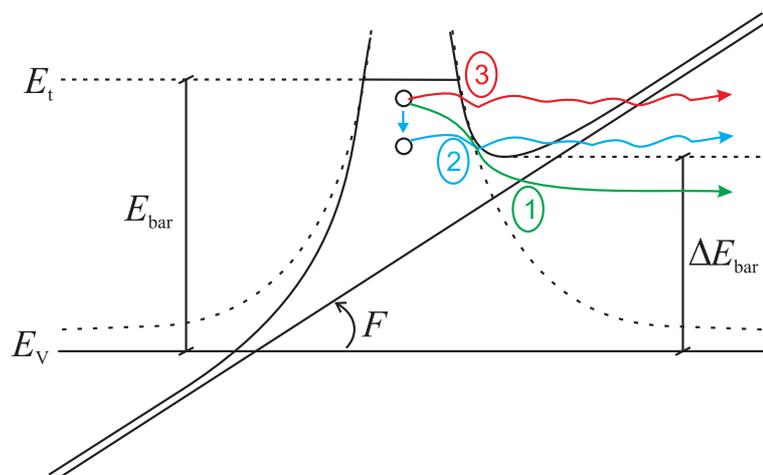


Figura 3.1: Possíveis processos de emissão de lacunas na presença de campo elétrico. 1 - Poole-Frenkel; 2 - Tunelamento auxiliado por fônons; 3 - Tunelamento direto.

aumentar a taxa de emissão com o acréscimo do campo. Como representado na figura 3.1, o efeito

Poole-Frenkel consiste na distorção do potencial eletrostático do defeito pela aplicação do campo \vec{F} , levando a uma redução efetiva de ΔE_{bar} na altura da barreira. A largura desta barreira também é diminuída com o aumento do campo, e, para campos suficientemente altos, o tunelamento direto pode atingir probabilidades consideráveis. Além disso, energia vibracional da rede pode ser, através de interações elétron-fônon, adquirida pelo portador aprisionado, causando uma efetiva diminuição tanto na altura como na largura da barreira, sendo esse o chamado efeito de tunelamento auxiliado por fônons. O tunelamento direto é normalmente muito pouco provável para campos inferiores a 10MV/cm [7]. Esse valor é bem superior aos campos observados nesse trabalho, de forma que vamos desprezar essa contribuição e analisar com maior detalhe os outros dois efeitos.

3.1.1 Efeito Poole-Frenkel

Como mencionado acima, para o caso do efeito Poole-Frenkel, a taxa de emissão é modificada através da diminuição da altura da barreira ($E_{\text{bar}} = E_t - E_v$) por ΔE_{bar} . Este valor depende do formato do potencial, sendo de maneira geral maior para potenciais de longo alcance e reduzido para potenciais de curto alcance (para uma barreira do tipo delta, por exemplo, temos um valor nulo). ΔE_{bar} foi calculado para uma série de diferentes barreiras de potencial [10]. No entanto, o caso mais importante e mais utilizado é o do potencial Coulombiano. Isso ocorre porque a maior parte dos potenciais referentes a níveis profundos pode ser relativamente bem descrita por uma contribuição qualquer de curto alcance, cuja influência em ΔE_{bar} é desprezível, e outra Coulombiana, que irá prevalecer a distâncias maiores e ditará a dependência de ΔE_{bar} com o campo. Considerando-se um potencial do tipo poço Coulombiano, mostra-se ([10]) que:

$$\Delta E_{\text{bar}} = q \sqrt{\frac{ZqF}{\pi\epsilon\epsilon_0}}, \quad (3.1)$$

onde Z é o estado de carga correspondente ao nível sem a lacuna, F é o módulo do campo elétrico, q é a carga do elétron e ϵ é a constante dielétrica do semiconductor em questão. Assim, teremos a taxa de emissão modificada pelo campo elétrico dada por:

$$e_p(F) = e_{p_0} \exp\left(\frac{\Delta E_{\text{bar}}}{kT}\right), \quad (3.2)$$

onde e_{p_0} é a taxa de emissão a campo zero.

Usualmente, um gráfico expondo um comportamento linear entre o logaritmo da taxa de emissão medida como função da raiz quadrada do campo elétrico é adotado como identificação positiva para o efeito Poole-Frenkel em um potencial do tipo poço Coulombiano [11].

3.1.2 Tunelamento auxiliado por fônons

Já para o efeito de tunelamento auxiliado por fônons, a lacuna armadilhada inicialmente adquire energia vibracional da rede e, então, pode tunelar através de uma barreira que vai ter tanto altura quanto largura reduzidas (o que aumenta consideravelmente a probabilidade do tunelamento). Diferentes abordagens teóricas foram utilizadas para a descrição desse processo [9, 14, 15]. Usaremos nesse trabalho as descrições de Pons e Makram-Ebeid [15] e a de Karpus e Perel [14, 16, 17].

3.1.2.1 Teoria de Pons e Makram-Ebeid para o processo de tunelamento auxiliado por fônons

Segundo Pons e Makram-Ebeid, a taxa de emissão total pode ser escrita como a soma da taxa a campo zero com um termo dependente do campo elétrico relacionado ao processo de emissão por tunelamento auxiliado por fônons:

$$e_p = e_{p_0} + e_F. \quad (3.3)$$

Considerando que o portador aprisionado esteja apenas acoplado a fônons com energia $\hbar\omega$, este último termo é calculado como:

$$e_F = \sum_m \Pi_m \Gamma(\Delta_m), \quad (3.4)$$

onde Π_m é a probabilidade de encontrar o portador no quase-nível com energia dada por $E_t - m\hbar\omega$ e $\Gamma(\Delta_m)$ é a probabilidade por unidade de tempo para o tunelamento à banda de valência a partir deste quase-nível (onde Δ_m é a correspondente altura da barreira: $\Delta_m = (E_t - E_v) - m\hbar\omega$). Essa probabilidade por unidade de tempo, $\Gamma(\Delta_m)$, foi calculada por Korol [12] no caso de um potencial tipo delta e é dada por:

$$\Gamma(\Delta_m) = \gamma_2 \frac{\Delta_m}{qK} \exp(-K), \quad (3.5)$$

onde o fator pré-exponencial γ_2 é usado como parâmetro de ajuste e K é descrito por:

$$K = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_p^*}}{\hbar F} \Delta_m^{3/2}. \quad (3.6)$$

Quanto à probabilidade Π_m , Pons e Makram-Ebeid a estimaram considerando interação entre o nível profundo e fônons com energia $\hbar\omega$ como:

$$\Pi_m = \left(1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right) \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(\frac{n\hbar\omega}{kT}\right) J_m^2 \left[2\sqrt{S_a(n+1/2)} \right]. \quad (3.7)$$

onde J_m é a função de Bessel do primeiro tipo, e S_a é a constante de acoplamento ou fator de Huang-Rhys [13].

