

UNIVERSIDAD DE GRANADA

T
13
122

FACULTAD DE CIENCIAS



UNIVERSIDAD DE GRANADA
Facultad de Ciencias
Fecha 23-3-95
ENTRADA NUM. 845

Departamento de Electrónica
y Tecnología de Computadores

ANÁLISIS EXPERIMENTAL
Y MODELIZACION POR EL
MÉTODO DE MONTE CARLO
DE LA CAPTURA TÉRMICA DE
ELECTRONES POR IMPERFECCIONES
EN SEMICONDUCTORES

TESIS DOCTORAL

BIBLIOTECA UNIVERSITARIA
GRANADA
Nº Documento 619857249
Nº Copia 12120363x

Alberto J. Palma López

1995

UNIVERSIDAD DE GRANADA
17 MAR. 1995
COMISION DE DOCTORADO



Departamento de Electrónica y
Tecnología de Computadores
Facultad de Ciencias
Universidad de Granada
18071 GRANADA, Spain

Tfno: 34-(9)58-243227
34-(9)58-243230
Fax: 34-(9)58-243230
E-mail: com@gcd.ugr.es

D. Juan Antonio Jiménez Tejada, Profesor Titular del
Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la
Universidad de Granada,

CERTIFICA:

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente
Memoria titulada *Análisis experimental y modelización por el Método de
Monte Carlo de la captura térmica de electrones por imperfecciones en
semiconductores*, y presentada por D. Alberto J. Palma López para optar
al grado de Doctor en Ciencias Físicas, ha sido realizado en su totalidad
bajo su dirección en el Departamento de Electrónica y Tecnología de
Computadores de la Universidad de Granada.

Granada, 10 de Marzo de 1995

Fdo. Juan Antonio Jiménez Tejada
Profesor del Departamento de Electrónica
Universidad de Granada

A Inmaculada


Alberto J. Palme López

AGRADECIMIENTOS.

Desearía expresar mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que directa o indirectamente han contribuido a la realización de este trabajo:

A mi director, D. Juan Antonio Jiménez Tejada, por su dedicación, apoyo y apreciable ayuda durante la realización de este trabajo de investigación. Sus acertados consejos e ideas han servido para dirigir de manera precisa nuestra labor.

A D. Pedro Cartujo Estébanez, Catedrático de Electrónica y Director del Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada, por su inestimable apoyo y por haber puesto a mi disposición todos los medios materiales necesarios para la realización de esta Tesis.

De forma muy especial a D. Juan E. Carceller Beltran y D. Juan Antonio López Villanueva, profesores del Departamento, que por su constante asesoramiento en todos los aspectos de la Física y en particular en los que atañen a este trabajo me han permitido clarificar mis ideas durante todos estos años.

A D. Jesús Banqueri Ozález y D. Francisco J. Gámiz Pérez, por su continua ayuda tanto en el terreno científico como especialmente en el personal, sin cuya colaboración este trabajo habría resultado más difícil.

Debo expresar mi agradecimiento al resto de componentes del Grupo de investigación de caracterización de dispositivos electrónicos: D. Ignacio Melchor Ferrer, D. Yassir Ghailan, D. Andrés Godoy Medina, D. Juan B. Roldán Pérez y D. Salvador Rodríguez Bolívar por su colaboración. A todos los compañeros del Departamento.

A mis padres y hermanos que han confiado en mí durante todos estos años.

Finalmente a Inmaculada, mi mujer, por su continuado apoyo, por su ayuda y comprensión en los momentos difíciles y, por el entusiasmo mostrado durante este tiempo.

INDICE.

<i>Introducción.</i>	1
<i>Capítulo I. Mecanismos de captura térmica por emisión de fonones</i>	7
<i>1.1. Introducción.</i>	7
<i>1.2. Mecanismo de captura por cascada.</i>	11
<i>1.3. Mecanismo de captura por emisión multifonón.</i>	16
<i>1.3.1. Acoplamiento electrón-red.</i>	16
<i>1.3.1.1. El diagrama de configuración coordinado.</i>	22
<i>1.3.2. Cálculo cuántico de la probabilidad de emisión multifonón.</i>	24
<i>1.3.2.1. Aproximación adiabática.</i>	24
<i>1.3.2.2. Aproximación estática.</i>	27
<i>1.3.2.3. Cálculo de los elementos de matriz.</i>	30
<i>1.3.2.4. Parámetros característicos.</i>	41
<i>1.4. Modelo de captura en dos etapas.</i>	42
<i>1.5. Clasificación de defectos según el mecanismo de captura.</i>	45
<i>Capítulo II. Simulación de la captura térmica por emisión de fonones por el Método de Monte Carlo.</i>	47
<i>II.1. Introducción.</i>	47

II.2. Método de Monte Carlo.	50
II.2.1. Fundamentos del método.	50
II.2.2. Definición del sistema físico.	52
II.2.3. Condiciones iniciales.	52
II.2.4. El vuelo libre.	53
II.2.5. Elección del mecanismo de dispersión.	54
II.2.6. Elección del estado siguiente.	55
II.2.7. Obtención de las propiedades de transporte.	57
II.3. Mecanismos inelásticos de dispersión por fonones.	58
II.4. Simulación del proceso de cascada.	59
II.4.1. Procedimiento numérico.	59
II.4.2. Comportamiento de la sección eficaz de captura con la concentración de impurezas.	67
II.4.3. Influencia de las transiciones no acústicas.	71
II.4.4. Comparación con los resultados experimentales.	72
II.4.5. Estadística de la captura por cascada.	74
II.4.5.1. Constante de tiempo rápida, τ_r .	77
II.4.5.2. Constante de tiempo lenta, τ_l .	80
II.5. Simulación del mecanismo de emisión multifonón.	85
II.5.1. Procedimiento numérico.	85
II.5.2. Hipótesis sobre los parámetros característicos.	87
II.5.3. Comportamiento de la probabilidad de captura.	91
II.5.4. Estadística de la captura por emisión multifonón.	95
II.5.5. Comparación con los resultados experimentales en Si.	96
II.5.6. Comparación con los resultados experimentales en GaAs.	105
II.5.6.1. Captura por metales de transición.	106
II.5.6.2. Captura por los defectos EL2 y EL3.	109
II.5.7. Interpretación de la dependencia térmica de las medidas experimentales de la sección eficaz de captura.	114
II.5.7.1. Rango de validez térmico de la probabilidad.	115
II.5.7.2. Comportamiento térmico de la probabilidad y de la sección eficaz.	119
II.6. Simulación de la captura en dos etapas.	123

