

# AlGaAs :Sn 中 DX 中心电子俘获势垒的精细结构<sup>\*</sup>

肖细凤 康俊勇

(厦门大学物理系, 厦门 361005)

(2001 年 1 月 12 日收到; 2001 年 6 月 27 日收到修改稿)

采用定电容电压法, 测量了 n 型  $\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74}\text{As}:\text{Sn}$  中 DX 中心电子热俘获瞬态, 以及不同俘获时间后的电子热发射瞬态; 并对瞬态数据进行数值 Laplace 变换, 得到其 Laplace 缺陷谱(LDS). 通过分析 LDS 谱, 确定了电子热俘获和热发射 LDS 谱之间的对应关系, 从而得到热俘获系数对温度依赖关系, 以及与 Sn 相关的 DX 中心部分电子热俘获势垒的精细结构; 通过第一原理赝势法计算表明, Sn 附近的 Al/Ga 原子的不同配置是电子热俘获势垒精细结构产生的主要原因.

关键词: Laplace 缺陷谱, 俘获势垒, DX 中心, AlGaAs :Sn

PACC: 7155, 0230, 0750

## 1 引 言

深能级的存在严重地影响着半导体载流子的输运和寿命, 对控制半导体的光电性质和改变半导体器件的质量起着重要作用. DX 中心是许多 n 型化合物半导体及其混晶里发现的一种与施主相关的深能级缺陷, 它具有许多奇异的性质, 如光离化能和热离化能差别很大. 在低温下由于电子俘获截面很小引起持久光电导效应(PPC), 引起了人们极大的兴趣. 为此, 人们采取了种种方法研究 DX 中心<sup>[1,2]</sup>, 其中结电容和结电流方法是最为普遍的技术之一<sup>[3]</sup>. 由于 DX 中心上电子跃迁产生的瞬态信号为非指数, 人们通常采用拟合法、曲线剥离法等来分解瞬态信号的各指数分量. 这些方法都需要预先人为地假设一些参数, 因此带有很大的主观因素.

后来, 人们提出了用 Laplace 深能级瞬态谱(Laplace DLTS)方法, 直接对非指数瞬态进行数值 Laplace 变换, 免除了任何预先的假设, 因而其结果能真实地反映载流子跃迁过程的精细结构. 然而, 这种方法计算量大, 只适合于在大中型计算机上运行<sup>[4]</sup>. 最近, 我们研究组设计了一种采用共轭梯度法进行数值 Laplace 变换的简单方法<sup>[5]</sup>, 称 Laplace 缺陷谱法(LDS). 该变换程序适合于在个人计算机

上运行, 并实现了对许多缺陷能级上载流子的热发射瞬态的实时数值 Laplace 变换, 确定了载流子热激活能的精细结构<sup>[6,7]</sup>. 但是, 用此方法还未对缺陷能级上载流子的热俘获瞬态进行系统研究. 由于发射和俘获是载流子跃迁的两个重要的过程, 为了全面地了解 DX 中心能级的精细结构, 有必要对其电子俘获的 LDS 谱进行研究.

本文通过测量不同温度下 n 型  $\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74}\text{As}:\text{Sn}$  中 DX 中心上电子热俘获和不同俘获时间后电子热发射的定电容电压瞬态, 并对瞬态数据进行数值 Laplace 变换, 得到其 Laplace 缺陷谱(LDS). 通过分析 LDS 谱, 确定电子热发射和热俘获的 LDS 谱之间的对应关系; 从而得到热俘获系数及其温度依赖关系, 以及 Sn 相关 DX 中心电子热俘获势垒的精细结构. 最后, 分析和讨论混晶无序对电子热俘获势垒精细结构的影响.

## 2 实验方法

本研究采用的样品为 AlGaAs 单边突变结  $p^+n$  二极管, 以避免 p 型层的影响. 其中 n 型 AlGaAs 是在  $n^+\text{GaAs}$  衬底上, 通过液相外延法生长的. 生长过程中掺入 Sn 施主杂质, 通过测量室温下样品的电容-电压特性, 得到净自由电子浓度约为  $(3-6)\times$

\* 国家“863”计划(批准号: 715-010-0022)、国家自然科学基金(批准号: 6976023)、福建省自然科学基金(批准号: A0020001)资助的课题.

$10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .  $p^+$  层通过 Zn 扩散形成. 测量时将样品放置在液氮冷却的恒温器中, 并将测量温度控制在 100K—200 K 范围. 用电容仪 (Boonton 72BD) 测量电容变化, 同时用定电容偏压瞬态装置维持结电容不变测量定电容偏压瞬态.