3.1.2.2 Teoria de Karpus e Perel para o processo de tunelamento auxiliado por fônons

Partindo da teoria de captura e emissão por multi-fônons em níveis profundos descrita por Abakumov et al [18] e utilizando apenas o quase-nível correspondente à máxima probabilidade para o processo completo, Karpus e Perel conseguiram chegar a uma solução analítica para descrever a dependência da taxa de emissão com o campo elétrico [17]:

$$e_p(F) = e_{p0} \exp\left(\frac{F^2}{F_c^2}\right) \quad (3.8)$$

onde

$$F_c = \sqrt{\frac{3m_p^* \hbar}{\tau^3 q^2}}, \quad (3.9)$$

sendo τ o chamado tempo de tunelamento, o qual depende de parâmetros como a frequência característica dos fônons em consideração, a constante de acoplamento entre o nível profundo e estes fônons e a temperatura [16]. A descrição de Karpus e Perel para o tunelamento auxiliado por fônons é usualmente testada nos dados experimentais através de um gráfico do logaritmo da taxa de emissão como função do quadrado do campo elétrico [11].

3.2 Medida da Taxa de Emissão como Função do Campo Elétrico

As teorias apresentadas acima descrevem a variação da taxa de emissão de um portador em um nível profundo com o campo elétrico. O jeito mais direto de confrontá-las com dados experimentais é através de um gráfico da taxa de emissão como função do campo elétrico. No entanto, como mencionado acima, no caso de medidas em uma região de depleção, semelhantes ao DLTS, a emissão se dá simultaneamente ao longo de uma região de profundidades e, conseqüentemente, a diferentes valores de campo elétrico. De forma a contornar esse problema, adota-se o seguinte procedimento experimental [19, 6, 20]: mantendo-se sempre a temperatura fixa, um transiente de capacitância é inicialmente medido usando-se uma tensão reversa V_r e uma tensão de pulso V_{p1} como representado na figura 3.2(a). Considerando um pulso longo o suficiente, esse transiente corresponde aproximadamente à emissão a partir de defeitos situados na região de profundidades entre x_1 e x_d , onde x_1 é a profundidade da depleção quando a tensão V_{p1} é aplicada, x_d é a profundidade da depleção a V_r aplicada. Após, mede-se um novo transiente, mantendo-se a tensão reversa V_r , mas agora adotando uma nova tensão de pulso V_{p2} tal que $|V_{p2}| > |V_{p1}|$. De forma análoga, esse novo transiente corresponderá à emissão de centros localizados entre x_2 e x_d , onde x_2 é a profundidade da depleção para o pulso V_{p2} . Subtraindo-se, então, a primeira curva $C \times t$ dessa última, se obtém um transiente que aproximadamente se deve à contribuição da emissão ocorrida entre x_1 e x_2 . A figura 3.2(c) mostra essa região em

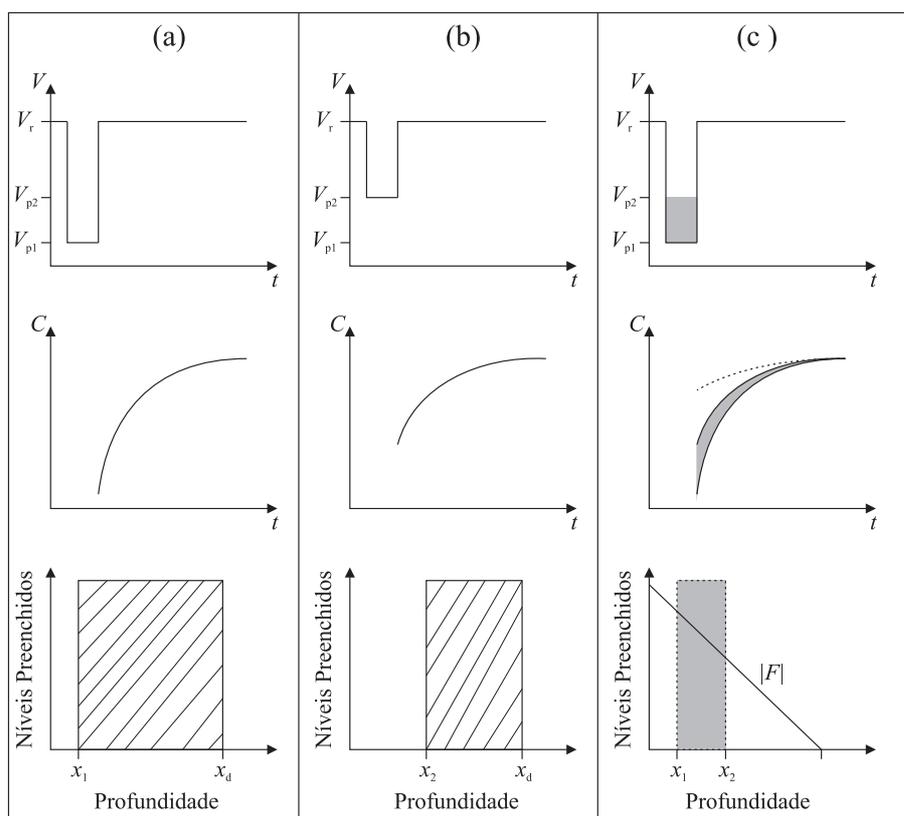


Figura 3.2: Ilustração do procedimento experimental para a obtenção de um transiente devido à emissão de centros localizados espacialmente em uma fina região de profundidades correspondente a um valor efetivo de campo elétrico. O caso (a) representa o transiente medido para um pulso entre V_r e V_{p1} ; (b) mostra o caso de um pulso entre V_r e V_{p2} e (c) ilustra a subtração dos dois casos anteriores.

cinza e a curva $C \times t$ pontilhada é o transiente da mesma. Para valores de V_{p1} e V_{p2} suficientemente próximos, pode-se pensar que essa emissão ocorre a um valor médio fixo de campo elétrico, e, então, sua taxa pode ser extraída usando-se uma rotina de ajuste exponencial nesse último transiente. Para se variar o valor do campo elétrico, normalmente alteram-se os valores de V_{p1} e V_{p2} . Nesse trabalho, no entanto, preferimos manter V_{p1} e V_{p2} fixos e alterar V_r . Dessa forma, a região efetivamente sendo medida não é alterada, apenas o valor do campo elétrico é modificado.

Capítulo 4

Procedimentos Experimentais

No presente capítulo, mostraremos de forma rápida os equipamentos utilizados nesse trabalho, como por exemplo, o sistema de medida DLTS e abordaremos a forma de preparação das amostras.