II.6.1. Procedimiento numérico.	123
II.6.2. Comparación con los datos experimentales.	129
II.7. Relación entre el factor de Huang-Rhys (S) y profundidad energética del nivel (E_T).	136
II.7.1. Relación S/E_T para defectos en Si.	139
II.7.2. Relación S/E_T para defectos en GaAs.	144
Capítulo III. Técnicas capacitivas de medida directa de la sección eficaz de captura térmica.	147
III.1. Introducción.	147
III.2. Evolución temporal del estado de carga de centros.	151
III.2.1. Centros bipolares.	151
III.2.1.1. Centro aceptador.	152
III.2.1.2. Centro donador.	157
III.2.1.3. Evolución de la población de los centros en una unión p^+n con dos niveles.	158
III.2.2. Centro tripolar.	161
III.3. Capacidad en alta frecuencia de una unión p^+n .	165
III.4. Técnicas de medida directa de la sección eficaz de captura térmica.	169
III.4.1. Técnica de espectroscopía de transitorios de centros profundos (DLTS).	170
III.4.2. Técnica experimental de cortocircuito de la unión.	172
Capítulo IV. Técnica combinada numérico-experimental de cálculo directo de la sección eficaz de captura térmica.	179
IV.1. Introducción.	179
IV.2. Simulación numérica.	182
IV.2.1. Resolución numérica del comportamiento eléctrico de una unión pn con centros profundos.	182
IV.2.2. Algoritmo de simulación numérica de los transitorios isoterms de capacidad experimentales durante la captura.	187

IV.3. Comparación con la técnica tradicional de cortocircuito de la unión.	192
IV.3.1. Error por las expresiones analíticas aproximadas.	193
IV.3.2. Error al despreciar la forma del pulso de captura.	199
IV.3.3. Influencia de la concentración relativa de impurezas profundas/básicas.	201
IV.3.3.1. Condiciones estáticas.	203
IV.3.3.2. Condiciones transitorias.	205
IV.4. Sensibilidad de la técnica combinada numérico-experimental.	211
IV.4.1. Sensibilidad con la concentración de impurezas profundas.	212
IV.4.2. Sensibilidad con la sección eficaz de captura térmica.	214
Capítulo V. Aplicación al sistema Si:Pt.	217
V.1. Introducción.	217
V.2. Montaje y procedimiento experimental.	218
V.3. Proceso tecnológico de fabricación de las muestras.	221
V.4. Resultados.	223
V.4.1. Obtención de la sección eficaz de captura térmica de electrones del nivel aceptador, σ_{nA} .	224
V.4.2. Obtención de la sección eficaz de captura térmica de huecos del nivel donador, σ_{pD} .	228
V.4.3. Obtención del perfil de impurezas profundas.	232
V.4.4. Discusión de los resultados: Comparación con valores de otros autores.	235
Conclusiones.	239
Apéndice A. Mecanismos de dispersión inelásticos introducidos en la simulación por el método de Monte Carlo.	247
Apéndice B. Parámetros físicos de la banda de conducción de las redes de Si y GaAs introducidos en la simulación por el método de Monte Carlo.	253

<i>Apéndice C. Resolución de la evolución del estado de carga de un centro tripolar.</i>	257
<i>Bibliografía.</i>	263

INTRODUCCIÓN.

Hasta hace pocos años, el fenómeno de captura por parte de defectos de la red quedaba fuera de las simulaciones de la evolución de los portadores de carga en un semiconductor. El análisis de este proceso ha cobrado de nuevo interés [Reggiani et al., 1989, 1991] [Buchanan et al., 1990] [Palma et al., 1995] dados los problemas que acarrearán en el funcionamiento de los transistores de efecto de campo. Además, debido a la creciente miniaturización de los dispositivos, el estudio de la fiabilidad de las denominadas nanoestructuras no puede entenderse sin tener en cuenta los efectos de la captura y emisión de portadores por parte de los centros que contienen.

Por esta razón nos planteamos en este trabajo la inclusión de los distintos procesos de captura térmica dentro de un algoritmo de simulación [Palma et al., 1995]. Se eligió el método de Monte Carlo pues actualmente es uno de los métodos más utilizados y que proporciona mejores resultados en el estudio del transporte de portadores en los materiales semiconductores [Jacoboni y Reggiani, 1983]. Dentro de los posibles mecanismos de captura los que son más importantes a las temperaturas y concentraciones de portadores de interés, y sobre los que hemos centrado este trabajo, son los mecanismos de captura térmica por emisión de fonones: el proceso de cascada [Lax, 1960] [Abakumov et al., 1978] y el mecanismo de emisión multifonón [Henry y Lang, 1977]

[Ridley, 1978a,b, 1980, 1993] [Stoneham, 1975, 1979, 1981] [Pässler, 1978, 1980] [Morante et al., 1982a,b]. Hasta ahora, estos procesos habían sido estudiados teóricamente con relativo éxito para explicar la captura por parte de impurezas atractivas poco profundas y de impurezas profundas respectivamente.

Para poder adaptar estos estudios teóricos al marco de la simulación por Monte Carlo hemos comenzado con un análisis riguroso de los mecanismos de captura. En él se han sopesado las dificultades con las que nos encontramos para realizar este paso y se muestra cómo se han solucionado. Para los distintos mecanismos de captura los problemas que hemos tenido que abordar han sido diferentes. Así, el proceso de cascada, que hasta ahora se estudiaba desde un punto de vista clásico como un fenómeno puramente local, ha sido incluido mediante la consideración de una energía efectiva que tiene en cuenta la perturbación creada por una impureza coulombiana. Esta simulación semiclásica se ha realizado atendiendo exclusivamente a los principios energéticos básicos dados por la física del problema.