测量得到的电压瞬态通过微机 (Athlon K7 800MHz 中央处理器, 20.4G 硬盘, 256M 内存) 进行数值 Laplace 变换, 由于通常的俘获瞬态  $f(t)$  可以表达成积分的形式, 即

$$f(t) = \int_0^{\infty} F(\tau) \left(1 - e^{-t/\tau}\right) d(1/\tau), \quad (1)$$

其中  $\tau$  为时间常数, 在实验中测量得到的瞬态处于有限的时间范围, 且俘获瞬态  $f(t)$  为离散的数据点, 不可能采用积分的方式对式中的指数项进行 Laplace 变换, 因此有必要将上式改成数值求和的形式, 即

$$f(t) = \sum_{j=0}^M F(\tau_j) \cdot \left(1 - e^{-t/\tau_j}\right) \Delta(1/\tau_j), \quad (2)$$

这样, 采用数值 Laplace 变换可以得到俘获瞬态的 Laplace 缺陷谱 (LDS).

### 3 结果与讨论

在测量 DX 中心电子热俘获过程之前, 将样品放置于室温恒温器中, 同时在样品的两端加  $-3 \text{ V}$  的反向偏压. 然后, 维持反向偏压, 将恒温器的温度降低到测量温度. 在测量温度维持 30min 不变后, 将样品两端的偏压改变为  $0 \text{ V}$ . 待电容仪响应后, 用定电容偏压瞬态装置改变样品两端的偏压, 以维持结电容不变. 在不同温度下, 测量得到偏压瞬态. 为了便于比较和分析, 将偏压瞬态归一化, 并取对数, 典型的瞬态过程如图 1 所示. 结果显示, 瞬态过程随温度的升高而缩短, 并且均为曲线. 瞬态过程随温度变化表明, DX 中心电子的俘获过程是热激活的过程. 而瞬态过程的弯曲表明, DX 中心电子的热俘获瞬态为非指数, 因为单指数瞬态的半对数图应为直线.

非指数的定电容电压瞬态可能由电场增强俘获、自由载流子带尾以及混晶无序效应引起. 为了了解其产生的原因, 我们测量了不同偏压下, 俘获过程的电容瞬态, 并将它们相减. 所得到的瞬态基本上是在单一电场强度作用下, 消除了自由载流子带尾效应的俘获过程. 结果表明, 其非指数程度并没有明显改善, 可见, 混晶无序效应是定电容电压瞬

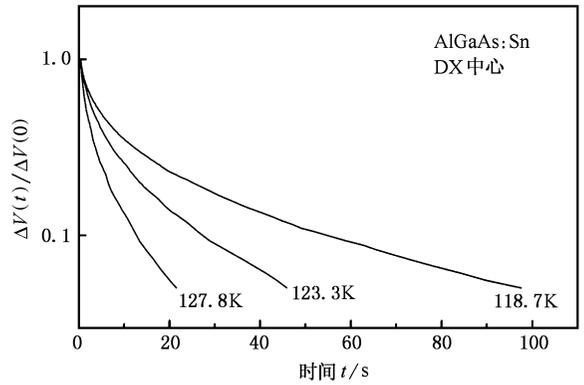


图 1 不同温度下 DX 中心电子热俘获过程的定电容电压瞬态非指数的主要原因.