4.1 Equipamentos Utilizados

O mais relevante aparato experimental desse trabalho de pesquisa é, sem dúvida, o sistema de medidas DLTS. Um sistema DLTS tem que ser capaz de controlar a temperatura na amostra, aplicar um pulso de tensão no diodo e medir os transientes de capacitância de sua zona de depleção. Estes requerimentos também são básicos para a medida da taxa de emissão de portadores em função do campo elétrico. A figura 4.1 representa a estrutura básica do sistema de medida DLTS presente no

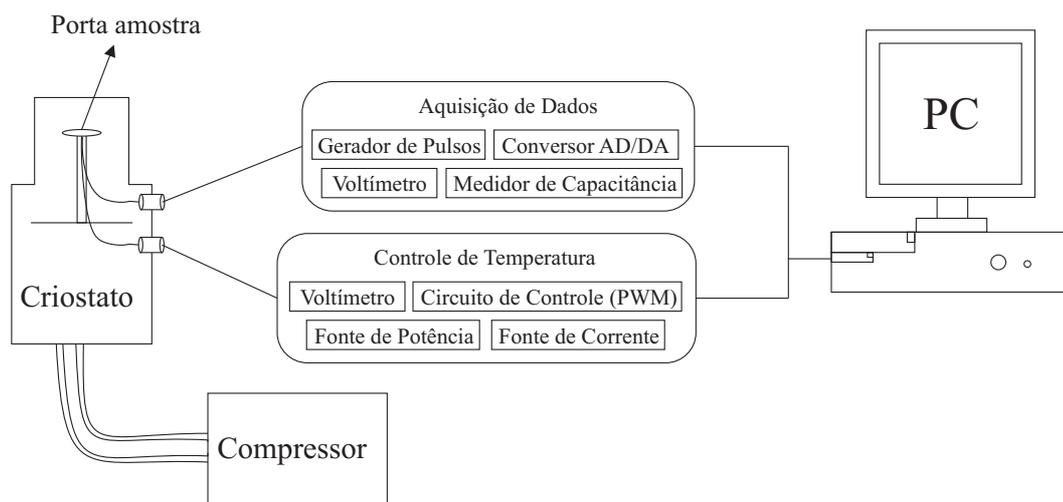


Figura 4.1: Diagrama esquemático para o sistema de medidas DLTS.

Laboratório de Microeletrônica da UFRGS. Um criostato usando hélio é ligado a um compressor, permitindo-se atingir temperaturas de aproximadamente 16K em seu cabeçote. Sobre este último,

fica localizado o porta-amostra, e, ao seu redor, existe um fio resistor para permitir aquecimento e controle da temperatura. A corrente que passa pelo resistor é determinada de maneira automatizada por um circuito externo (PWM) interligado ao computador. A temperatura é medida no porta-amostra, próximo à região da amostra, com um diodo de Si polarizado diretamente usando uma fonte de corrente constante de $10\mu\text{A}$. A queda de tensão nos terminais do diodo é medida com um voltímetro, também acoplado ao computador, e o seu valor está tabelado como função da temperatura. Dois fios criogênicos ligam a amostra ao meio externo, possibilitando o contato desta com o circuito de medida dos transientes de capacitância. Na figura 4.1, esse circuito é representado pelo quadro “Aquisição de Dados” e é composto por um medidor de capacitância Boonton 72B, um gerador de pulsos Agilent 81101A responsável por pulsos de controle (especificar claramente a função), uma placa da conversora AD/DA modelo PCI-6251 da *National Instruments* usada para leitura do transiente e aplicação do pulso de tensão na amostra e um voltímetro Agilent 34401A usado também para leitura digital do sinal de capacitância. Toda a medida é controlada de forma automatizada, utilizando-se um programa de computador que foi desenvolvido por Artur Coelho no Laboratório de Microeletrônica do Instituto de Física da UFRGS. A figura 4.2 mostra fotos do sistema DLTS.

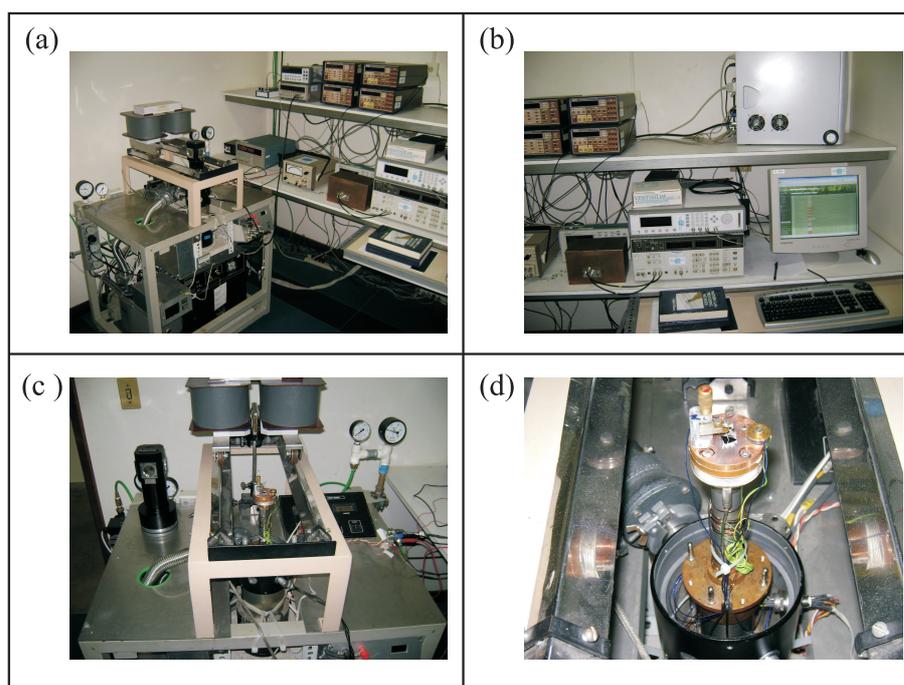


Figura 4.2: (a) Visão geral do sistema. (b) Continuação da visão geral. (c) Criostato aberto. (d) Porta amostra.

Além do sistema de medida DLTS, que foi muito utilizado no trabalho, também usamos a evaporadora resistiva (mostrada na figura 4.3) para evaporação de alumínio e o forno (figura 4.4) de lâmpadas halógenas para recozimentos térmicos rápidos.

Todos os equipamentos descritos até então fazem parte do Laboratório de Microeletrônica do Instituto de Física da UFRGS. No entanto, também utilizamos a infra-estrutura oferecida pelo Labo-



Figura 4.3: Evaporadora resistiva.

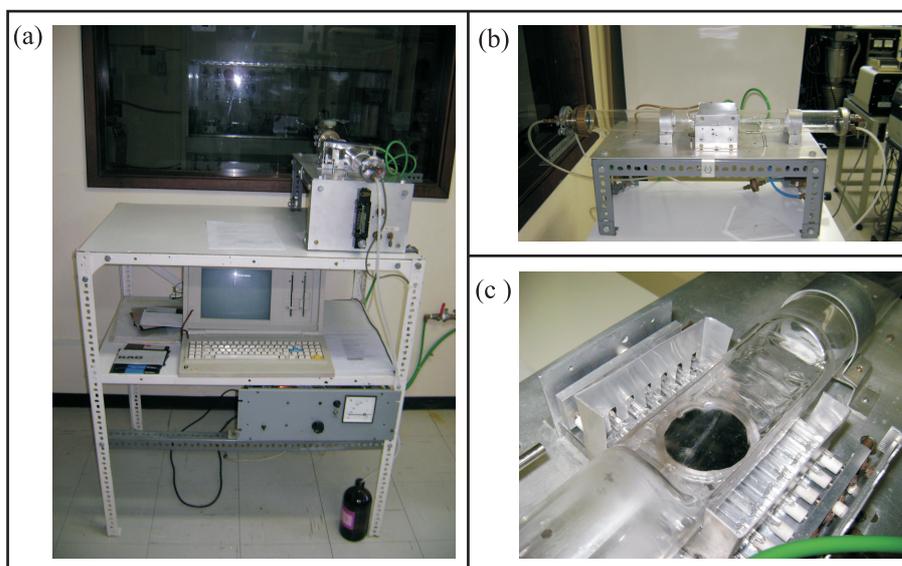


Figura 4.4: (a) Visão geral do forno de recozimento rápido. (b) Tubo de quartzo onde é posto o porta amostra. (c) Porta amostra e lâmpadas halógenas.

ratório de Implantação Iônica da mesma instituição para implantação de algumas amostras.