En cuanto al mecanismo de captura por emisión multifonón, se ha incluido a través de su probabilidad, como un mecanismo más de dispersión de la red semiconductor. Para ello, se han calculado las expresiones de la probabilidad para electrones con energía nula y con energía hasta 0.3 eV de acuerdo con modelos generales y simples de los elementos que intervienen en el proceso.

También se han combinado ambos mecanismos de captura en la simulación del transporte del electrones en silicio con impurezas atractivas profundas. Como se ha demostrado [Grimmeiss y Skarstam, 1981] [Armelles et al., 1985], estos centros presentan estados excitados próximos a la banda que participan en la captura de portadores de esa banda. Se trató la captura de portadores por parte de estos centros modificando adecuadamente la probabilidad de emisión multifonón para tener en cuenta

la captura directa tanto desde la banda como desde los estados excitados.

Una vez introducidos estos mecanismos dentro del entorno del transporte de portadores en el semiconductor se hizo necesario verificar y comparar nuestro método con métodos teóricos anteriores y con datos experimentales. La magnitud que nos permitió lograr este objetivo fue la sección eficaz de captura térmica (SECT).

Dicha magnitud se extrae de la simulación a partir de la velocidad media del portador y el tiempo que tarda en ser atrapado. Magnitudes, estas dos últimas, que se obtienen directamente como resultado de nuestro método. La relación entre la SECT con el tiempo en ser atrapado no es directa y se necesitó de un estudio estadístico para poder encontrarla y poder ser comparada con resultados experimentales, especialmente en el caso de captura por cascada.

En el mecanismo de captura multifonón no se hizo necesario tal estudio. En su lugar se analizó con detalle la dependencia de la captura multifonón con un parámetro que caracteriza la relación entre la red y el centro: el factor de Huang-Rhys, S [Huang y Rhys, 1950]. De este estudio se ha desprendido una reflexión sobre cómo interpretar correctamente las medidas experimentales de la sección eficaz de captura y cómo explicar la diferencia entre el comportamiento térmico de esta magnitud en silicio y en arseniuro de galio.

Como se ha mencionado, se hizo uso de datos experimentales con los cuales comprobar nuestros resultados. Sin embargo, como mostraremos, existen muchos casos donde hay gran dispersión en las medidas de SECT de distintos autores. Este hecho supone un inconveniente a la hora de extraer conclusiones precisas de los estudios teóricos y numéricos realizados sobre la captura. Por esta razón, también nos propusimos como objetivo en este estudio realizar un análisis de las técnicas experimentales más

utilizadas. El resultado de este estudio fue desarrollar una técnica propia combinada numérico-experimental de medida directa de la sección eficaz de captura que salvara los inconvenientes que presentan algunas de estas técnicas en determinadas situaciones [Palma et al., 1992, 1993].

Con respecto a este tema es interesante mencionar que el estudio y desarrollo de técnicas de medida directa de la sección eficaz de captura térmica (SECT) de impurezas profundas se encuentra en retroceso desde principios de los años 80. Sin embargo hay algunas cuestiones sobre este asunto aún sin resolver. La arriba mencionada dispersión en los resultados obtenidos por diferentes autores en la medida de SECT refleja este hecho. Los avances realizados en la caracterización de estructuras semiconductoras por simulación numérica, especialmente en condiciones transitorias [López-Villanueva et al., 1990] [Jiménez-Tejada et al., 1992a,b], nos permite abordar la cuestión de la medida directa de SECT de una manera más fiable. Analizamos detalladamente las distintas técnicas experimentales de medida directa de la SECT, para poder encontrar las causas de esa dispersión de valores así como posibles defectos o imprecisiones en dichas técnicas y estudiamos en qué condiciones son válidas.

La ventaja de nuestra técnica es que se introducen en la simulación, junto a las características propias del dispositivo que se está analizando, en concreto una unión pn, todos los detalles experimentales que intervienen en un transitorio de captura. La posterior comparación entre los transitorios experimentales y numéricos permite obtener con gran precisión la sección eficaz de captura para centros profundos. Hemos visto que este método es aplicable a toda clase de uniones, incluso aquellas que presentan varios niveles profundos y perfiles de impurezas poco profundas no abruptas. Este procedimiento no solo proporciona información de la SECT sino que permite obtener el perfil de concentración de la impurezas profundas a lo largo de la unión.

Analizamos la sensibilidad del método tanto al valor de la SECT como al de la concentración de impurezas, e interpretamos transitorios "anómalos" de captura observados en las medidas de muestras con alta concentración de centros profundos. Hemos aplicado esta técnica a uniones pn de silicio impurificadas con platino, obteniendo las SECT de sus niveles profundos y la concentración de impurezas para distintas muestras.

Para los tratamientos numéricos detallados en este trabajo se han desarrollado los programas de ordenador adecuados, realizados en lenguaje de programación FORTRAN 77. Estos programas han sido ejecutados en una estación de trabajo APOLLO HP-720 con una velocidad de procesamiento de 16 MFlops. Los simuladores se han ido optimizando conforme se avanzaba en el trabajo. En las simulaciones por Monte Carlo se simularon más de 10.000 electrones para calcular la SECT para una temperatura y una concentración de defectos. Para los estudios estadísticos la cifra de electrones simulados sobrepasó los 100.000, tardándose días en obtener cada distribución de tiempos de captura. Las simulaciones de los transitorios capacidad durante la captura no presentaron este problema de largos tiempos de ejecución permitiéndonos realizar ajustes rápidos con los transitorios experimentales.

CAPITULO I:

MECANISMOS DE CAPTURA TÉRMICA POR EMISIÓN DE FONONES.

I.1 INTRODUCCIÓN.