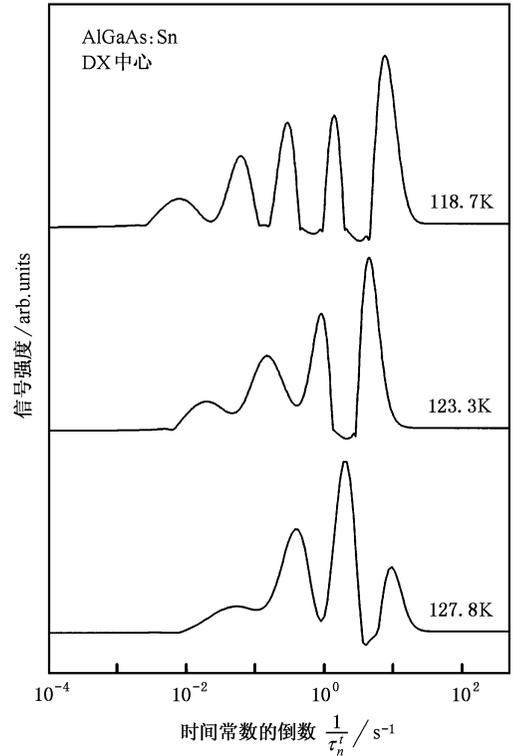


图 2 不同温度下 DX 中心电子热俘获瞬态的 LDS 谱

态非指数定电容电压瞬态进行数值 Laplace 变换, 得到 LDS 谱. 图 2 为不同温度下 DX 中心电子热俘获过程的 LDS 谱, 其横坐标为时间常数的倒数, 纵坐标为信号强度, 每一个谱峰对应一个的时间常数. 由图可见, 所有谱线均呈多峰结构. 随着温度的升高, 谱峰向短时间常数方向移动, 其个数相应减少. 谱峰随温度的变化规律是由于电子热俘获过程随温度升高而加快, 而电容仪的响应时间又固定不变, 于是快于电容仪响应时间的俘获过程就无法被

记录. 多峰结构表明, 非指数瞬态是由多个分立时间常数的单指数瞬态构成, 混晶无序效应是产生多峰结构的主要原因.

人们知道, 电子热俘获单指数定电容电压瞬态满足下列公式:

$$\Delta V(t) = \Delta V(0)(1 - e^{-t/\tau_n}), \quad (3)$$

其中时间常数的倒数  $1/\tau_n$  与电子热俘获系数  $c_n^t$ 、热发射率  $e_n^t$  以及导带中自由电子浓度  $n(T)$  的函数为

$$c_n^t \cdot n(T) + e_n^t = 1/\tau_n. \quad (4)$$

由此可见, 要得到电子热俘获系数, 除从 LDS 谱中测得每个谱峰的时间常数外, 还需确定其对应的电子热发射率以及自由电子浓度.

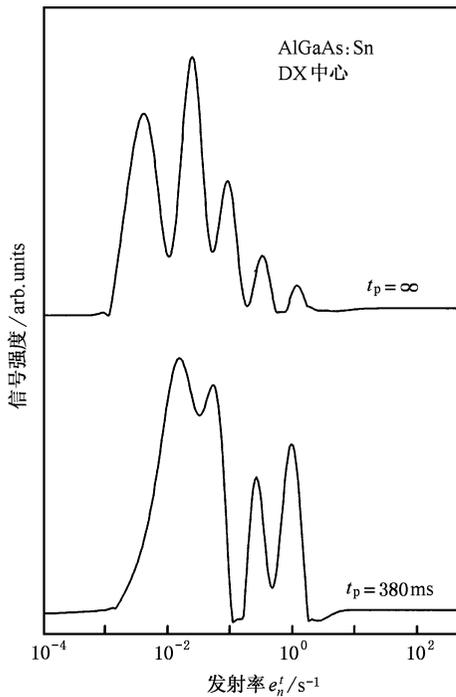


图3 在 121.0K 温度下, 注入脉冲时间  $t_p$  分别为 380ms 和足够长时, DX 中心电子热发射的 LDS 谱

为此, 我们测量了不同俘获时间  $t_p$  后, DX 中心电子热发射的定电容电压瞬态. 对这些瞬态进行数值 Laplace 变换, 得到电子热发射的 LDS 谱. 随着俘获时间的延长, 在低发射率端的谱峰个数随之增加, 其典型的结果如图 3 所示. 当  $t_p$  为 380 ms 时, LDS 谱上可看到四个清晰的峰; 当  $t_p$  足够长时, 在 LDS 谱的低发射率端, 有新谱峰出现. 由于电子依次填充的能级俘获系数由大到小, 其对应的发射率 LDS 谱也依次由高到低. 俘获 LDS 谱反映的是电子俘获的全过程, 其对应的谱线应是相同温度下俘获时间

足够长后的发射 LDS 谱. 然而, 相同温度下的俘获 LDS 谱峰个数都比俘获时间足够长后的发射 LDS 谱峰个数少. 这主要起因于相同温度下的俘获过程比发射过程快, 俘获过程中快于电容仪响应时间的部分要比发射过程多, 能被记录的俘获过程也就相对减少. 因此, 我们认为, 在相同温度的俘获和发射 LDS 谱中, 谱峰的时间常数应由长到短 (即由左到右) 一一对应.