Na seção seguinte, explicaremos onde utilizamos cada equipamento no processo de preparação das amostras.

4.2 Preparação das Amostras

Amostras p/p+ de GaAs foram preparadas crescendo-se uma camada epitaxial de $3\mu\text{m}$ de GaAs dopado com Zn (concentração de $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, medida com $C \times V$ [6]) - foi utilizado o MOCVD (*Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*) da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - sobre um substrato p+ de GaAs. Algumas amostras permaneceram sem implantação (como crescidas), enquanto outras seguiram para uma etapa de implantação com prótons de 600 keV a uma dose de $3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Esse valor de energia foi utilizado para que o pico da distribuição de danos ficasse localizado fundo no substrato, de forma que a camada epitaxial apresentasse uma distribuição aproximadamente uniforme de defeitos. Durante a implantação, a reta normal à superfície das amostras foi mantida a um ângulo de 15° em relação ao eixo do feixe para evitar efeitos de canalização.

Após, contatos Schottky circulares de alumínio, com diâmetro de 0,8 mm, foram depositados por evaporação resistiva usando uma máscara mecânica. O contato ôhmico traseiro foi obtido pela aplicação manual de uma liga de InGa. Algumas amostras implantadas foram submetidas a diferentes etapas de tratamento térmico rápido com 1 minuto de duração, em atmosfera de argônio e a temperaturas entre 150 e 300°C . A figura 4.5 resume o processo de preparação das amostras. Devido a

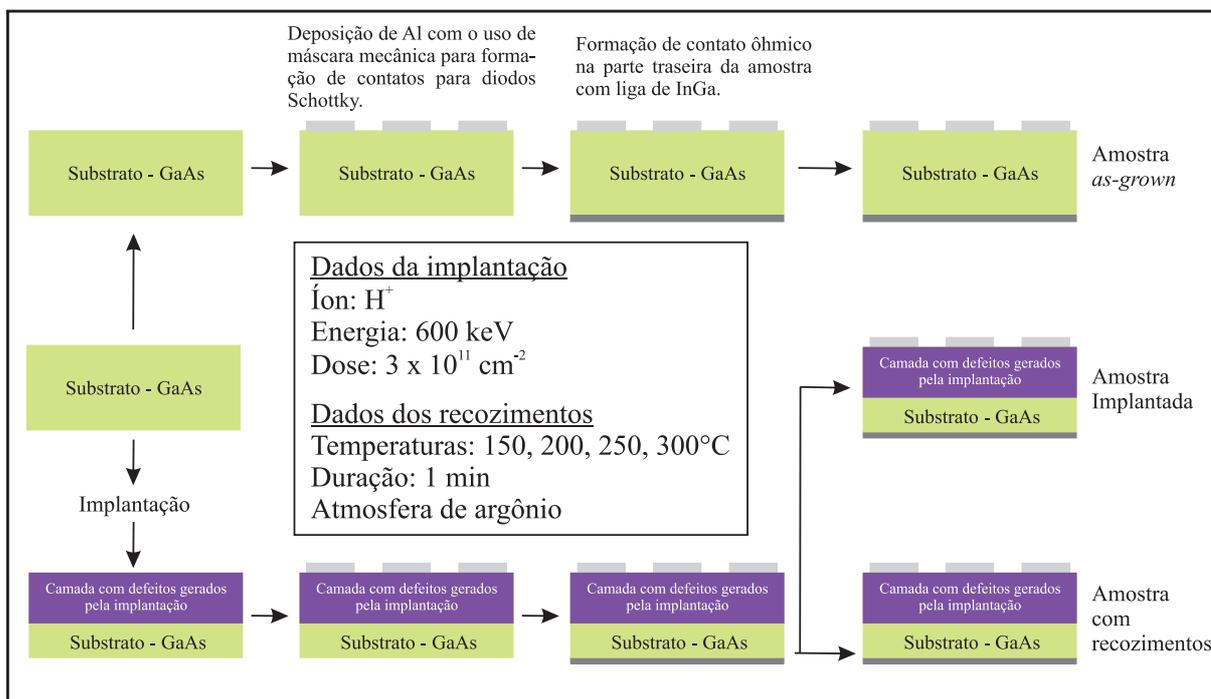


Figura 4.5: Resumo esquemático do processo de preparação de amostras.

fins didáticos, a camada com defeitos gerados pela implantação iônica representada na figura 4.5 está totalmente fora de escala. Sua espessura real é a da camada epitaxial ($3\mu\text{m}$).

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1 DLTS

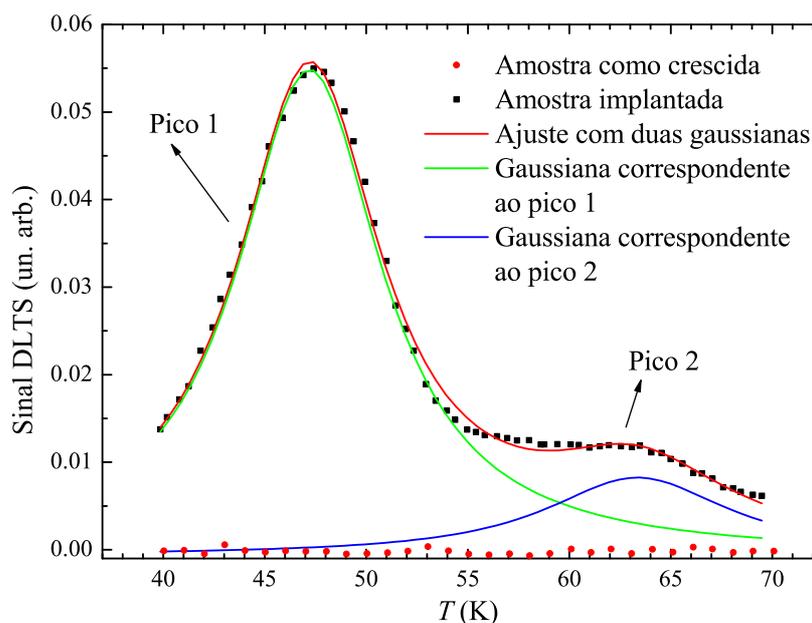


Figura 5.1: Espectros DLTS comparando a amostra como crescida e a amostra implantada com prótons. Para o cálculo do espectro, utilizamos $e_p(T_{\text{pico}}) = 50 \text{ s}^{-1}$.