La captura mediante emisión de fonones de un portador por parte de una imperfección de la red ha sido tratada extensamente desde los años 50 [Stoneham, 1975] [Pantelides, 1978] [Jaros, 1982] [Morgan, 1983] [Darken, 1992] [Ridley, 1993]. Se han propuesto varios modelos de captura que han ido teniendo mayor o menor éxito en la explicación de los datos experimentales [Lax,1960], [Henry y Lang, 1977], [Gibbs et al.,1977]. Estos modelos se diferencian en que son aplicables según la profundidad del nivel energético creado en la banda prohibida por el centro y según el estado de carga del mismo. En este capítulo nos proponemos revisar las distintas teorías que intentan explicar el proceso de captura asistida por fonones de portadores libres por parte de imperfecciones de la red. Analizaremos los fundamentos de estos modelos y las probabilidades de captura para los distintos mecanismos teniendo como objetivo la

posterior implementación de este proceso dentro del marco de la simulación por el método de Monte Carlo del transporte de electrones en la banda de conducción.

Dada la profusión de trabajo experimental realizado sobre la captura térmica por parte de todo tipo de centros, se hace necesario comentar algunos puntos importantes extraídos como consecuencia de ellos. Clásicamente, las diferencias en el proceso de captura se han venido atribuyendo a dos características del nivel profundo: su estado de carga y la posición en la banda prohibida del nivel energético asociado.

La carga del centro es un factor importante, aunque no decisivo [Stoneham, 1975], en la magnitud y dependencia térmica de la sección eficaz de captura térmica. Si nos fijamos en el carácter atractivo, mientras que para impurezas en silicio (P^+ , As^+ , etc.) la tendencia de dicha magnitud es fuertemente decreciente con la temperatura, en centros en GaAs no se ha observado este comportamiento térmico [Henry y Lang, 1977]. Además, aunque un potencial coulombiano atractivo favorece valores altos de la sección eficaz de captura, centros neutros o con un potencial repulsivo pueden tener valores de la sección eficaz similares a los del caso anterior.

La posición del nivel energético asociado a la impureza dentro de la banda prohibida ha sido la característica tradicional para diferenciar a las impurezas en su comportamiento durante la captura de portadores procedentes de las bandas. En silicio y germanio tenemos por un lado las denominadas impurezas poco profundas con niveles energéticos menores del diez por ciento del ancho de la banda prohibida, producidos por centros que crean un potencial coulombiano atractivo en su entorno. Experimentalmente se observa un fuerte decrecimiento de la sección eficaz de captura con la temperatura para este tipo de impurezas [Norton et al., 1973] [Sacks y Nordbryhn, 1979] [Rosencher et al., 1984]. Sin embargo, se obtiene una dependencia análoga para niveles profundos atractivos creados por los átomos del grupo del azufre (S, Se y Te) en silicio. Por lo tanto, no

parece que sea decisiva la profundidad del nivel que crea una impureza a la hora de distinguir mecanismos de captura.

Posteriormente al análisis de los resultados experimentales se propusieron dos mecanismos para explicar la captura térmica de portadores de las bandas por parte de impurezas mediante la emisión de fonones. Aunque ambos mecanismos son claramente distintos, no son incompatibles en un mismo proceso de captura. Estos mecanismos son el proceso de cascada y la emisión multifonón, cuya principal diferencia estriba en el número de fonones implicados en las transiciones entre estados.

El proceso de cascada, propuesto por Lax en 1960 [Lax, 1960], surgió para explicar las enormes secciones eficaces de captura (10^{-12} - 10^{-15} cm²) de centros poco profundos en germanio y silicio. Se intentaba reproducir la dependencia térmica obtenida experimentalmente de la forma T^n con $2 < n < 5$, siendo T la temperatura de la muestra. Partiendo de la existencia en la banda prohibida de una serie de estados excitados creados por el potencial coulombiano atractivo producido por este tipo de impurezas, la hipótesis de cascada propone que el portador es capturado por un estado excitado de alta energía del centro y, a continuación, pierde energía por una cascada de transiciones cada una de ellas asistidas por un solo fonón de la red entre los estados excitados de menor energía. Ya que este modelo describe la captura por un pozo coulombiano de largo alcance que posee estados ligados con órbitas muy extendidas en el espacio, es muy utilizado en conexión con la teoría de aceptadores y donadores poco profundos. El modelo también se puede utilizar igualmente con centros profundos cargados, aunque hasta ahora, en estos casos los límites de aplicabilidad no están muy bien definidos. Todo esto se detallará en la siguiente sección, donde se revisará en profundidad el modelo de captura por cascada.

Otra teoría, adaptada inicialmente por Henry y Lang [Henry y Lang, 1977] para explicar el comportamiento de las secciones eficaces de captura térmica de varios centros

en GaAs y GaP, es la de emisión multifonón. En este modelo la transición se realiza mediante la emisión de varios fonones a la vez, y está indicada para aquellas impurezas cuyos niveles energéticos estén alejados de las bandas por una energía mayor que la máxima energía de los fonones de la red y, por tanto, no es aplicable el modelo de cascada. En este caso se explica la captura como paso directo hasta el nivel ligado fundamental. Este mecanismo se analizará en la sección I.3 desde dos aproximaciones. En primer lugar, en el ámbito de la aproximación adiabática, donde se admite que la perturbación que genera la emisión multifonón es precisamente la componente no adiabática del hamiltoniano. Bajo esta aproximación revisaremos la expresión obtenida por Ridley [Ridley, 1978a] para la probabilidad de captura por el mecanismo multifonón de electrones de baja energía. A continuación, desde el marco de la aproximación estática [Pässler, 1980], se comentan los resultados obtenidos sobre este mecanismo de captura. Una comparación entre ambos formalismos la realizó Huang en 1981 [Huang, 1981], quien demostró que ambos planteamientos del problema llevan al mismo resultado. Nosotros utilizaremos el de Ridley como punto de partida para calcular una expresión de la probabilidad de captura en función de la energía del portador en la banda. Esto lo realizamos calculando numéricamente y aproximando mediante una expresión analítica sencilla el elemento de matriz que caracteriza la transición, considerando modelos simples de los estados inicial y final. Conjuntamente con lo anterior introducimos la relación entre la energía y el número de fonones emitidos lo que nos proporciona una expresión de la probabilidad dependiente de la energía del portador en la banda, no obtenida hasta ahora, útil para enmarcarla dentro del formalismo del método de Monte Carlo para el estudio del transporte en semiconductores. En consecuencia, tal y como explicaremos en el capítulo siguiente, podremos tratar el mecanismo de captura por emisión multifonón como un mecanismo de dispersión más, con sus características peculiares, en una red semiconductor.