另一方面, 我们采用电容-电压特性法, 在不同温度下测量了导带上的自由电子浓度. 根据 (4) 式, 将各俘获谱峰时间常数的倒数减去相应的热发射率, 然后将得到的热俘获率除以相应温度的自由电子浓度, 得到不同温度下不同谱峰的一系列电子热俘获系数  $c_n^t$ . 电子热俘获系数是俘获势垒  $E_c$  和温度  $T$  的函数:

$$c_n^t = BT^{1/2} \exp(-E_c/kT), \quad (5)$$

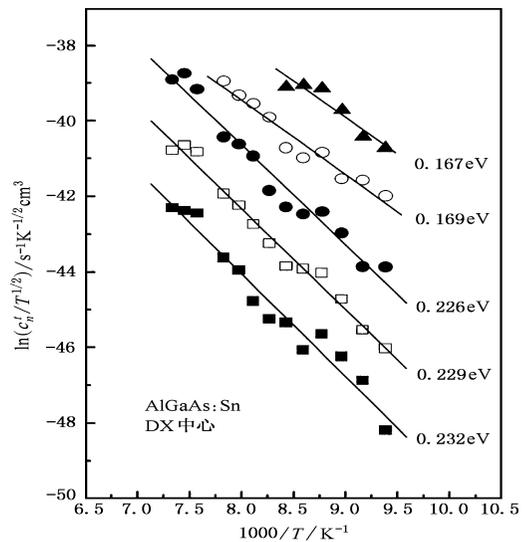


图4 DX 中心电子热俘获系数与温度的 Arrhenius 关系图

式中  $B$  是与温度无关的常数,  $k$  为玻尔兹曼常数. 根据 (5) 式作  $\log(c_n^t/T^{1/2})$  对  $1/T$  的 Arrhenius 图, 并分别线性拟合各谱峰的数据, 从所得的直线斜率得到各谱峰对应的热俘获势垒. 由于在较高温区, 热俘获瞬态超出电容仪响应时间的部分较大, 热俘获的 LDS 谱峰个数减少, 因此能可靠地拟合得到直线只有 5 条, 如图 4 所示. 从直线斜率计算得到的热俘获势垒分别为 0.232, 0.229, 0.226, 0.169 和 0.167eV. 前 3 个与后 2 个俘获势垒的数值相差较大, 可能表明它们分别具有不同的起源. 我们以前对 Sn 相关 DX 中心电子热发射的研究表明<sup>[7]</sup>, 电子热发射精细结构谱具有 6 个峰, 其中热激活能较大

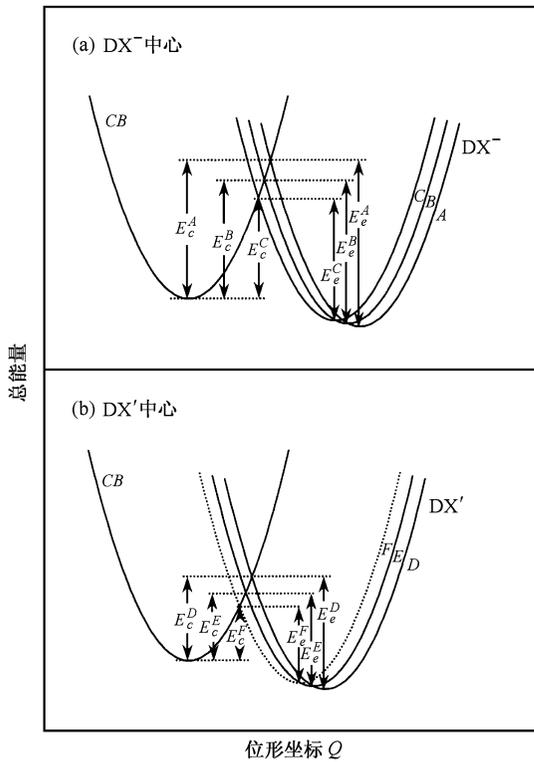


图5 DX 中心的精细结构位形图, 其中(a)DX<sup>-</sup>中心; (b)DX'中心.  $E_c$  和  $E_e$  分别表示 DX 中心电子热俘获势垒和热发射率激活能 CB 为导带

的 3 个为一组, 起源 DX<sup>-</sup>中心; 热激活能较小的 3 个为另一组, 起源 DX'中心. 由前面得到的热俘获谱峰与热发射谱峰的对应关系, 我们认为, 两组俘获势垒 0.232, 0.229, 0.226 和 0.169, 0.167 eV 也应分别属于 DX<sup>-</sup>和 DX'中心, 每组俘获势垒的微小差别反映了混晶无序效应产生的局域组分对 DX 中心的能级精细结构的影响.