A figura 5.1 apresenta a região de baixas temperaturas dos espectros DLTS obtidos para uma amostra sem implantação e outra implantada com prótons. A implantação causa a introdução de dois picos distintos no espectro: o pico 1, de altura maior e posicionado na região de mais baixas temperaturas, e o pico 2, de intensidade bem mais fraca e posicionado à direita no espectro. Estas duas contribuições aparecem misturadas no espectro, de forma que, para melhor distingui-las, um ajuste utilizando curvas gaussianas foi utilizado. A partir deste ajuste, a altura das duas contribuições foi adequadamente medida, resultando nos valores de taxa de introdução de $610 \text{ ion}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ para o

pico 1 e $91 \text{ ion}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ para o pico 2.

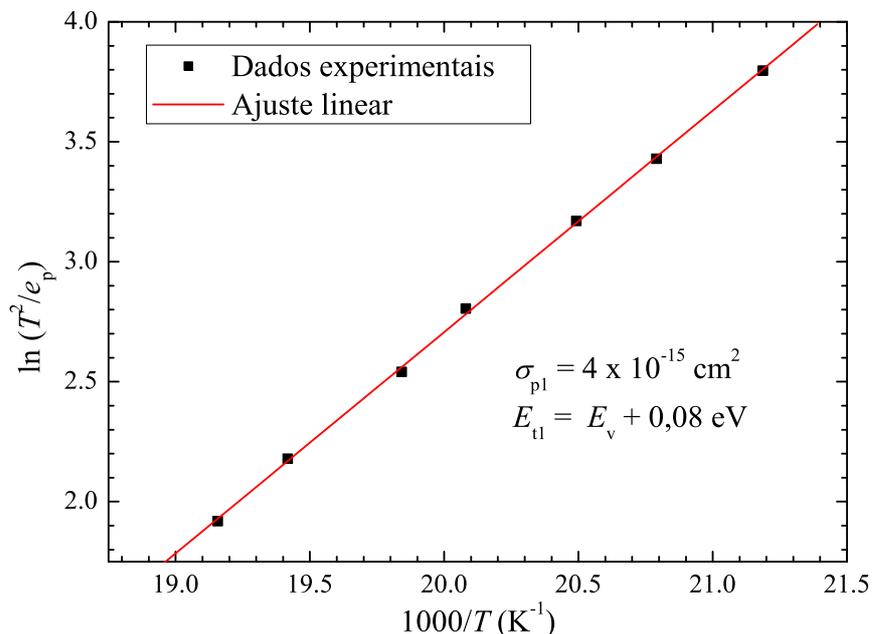


Figura 5.2: Plot de Arrhenius do nível referente ao pico 1.

Na figura 5.2, está ilustrado o plot de Arrhenius para determinar os parâmetros do nível correspondente ao pico 1. Os valores obtidos para sua energia e seção de choque de captura de lacunas foram, respectivamente: $E_{t1} = E_v + 0,08 \text{ eV}$ e $\sigma_{p1} = 4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$. Já na figura 5.3, apresentamos o plot de Arrhenius para o nível correspondente ao pico 2. Os parâmetros energia e seção de choque de captura de lacunas encontrados foram, respectivamente: $E_{t2} = E_v + 0,1 \text{ eV}$ e $\sigma_{p2} = 2,5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$.

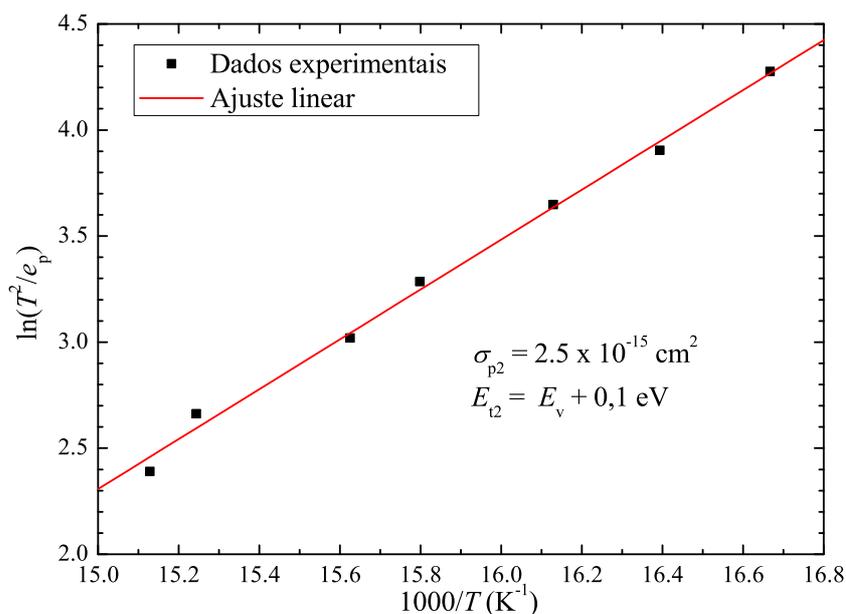


Figura 5.3: Plot de Arrhenius do nível referente ao pico 2.

5.1.1 Estabilidade Térmica dos Defeitos

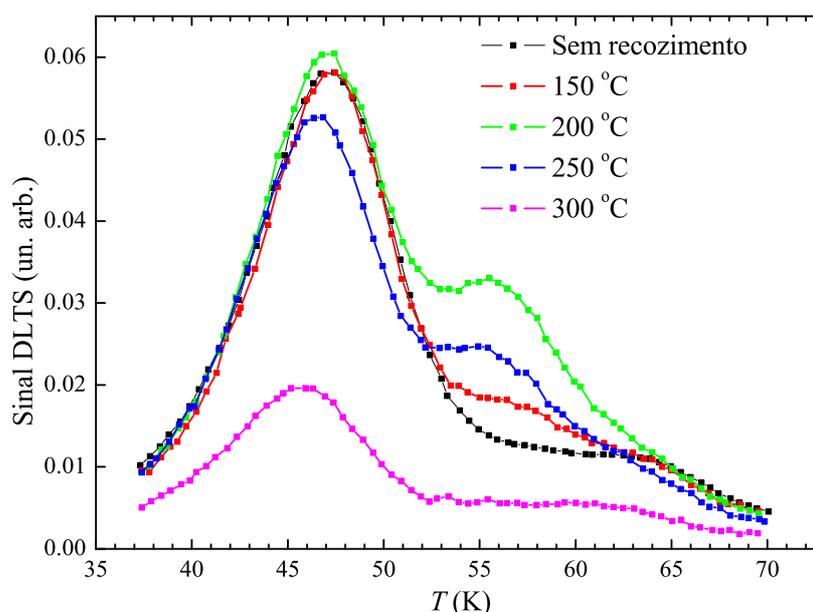


Figura 5.4: Efeito dos tratamentos térmicos rápidos sobre os picos no espectro DLTS. Para o cálculo do espectro, utilizamos $e_p(T_{\text{pico}}) = 50 \text{ s}^{-1}$.