Aparte de estas dos teorías se ha propuesto el modelo de captura en dos etapas que

cubre aquellos procesos que no se rigen exclusivamente por alguno de los dos mecanismos anteriores [Gibbs et al., 1977]. De hecho, en el caso de centros poco profundos, como ya se ha puesto de manifiesto repetidas veces [Stoneham, 1975] [Jaros, 1982], es imposible llevar al portador al estado fundamental sin una transición multifonón. Esta consideración hace pensar en una acción combinada de ambos mecanismos en un mismo proceso de captura. Esta idea se recoge en el modelo de captura en dos etapas que se estudiará en el apartado I.4.

I.2. MECANISMO DE CAPTURA POR CASCADA.

La captura de portadores por parte de centros atractivos fue considerada primero en conexión con la recombinación de iones positivos y negativos en un gas. La sección eficaz de captura térmica se calculó en base a las siguientes consideraciones: Un ión se considera capturado si está en un estado ligado del pozo coulombiano creado por otro con una energía mayor que la energía térmica $K_B T$, ya que el proceso inverso de disociación térmica es improbable. Este estado se alcanza si el ión se aproxima a una distancia menor que r_T respecto al otro ión y pierde su energía cinética en la colisión con un tercer cuerpo. El radio r_T se calcula de la condición de que la energía potencial de un ión en el campo coulombiano creado por el otro ión sea del orden de $K_B T$:

$$\frac{e^2}{r_T} = K_B T ; \quad r_T = \frac{e^2}{K_B T} \quad (1)$$

donde K_B es la constante de Boltzmann, e la carga del electrón y T la temperatura absoluta.

En base a estas consideraciones, la teoría de captura de portadores en semiconductores por el proceso de cascada, propuesta por Lax en 1960 [Lax, 1960] y ampliamente desarrollada por el grupo de Leningrado [Abakumov et al., 1978], ha tenido cierto éxito explicando las secciones eficaces de captura de centros atractivos. Sobre todo se ha aplicado extensamente en los casos de donadores y aceptadores poco profundos en Si y Ge. Esta teoría considera un defecto cargado con un potencial coulombiano atractivo y un electrón en la banda de conducción aproximándose al defecto. El electrón sólo se captura si existe un mecanismo adecuado para perder energía. Los estados excitados más altos pertenecientes a la serie hidrogenoide del potencial coulombiano prácticamente no ven afectados por la presencia de un término de corto alcance en el potencial de la impureza, lo que predice un resultado común para todos los centros de estas características. Además están tan próximos unos a otros que el portador puede dar un salto a uno de esos estados excitados de la impureza, y moverse entre ellos, con la ayuda de un sólo fonón de la red, por lo que, a efectos prácticos, se puede tratar este conjunto de niveles excitados discretos como un continuo. Como la probabilidad de transiciones con un solo fonón es alta, tales transiciones permiten al portador escapar de la banda. El portador desciende a través de esa serie de estados excitados, perdiendo energía mediante la sucesiva emisión de un sólo fonón hasta que la separación entre los estados excitados sea grande para permitir el salto con un solo fonón. Es improbable por tanto, incluso para impurezas poco profundas, alcanzar con transiciones de un solo fonón el estado fundamental sin que tenga lugar una transición multifonón (en el caso de captura térmica). Sin embargo, al estar el portador atrapado en los estados ligados excitados de la impureza no puede participar en la conducción. Lax argumentaba que si un centro se comporta como una trampa eficiente a una temperatura dada, su energía de ionización debe ser mucho mayor que $K_B T$ para que haya suficientes estados excitados desde los cuales el portador no pueda ser reemitido térmicamente a la banda de la que procedía.

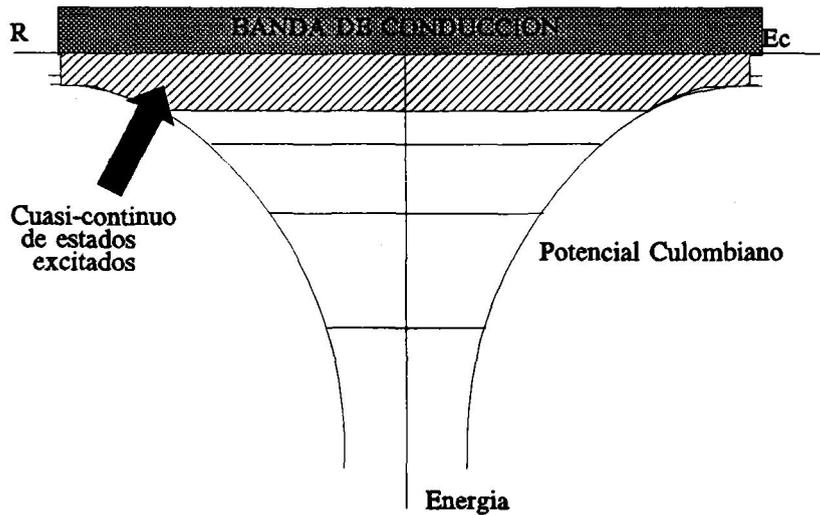


Figura 1.- Esquema energético del modelo de Lax para el proceso de cascada en la captura por un centro culombiano atractivo.

Para tener en cuenta la competencia entre la posibilidad de que el electrón sea realmente capturado o sea reinyectado a la banda mediante absorción de fonones se define la probabilidad de permanencia en los estados excitados o probabilidad de "sticking" $P(U)$. $P(U)$ depende de la probabilidad de que un portador con energía U emita un fonón de una energía requerida. Según esta teoría, la sección eficaz de captura depende de la sección eficaz de la correspondiente colisión $\sigma(E,U)$, donde E es la energía cinética del portador libre entrante, y de la probabilidad de permanecer en los estados excitados por la emisión de un fonón. La integral a todas las energías permitidas del producto de estas dos magnitudes nos da la sección eficaz de captura:

$$\sigma_c = \int_U \sigma(E,U)P(U)dU \quad (2)$$

La sección eficaz de captura total se obtiene promediando sobre la función de distribución de las energías de los portadores en la banda: $\langle \sigma_c(E)v \rangle / \langle v \rangle$ donde v es la velocidad

térmica del portador.