根据 Kubo-Toyozawa 导出的公式<sup>[8]</sup>, 热俘获势垒公式为

$$E_c = \frac{(E_b - d_{FC})^2}{4d_{FC}}, \quad (6)$$

其中  $E_c$  为热俘获势垒,  $E_b$  为束缚能,  $d_{FC}$  为晶格弛豫能. 将得到的热俘获势垒和热激活能精细结构的实验数值代入 (6) 式, 考虑到 DX 中心是大晶格弛豫结构, 可计算得俘获势垒为 0.232, 0.229, 0.226 和 0.169, 0.167 eV 的能级对应晶格弛豫能分别为 1.115, 1.072, 1.028 和 0.717, 0.674 eV, 其位形坐标分别如图 5 中 (a), (b) 所示. 另外, 我们采用第一原理和赝势法, 初步计算了 Sn 原子次近邻的 AlGa 原子分布对 Sn 原子位置的影响. 计算结果表明, 不同的 AlGa 原子分布, 导致 Sn 原子晶格弛豫范围约为键长的 3%—20%. 当次近邻的 Al 原子集中地分布在 Sn 原子某一近邻 As 原子附近时, Sn 原子的弛豫位移离 Al 原子较远; 当次近邻的 Al 原子较均匀地分布在近邻 As 原子附近时, Sn 原子的弛豫位移离 Al 原子较近. 由于弛豫位移越大所对应电子的俘获势垒越高<sup>[9]</sup>, 可见 Sn 原子不同的次近邻 AlGa 分布是引起 DX 中心电子热俘获势垒精细结构的一个重要原因.

## 4 结 论

我们已采用定电容电压法, 测量了 Sn 相关 DX 中心上的电子热俘获瞬态, 以及不同俘获时间后的电子热发射瞬态; 并对瞬态数据进行数值 Laplace 变换, 得到其 LDS 谱. 通过分析 LDS 谱, 确定了相同温度下电子热俘获和发射 LDS 谱中谱峰的时间常数依次由长到短——对应, 从而得到热俘获系数对温度依赖关系以及 Sn 相关 DX 中心部分电子俘获势垒的精细结构. 通过第一原理和赝势法计算表明, Sn 原子不同的次近邻 AlGa 分布是引起 DX 中心电子热俘获势垒精细结构的一个重要原因.

- [1] Huang Q and Hong P 1988 *Kexue Tongbao* **33** 1857  
 [2] Zhang W, Huang Q and Kang J 1990 *Chinese. phys. Lett.* **7** 129  
 [3] Sah C T, Rosier L L and Tasch A F 1970 *Solid State Electron* **13** 759  
 [4] Dobaczewski L and Kaczor P 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 2508  
 [5] Zhan J, Kang J, Wu Z and Huang Q 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 2497

- [6] Kang J, Zhan H and Huang Q 2000 *J. Crystal Growth* **210** 247  
 [7] Zhan H H, Kang J Y and Huang Q S 1998 *Chin. Phys. Lett.* **15** 60  
 [8] Kubo R and Toyozawa Y 1955 *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **13** 160  
 [9] Chadi D J 1992 *Phys. Rev.* **B46** 6777

## Fine structures of electron capture barriers of the DX centers in Sn-doped AlGaAs<sup>\*</sup>

Xiao Xi-Feng Kang Jun-Yong

(Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

(Received 12 January 2001; revised manuscript received 27 June 2001)

### ABSTRACT

Voltage transients due to the thermal electron capture and emission of DX centers in n-type Sn-doped  $\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74}\text{As}$  were measured by the constant capacitance technique and transformed by Laplace defect spectroscopy (LDS). By analyzing the variations of discrete emission rates with different capture periods, corresponding relations between discrete capture and emission rates and capture coefficients were determined. The fine structures of electron capture barriers of the Sn-related DX centers were obtained by linear fitting the data of temperature-dependences of the capture coefficients. The results calculated by using the first principle pseudopotential method show that the fine structures of the capture barriers mainly contribute to Al Ga at different local configurations near Sn atoms due to the alloy random effect.

**Keywords:** Laplace Defect Spectroscopy (LDS), Capture Barriers, DX centers, AlGaAs Sn

**PACC:** 7155, 0230, 0750

---

<sup>\*</sup>Project supported in part by 863 program (Grant No. 715-010-0022), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 69976023), Natural Science Foundation of Fujian Province (Grant No. A0020001), and the grant of Ministry of Education of China.