Os espectros DLTS obtidos após os tratamentos térmicos estão representados na figura 5.4. Além dos picos 1 e 2, um terceiro pico se torna evidente após recozimento a temperaturas na faixa de 150 a 200 °C. Esta é a mesma região de temperaturas de recozimento em que se observou um aumento da resistência de folha em amostras de GaAs tipo-p implantadas com prótons [21], um fenômeno que foi chamado recozimento reverso, uma vez que a tendência normal dos tratamentos térmicos em amostras de GaAs implantadas é a diminuição da resistência de folha pela redução na concentração dos defeitos. Essa coincidência na região de temperaturas em que se evidenciam tanto o recozimento reverso como o aparecimento do terceiro pico sugere que este nível possa ser o responsável pelo fenômeno. No entanto, apenas estudos mais aprofundados poderão atestar a veracidade desta hipótese.

Também fica evidente na figura 5.4 que os três picos observados sofrem uma forte redução em sua altura, que está associada à concentração do correspondente nível, para recozimentos a temperaturas na região de 250 a 300 °C.

5.2 Medidas da Dependência da Taxa de Emissão com o Campo Elétrico

As variações das taxas de emissão dos picos 1 e 2 como função do campo elétrico também foram medidas. A Figura 5.5 mostra que os dados experimentais obtidos para o pico 1 não reproduzem uma tendência completamente linear nem em um gráfico de $\ln(e_p)$ versus $F^{1/2}$, nem em outro de $\ln(e_p)$ versus F^2 .

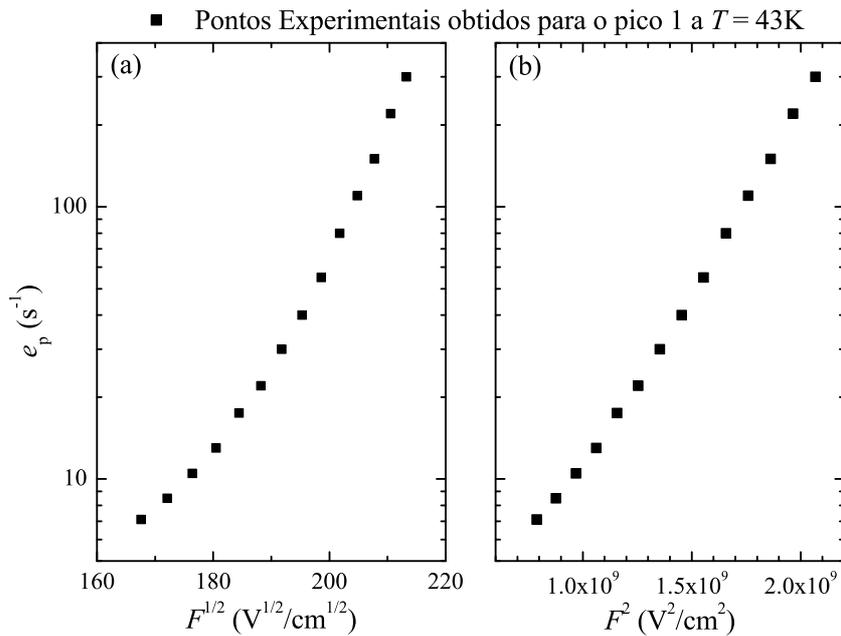


Figura 5.5: (a) Tentativa de identificação do efeito Poole-Frenkel e (b) do efeito de tunelamento auxiliado por fônons nos dados obtidos para o pico 1.

Isto nos revela que estes dados não podem ser exclusivamente descritos nem pelo efeito Poole-Frenkel, nem pelo efeito de tunelamento auxiliado por fônons. Como representado na figura 5.6, foi necessária a utilização conjunta dos dois efeitos para reproduzir o comportamento observado. Para tanto, a taxa de emissão foi descrita como:

$$e_p = e_{p_0} \exp\left(\frac{\Delta E_{\text{bar}}}{kT}\right) + \sum_m \Pi_m \Gamma(\Delta_m), \quad (5.1)$$

onde o primeiro termo corresponde à contribuição do efeito Poole-Frenkel e o segundo ao efeito de tunelamento auxiliado por fônons (segundo Pons e Makram-Ebeid). O melhor ajuste possível foi obtido utilizando-se $Z = 1$, o que implica em uma transição de estado de carga do tipo $0/-$ (o defeito associado tem estado de carga 0 quando o nível correspondente ao pico 1 está com a lacuna e -1 quando ele está sem a lacuna). Além disso, os outros parâmetros encontrados no ajuste foram $e_{p_0} = 0,00045 \text{ s}^{-1}$, $S = 0,1$, $\hbar\omega = 0,01 \text{ eV}$ e $\gamma_2 = 3 \times 10^{-3} \text{ eV}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

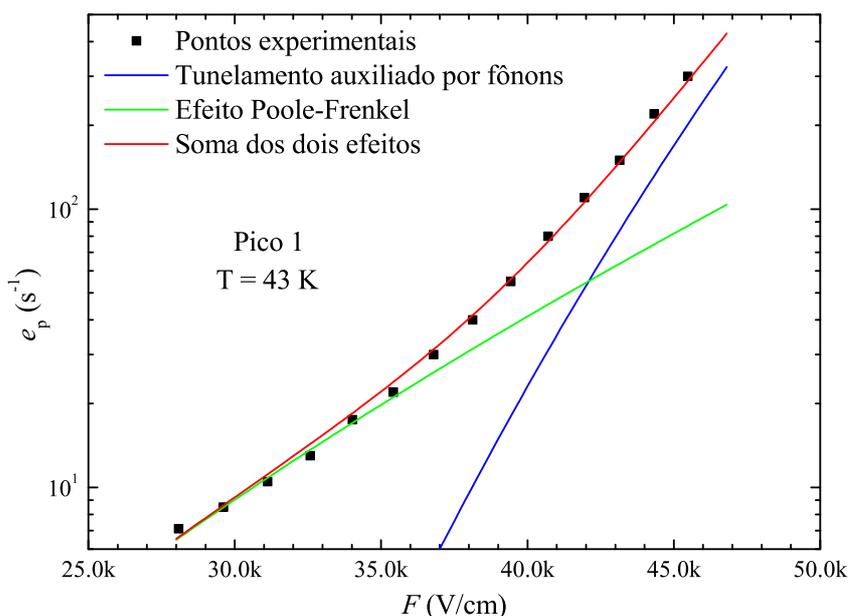


Figura 5.6: Ajuste dos dados obtidos para o pico 1 usando a soma do efeito Poole-Frenkel e do efeito de tunelamento auxiliado por fônons (descrição teórica de Pons e Makram-Ebeid).