Aunque este método es en principio correcto, el cálculo de $P(U)$ en el rango de temperatura de interés aparenta ser bastante intrincado. Las mayores dificultades y discrepancias que resultan de aplicar esta teoría provienen precisamente del cálculo, muy engorroso a veces, de la probabilidad de "sticking". Abakumov et al. en 1978 [Abakumov et al., 1978] realizaron un examen crítico de la teoría de Lax. Sus estudios mostraron que el principal proceso en el mecanismo de captura es la captura por parte de los estados excitados más altos con energía entre E_c y $E_c - K_B T$ (donde E_c es el mínimo de la banda de conducción). Este resultado lleva a un menor decrecimiento de la sección eficaz de captura σ_c al incrementarse la temperatura que el calculado por Lax. Los resultados de Abakumov et al. se resumen en una fórmula de interpolación que se adecua mejor a las medidas experimentales y que une los límites de altas y bajas temperaturas:

$$\sigma_c = \frac{4\pi e^2 Z}{3l_0 \epsilon K_B T} \left[\frac{e^2 Z}{\epsilon (K_B T + 2.74 ms^2)} \right]^2 \quad (3)$$

donde ϵ es la constante dieléctrica, m es la masa efectiva del portador en la banda, s la velocidad del sonido, Z la carga de la impureza y la longitud $l_0 = v\tau$ donde τ es el tiempo de relajación del portador. Por tanto si $K_B T \ll ms^2$ σ_c se comporta como T^{-1} y si $K_B T \gg ms^2$ σ_c varía como T^{-3} , como indican las medidas experimentales.

Según su modelo, Lax también consideró la captura de centros neutros [Lax, 1960]. Sin embargo, se ha argumentado que en este caso, por razones físicas, no existe un potencial creado por la impureza que produzca una serie de estados excitados próximos entre sí que permitan aplicar el modelo de cascada. De hecho, el esquema computacional elegido para demostrar este punto llegó a la conclusión de que los centros neutros no producían ningún estado excitado. Aunque esta última afirmación no está muy clara [Jaros y Brand, 1976], de lo que no hay duda es que si no existe un potencial

culombiano la separación de los estados excitados es demasiado grande y el número de estados disponibles demasiado pequeño para aplicar el modelo de cascada. En el caso de centros neutros no hay evidencia experimental de la existencia de esos estados excitados próximos entre sí, con lo que la aplicación de esta teoría a ese caso no parece realista.

Algunas cuestiones de principio aún no están muy claras acerca de este modelo. A continuación analizaremos algunas de ellas para en el capítulo siguiente dar respuesta a estas cuestiones.

Es importante, a la hora del cálculo de la probabilidad de "sticking", decidir qué estados excitados son los que tienen más peso a la hora de la captura. Mientras que algunos autores argumentan que los estados excitados altos con energía de ionización menor que $K_B T$ no son importantes [Ascarelli y Rodriguez 1961] [Brown y Rodriguez 1967], ya que, según estos trabajos, un portador capturado en esos estados se reemite rápidamente a la banda, por otro lado, autores como Lax y Abakumov y colaboradores afirman que son precisamente esos estados excitados con bajas energías de ionización los que más influencia tienen en el proceso de captura.

Otra cuestión todavía no aclarada es qué fonones intervienen en este proceso. La posibilidad de que fonones ópticos de energía $\hbar\omega_o$ contribuyan al proceso de captura ha sido tratada por Lax. Sus trabajos muestran que la contribución óptica puede incluso dominar. El resultado puede ser expresado en términos del parámetro de Herring, que mide el cuadrado de la razón de los elementos de matriz óptico y acústico:

$$w = \frac{v_s^2 D_o^2 \hbar^2}{\Xi^2 \epsilon_o^2} \quad (4)$$

siendo v_s la velocidad del sonido en el medio, D_o la constante de acoplamiento del fonón óptico considerado, \hbar la constante de Planck, Ξ parámetro de desplazamiento acústico y

ϵ_0 , la constante dieléctrica. Lax observa que usualmente w es mayor o igual a 1. En el caso del silicio los fonones longitudinales ópticos serían los dominantes.

Por el contrario, Abakumov et al. indican que en el caso de centros en Si la aportación al fenómeno de captura por cascada de fonones no acústicos es poco importante incluso a temperaturas altas. En este trabajo veremos que esto no es así y que es necesario tenerlos en cuenta para reproducir los datos experimentales.

En el siguiente capítulo expondremos el procedimiento por el cual se introduce este mecanismo de cascada en la simulación del transporte de portadores por el método de Monte Carlo. Este procedimiento, inicialmente desarrollado por Reggiani et al. [Reggiani et al., 1989, 1991], ha sido mejorado y ampliado con este trabajo. Con él, mediante la consideración de la energía potencial coulombiana como un término más en la dinámica del portador, y teniendo en cuenta la participación de estados ligados excitados con energías correspondientes a la banda prohibida, hemos podido analizar en profundidad la captura por este mecanismo, respondiendo a algunas de las cuestiones planteadas en este apartado y obteniendo algunos resultados interesantes.

I.3. MECANISMO DE CAPTURA POR EMISIÓN MULTIFONÓN.

I.3.1. Acoplamiento electrón-red.

Cuando la pérdida de energía del portador al ser capturado sobrepasa ampliamente la energía del fonón de la red más energético, se hace imprescindible el proceso de emisión de varios fonones simultáneamente. Este caso se presenta cuando se trata de una

transición de un portador hacia el estado fundamental procedente de la banda o de un estado excitado de una impureza. Parece ser que el primer caso ocurre en impurezas neutras, debido a la falta de estados excitados, mientras que la segunda transición es más probable para centros cargados, tanto profundos como poco profundos. Pasemos, por tanto a hacer un breve recorrido por las bases físicas del fenómeno.

Dentro de la aproximación adiabática, el hamiltoniano que describe nuestro cristal contiene una serie de términos que iremos comentando por separado:

$$H = H_e + H_L + H_{ep} \quad (5)$$

donde H_e corresponde a la parte puramente electrónica, H_L expresa el potencial de los núcleos en términos de osciladores armónicos y H_{ep} es la energía de interacción electrón-fonón.

La ecuación de Schrödinger monoeléctronica incluyendo la parte electrónica y la interacción electrón-red es:

$$-(H_e + H_{ep})\phi_k(r) = E_k\phi_k(r) \quad (6)$$

Los desplazamientos de la red se pueden expresar en términos de las coordenadas normales adimensionales Q_i , donde

$$Q_i = \left(\frac{M\omega_i}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} X_i \quad (7)$$

X_i es la coordenada normal para el i -ésimo modo de vibración, ω_i es su frecuencia angular, y M es la masa de la celda unidad para las vibraciones acústicas o la masa reducida para las ópticas. Como es habitual, asumimos que la interacción electrón-red es lineal en Q_i :

$$H_{ep} = \sum_i V_i(\mathbf{r}) Q_i = \mathbf{V} \mathbf{Q} \quad (8)$$

donde \mathbf{V} es el vector energía de interacción.

Por simplicidad, y para una mejor comprensión de los parámetros que aparecerán en la probabilidad de emisión multifonón, consideremos las transiciones inducidas por el término H_{ep} entre dos estados de la banda de conducción 1 y 2 tratadas por la teoría de perturbaciones estacionarias. Para obtener una corrección de primer orden a la energía necesitamos sólo las funciones de onda de orden cero:

$$\begin{aligned} \phi_1(\mathbf{r}) &\approx \phi_{10}(\mathbf{r}), & E_1 &= E_{11} = E_{10} + H_{11} \\ \phi_2(\mathbf{r}) &\approx \phi_{20}(\mathbf{r}), & E_2 &= E_{21} = E_{20} + H_{22} \end{aligned} \quad (9)$$

donde E_{ij} indica la energía del nivel i en orden j de perturbación, y

$$H_{ii} = \langle i | \mathbf{V} | i \rangle \mathbf{Q} = \mathbf{V}_{ii} \mathbf{Q} \quad i = 1, 2 \quad (10)$$

donde $|i\rangle$ se refiere a los estados sin perturbar, ϕ_{10} y ϕ_{20} . Para obtener la perturbación en las funciones de onda debemos aplicar la teoría de perturbaciones en segundo orden, por lo tanto,

$$\begin{aligned} \phi_1(\mathbf{r}) &= \phi_{10}(\mathbf{r}) + \frac{H_{12}}{E_{10} - E_{20}} \phi_{20}(\mathbf{r}) \\ E_1 &= E_{12} = E_{11} + \frac{H_{12}^2}{E_{10} - E_{20}} \end{aligned} \quad (11)$$

donde

$$H_{12} = \langle 2 | \mathbf{V} | 1 \rangle \mathbf{Q} = \mathbf{V}_{12} \mathbf{Q} \quad (12)$$

y análogamente para el nivel 2 se pueden obtener unas expresiones para $\phi_2(\mathbf{r})$ y E_2 .

Llevando este procedimiento hasta orden infinito se puede obtener para la función de onda [Kovarskii, 1962]:

$$\begin{aligned}\phi_1(r) &= \frac{\phi_{10}(r) + [H_{12}/(E_1 - E_{21})]\phi_{20}(r)}{[1 + H_{12}^2/(E_1 - E_{21})^2]^{1/2}} \\ \phi_2(r) &= \frac{\phi_{20}(r) + [H_{21}/(E_2 - E_{11})]\phi_{10}(r)}{[1 + H_{21}^2/(E_2 - E_{11})^2]^{1/2}}\end{aligned}\quad (13)$$

y para la energía:

$$\begin{aligned}E_1 &= E_{11} + \frac{H_{12}^2}{E_1 - E_{21}} \\ E_2 &= E_{22} + \frac{H_{21}^2}{E_2 - E_{11}}\end{aligned}\quad (14)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}E_1 &= \frac{1}{2}[E_{21} + E_{11} \pm [(E_{21} - E_{11})^2 + 4H_{12}^2]^{1/2}] \\ E_2 &= \frac{1}{2}[E_{11} + E_{21} \pm [(E_{11} - E_{21})^2 + 4H_{21}^2]^{1/2}]\end{aligned}\quad (15)$$

La ecuación (15) indica un cruce de los niveles E_1 y E_2 cuando $E_{11} = E_{21}$. Excepto cerca de este cruce E_1 y E_2 varían linealmente con Q dado que la energía de transición H_{12} es pequeña. Estos desplazamientos en energías vienen determinados por las energías de interacción H_{11} y H_{22} respectivamente. Estos desplazamientos, naturalmente, inciden en la dinámica de la red.

Visto como actúa el término del potencial de interacción electrón-fonón, analicemos ahora la componente de hamiltoniano asociado a la red. En términos de las

coordenadas normales adimensionales el hamiltoniano de la red es:

$$H_L = \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{p_i^2}{M} + \hbar \omega_i Q_i^2 \right). \quad (16)$$

con lo que ecuación adiabática completa de Schrödinger monoeléctronica para el electrón en el nivel 1 es:

$$\left[\sum_i \left(\frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \hbar \omega_i Q_i^2 \right) + E_1 \right] \Phi = E_{tot} \Phi \quad (17)$$

donde E_1 es la energía del electrón en el nivel 1, Φ son las funciones de onda de oscilador armónico, y E_{tot} es la energía total del sistema, vibracional más electrónica. Como hemos visto E_1 es una función de Q a través de la interacción electrón-red. Sustituyendo E_1 por la ecuación (14) tenemos:

$$\left[\sum_i \left(\frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \hbar \omega_i Q_i^2 \right) + E_{10} + H_{11} + \frac{H_{12}^2}{E_1 - E_{12}} \right] \Phi = E_{tot} \Phi \quad (18)$$