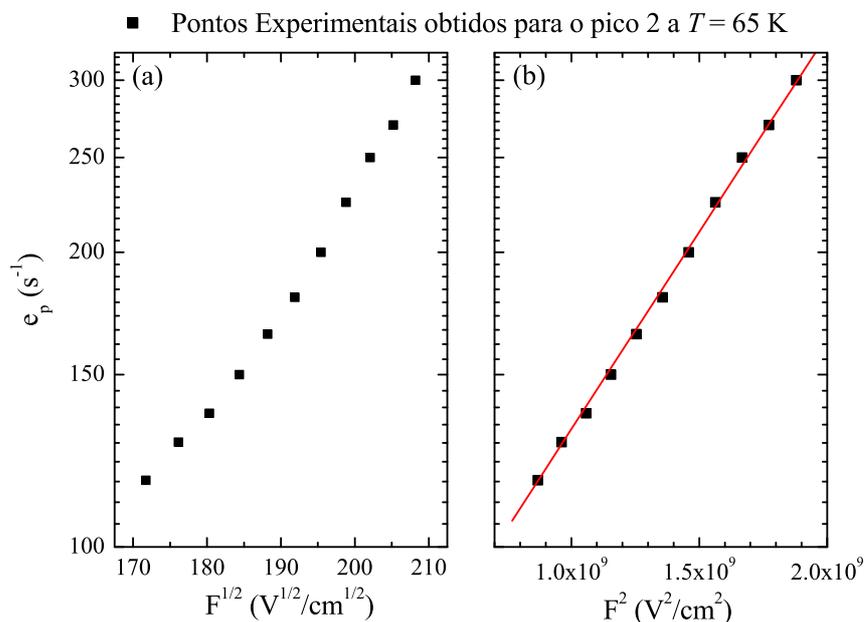


Figura 5.7: (a) Tentativa de identificação do efeito Poole-Frenkel e (b) do efeito de tunelamento auxiliado por fônons nos dados medidos para o pico 2.

Já para o pico 2, como representado na figura 5.7 e na figura 5.8, o efeito de tunelamento auxiliado por fônons consegue descrever completamente os dados experimentais obtidos. A ausência do efeito Poole-Frenkel aponta para uma provável inexistência de contribuição Coulombiana atrativa no potencial do defeito associado a este pico. Assim, a transição de estado de carga desse nível

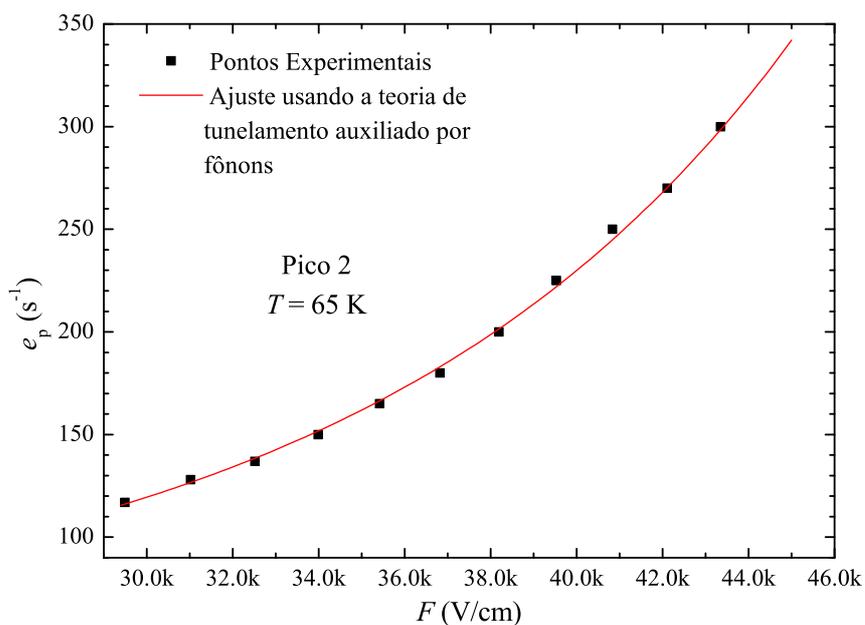


Figura 5.8: Ajuste dos dados obtidos para o pico 2 usando a teoria de tunelamento auxiliado por fônons de Karpus e Perel. Os parâmetros utilizados foram: $e_{p_0} = 50,4 s^{-1}$ e $\tau = 1,48 \times 10^{-12} s$.

provavelmente não contenha contribuições negativas (transições mais prováveis: $+/0$, $++/+$, etc.). Como potenciais Coulombianos repulsivos usualmente levam a valores de seção de choque muito inferiores ao observado para esse nível ($2,5 \times 10^{-15} cm^2$) [7], a transição mais provável é $+/0$.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

6.1 Conclusões

Dois níveis, E_{t_1} e E_{t_2} , foram introduzidos próximos à banda de valência devido à implantação de prótons: o primeiro, referente ao pico 1, possui energia $E_{t_1} = E_v + 0,08\text{eV}$ e seção de choque de captura de lacunas $\sigma_{p_1} = 4 \times 10^{-15}\text{cm}^2$; o segundo, referente ao pico 2, possui energia $E_{t_2} = E_v + 0,1\text{eV}$ e seção de choque de captura de lacunas $\sigma_{p_2} = 2,5 \times 10^{-15}\text{cm}^2$. Esses dois níveis medidos a temperaturas menores de 70K em espectros DLTS para amostras tipo-p completam o quadro dos níveis introduzidos em GaAs pela implantação com prótons, uma vez que as principais contribuições já estão identificadas e caracterizadas [22, 23, 24].

Vale ressaltar a importância do nível identificado pelo pico 1 neste trabalho: ele possui uma elevada taxa de introdução, e sua correspondente transição de estado de carga 0/− juntamente com uma privilegiada posição próximo à banda de valência (baixa energia) o tornam uma excelente armadilha para o aprisionamento de elétrons livres. O ponto fraco desse nível é a forte etapa de recozimento entre 250 e 300°C. Para que esse nível seja preservado, todos os passos tecnológicos subsequentes à implantação para isolação devem ficar restritos a temperaturas menores que 250°C (por volta desta temperatura, o As intersticial se torna móvel [12], causando principalmente a recuperação de uma série de defeitos).

O nível correspondente ao pico 2, por sua vez, não contribui significativamente para o processo de isolação: sua taxa de introdução é muito baixa e sua transição de estado de carga (+/0), associada a uma energia próxima à banda de valência, o torna uma armadilha de lacunas muito pouco eficiente.

6.2 Perspectivas

A partir dos resultados obtidos, podemos elaborar um modelo teórico para uma simulação computacional da curva de isolamento elétrica. Tal modelo incluiria a transição de estado de carga de cada nível para o cálculo da resistência de folha da amostra em função da dose de implantação.

Além disso, propomos fazer um estudo similar em outros materiais, como por exemplo, GaN, SiC, $\text{GaAs}_x\text{N}_{1-x}$ e Ge, tendo em vista o grande potencial de aplicabilidade desses novos materiais para a micro e nanoeletrônica.

Referências Bibliográficas

- [1] Semiconductor Industry Association Factsheet. Disponível em: <<http://www.sia-online.org>>.
- [2] GHANDI, S. K. *VLSI Fabrication Principles, Silicon and Gallium Arsenide*. 2. ed. New York: John Wiley, 1994.
- [3] SOUZA, J. P. de; DANILOV, I.; BOUDINOV, H. Thermal stability of the electrical isolation in n-type GaAs: effects of damage and carrier concentrations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Amsterdam, v. 122, n. 1, p. 51-54, Jan. 1997.
- [4] LANNOO, M.; BOURGOIN, J. *Point defects in semiconductors I: theoretical aspects*. Berlin: Springer-Verlag, 1981.
- [5] SZE, S. M. *Physics of Semiconductor Devices*. 2. ed. New York: John Wiley, 1981.
- [6] SCHRODER, D. K. *Semiconductor material and device characterization*. New York: John Wiley, 1998.
- [7] BLOOD, P.; ORTON, J. W. *The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states*. London: Academic Press, 1997.
- [8] FRENKEL, J. On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors. *Physical Review*, v. 54, n. 8, p. 647-648, Oct. 1938.
- [9] MAKRAM-EBEID, S.; LANNOO, M. Quantum model for phonon-assisted tunnel ionization of deep levels in a semiconductor. *Physical Review B*, Woodbury, v. 25, n. 10, p. 6406-6424, May 1982.
- [10] MARTIN, P. A.; STREETMAN, B. G.; HESS, K. Electric field enhanced emission from non-Coulombic traps in semiconductors. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 52, n. 12, p. 7409-7415, Dec. 1981.
- [11] GANICHEV, S. D. et al. Distinction between the Poole-Frenkel and tunneling models of electric-field-stimulated carrier emission from deep levels in semiconductors. *Physical Review B*, Melville, v. 61, n. 15, p. 10361-10365, Apr. 2000.

- [12] KOROL, E. N. Ionization of impurity states in semiconductors by an electric field. *Soviet Physics - Solid State*, New York, v. 19, n. 8, p. 1327-1330, Aug. 1977.
- [13] HUANG, K.; RHYS, A. Theory of light absorption and non-radiative transitions in F-centres. *Proceedings of the Royal Society of London A*, London, v. 204, n. 1078, p. 406-423, Dec. 1950.
- [14] KARPUS, V.; PEREL, V. I. Multiphonon ionization of deep centers in semiconductors in an electric field. *Soviet Physics JETP*, Woodbury, v. 64, n. 6, p. 1376-1383, Dec. 1986.
- [15] PONS, D.; MAKRAM-EBEID, S. Phonon assisted tunnel emission of electrons from deep levels in GaAs. *Le Journal de Physique*, Orsay, v. 40, n. 12, p. 1161-1172, déc. 1979.
- [16] KARPUS, V.; PEREL, V. I. Thermoionization of deep centers in semiconductors in an electric Field. *JEPT Letters*, New York, v. 42, n. 10, p. 497-500, Nov. 1985.
- [17] GANICHEV, S. D.; PRETTI, W.; YASSIEVICH, I. N. Deep impurity-center ionization by far-infrared radiation. *Physics of the Solid State*, Woodbury, v. 39, n. 11, p. 1703-1726, Nov. 1997.
- [18] ABAKUMOV, V. N. et al. Theory of the multiphonon capture of an electron by a deep trapping center. *Soviet Physics JETP*, New York, v. 62, n. 4, p. 853-861, Oct. 1985.
- [19] LEFÈVRE, H.; SCHULZ, M. Double Correlation Technique (DDLTS) for the analysis of deep level profiles in semiconductors. *Applied Physics*, Berlin, v. 12, n. 1, p. 45-53, Jan. 1977.
- [20] MAKRAM-EBEID, S. Effect of electric field on deep-level transients in GaAs and GaP. *Applied Physics Letters*, New York, v. 37, n. 5, p. 464-466, Sept. 1980.
- [21] BOUDINOV, H.; COELHO, A. V. P.; SOUZA, J.P. Electrical isolation of p-type GaAs layers by ion irradiation. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 91, n. 10, p. 6585-6587, May 2002.
- [22] COELHO, A. V. P.; BOUDINOV, H. Emission rate dependence on the electric Field for two trap levels in proton-irradiated n-type GaAs. *Physical Review B*, v. 77, 235210, June 2008.
- [23] BOUDINOV, H.; COELHO, A. V. P.; TAN, H. H.; JAGADISH C. Characterization of deep level traps responsible for isolation of proton implanted GaAs. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 93, n. 6, p.3234-3238, Mar. 2003.
- [24] GOODMAN, S. A. et al. Proton irradiation of n-type GaAs. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Amsterdam, v. 148, n. 1/4, p. 446-449, Jan 1999.

Apêndice A

Resistência de Folha

Seja uma amostra com espessura d , comprimento L e largura W , como mostra a figura A.1. Sabemos que a definição de resistência elétrica R para um fluxo de corrente perpendicular através da

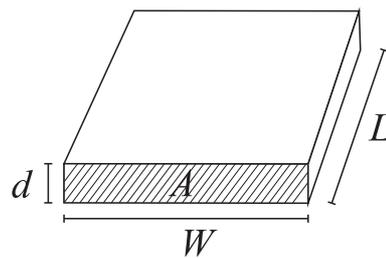


Figura A.1: Representação geométrica de uma amostra para a definição da resistência de folha, R_s .

seção de área A é

$$R = \rho \frac{L}{A}, \quad (\text{A.1})$$

que podemos escrever como

$$R = \rho \frac{L}{dW}. \quad (\text{A.2})$$

A partir da equação (A.2), a resistência de folha R_s de uma camada com espessura d é definida como

$$R = R_s \frac{L}{W}, \quad (\text{A.3})$$

ou seja,

$$R_s \equiv \frac{\rho}{d}. \quad (\text{A.4})$$

A partir da equação (A.4) vemos que R_s é uma propriedade intrínseca da camada medida. De acordo com a definição, R_s possui unidade de Ω . Entretanto, por se tratar da resistência de uma camada e para diferenciar da resistência elétrica comum, usa-se Ω/\square como unidade padrão de resistência de folha e lê-se ohm por quadrado. A razão para o nome ohms por quadrado é que se considerarmos uma camada com simetria quadrada ($L = W$) temos que a resistência elétrica é igual a resistência de folha, independentemente do tamanho do quadrado. Essa unidade pode ser interpretada como ohms por razão de aspecto. É importante ressaltar que quando o termo resistência de folha é usado, a corrente elétrica deve fluir ao longo do plano da folha, ou seja, deve ser paralela ao plano definido por W e L .

Apêndice B

Deep levels fine structure in proton implanted p-type GaAs

Alguns dos resultados obtidos nesse trabalho fizeram parte da publicação do seguinte artigo: COELHO, A. V. P.; ADAM, M. C.; BOUDINOV, H. I. Deep levels fine structure in proton implanted p-type GaAs. *Journal of Physics D, Applied Physics*, v. 43 (2010) 205104. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/43/20/205104>.