Ahora, $H_{11} = V_{11} \cdot Q = \sum_i V_{11i} Q_i = \sum_i H_{11i}$, y $H_{12} = \sum_i V_{12i} Q_i = \sum_i H_{12i}$. El término en H_{12}^2 introduce un desplazamiento en la frecuencia al depender de Q_i^2 . Si $H_{12i}/H_{12} \ll \hbar \omega_i$ este desplazamiento es despreciable. Sólo si la interacción es fuerte para unos pocos modos, por ejemplo, modos locales, esta conclusión es cuestionable. El término lineal H_{11i} introduce un desplazamiento del oscilador. En función de estos osciladores desplazados la ecuación se convierte en:

$$\sum_i \left(\frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \hbar \omega_i (Q_i - Q_{i1})^2 \right) \Phi = \left(E_{tot} - E_{10} + \frac{1}{2} \sum_i \frac{|V_{11i}|^2}{\hbar \omega_i} \right) \Phi \quad (19)$$

donde

$$Q_{i1} = -\frac{V_{11i}}{\hbar\omega_i} \quad (20)$$

Q_{i1} es el desplazamiento para el modo i cuando el electrón está en el nivel 1. Cuando está en el nivel 2 tenemos un desplazamiento Q_{i2} con una expresión análoga a (20).

Una cantidad importante es la energía vibracional asociada con el desplazamiento de Q_{i1} a Q_{i2} , ya que esta energía será puesta en juego siempre que el electrón realice una transición del nivel 1 al 2 o viceversa. Esta cantidad es llamada energía de desplazamiento Franck-Condon o corrimiento de Stokes, y viene dada por:

$$E_{FC} = \sum_i \frac{1}{2} \hbar\omega_i (Q_{i2} - Q_{i1})^2. \quad (21)$$

Cuando todos los modos tienen la misma frecuencia es útil expresar esta energía en términos del número de fonones implicados:

$$E_{FC} = S\hbar\omega \quad S = \frac{1}{2} \sum_i (Q_{i2} - Q_{i1})^2. \quad (22)$$

El factor S fue introducido por primera vez por Huang y Rhys en 1950 [Huang y Rhys, 1950].

En resumen, el principal efecto del acoplo electrón-red es el desplazamiento de todos los osciladores de la red e introducir desplazamientos en las energías de los niveles electrónicos. Con una interacción lineal en la coordenada de la red, estos desplazamientos son también lineales (excepto cerca del cruce $E_1 = E_2$). Este estudio es extensible a cualquier número de niveles.

I.3.1.1. El diagrama de configuración coordinado.

Una herramienta útil para visualizar las soluciones de la ecuación (19) es suponer la energía del sistema como dependiente sólo de una coordenada normal Q conocida como coordenada de configuración. La correspondencia con la realidad de esta suposición depende de cuantos modos contribuyen a la energía total. En el caso de un centro con un modo local fuertemente acoplado una sola coordenada puede ser una aproximación razonable.

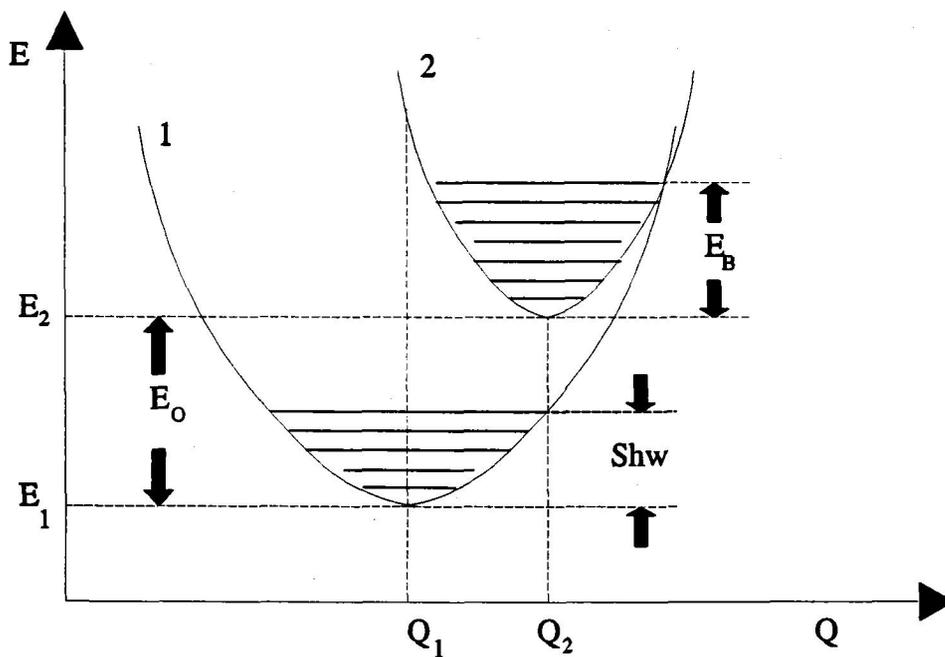


Figura 2.- Diagrama de configuración coordinado.

Si llamamos estado fundamental al nivel de menor energía y excitado al de mayor, y $E_1 < E_2$, con esta aproximación las energías de estos estados son:

$$E_{fun} = E_1 + \frac{1}{2} \hbar \omega (Q - Q_1)^2$$

$$E_{exc} = E_2 + \frac{1}{2} \hbar \omega (Q - Q_2)^2$$
(23)

donde se ha eliminado el subíndice "i" al considerar un solo modo y se ha asumido que la frecuencia permanece inalterada y que la interacción en el cruce es despreciable. Las diferencias de energía en Q_1 y Q_2 son

$$(E_{exc} - E_{fun})_{Q=Q_1} = E_0 + S \hbar \omega$$

$$(E_{exc} - E_{fun})_{Q=Q_2} = E_0 - S \hbar \omega$$
(24)

donde E_0 es la diferencia de energía entre los estados que tiene en cuenta la energía de interacción electrón-fonón así como la parte puramente electrónica. En la figura 2 se muestra el diagrama de configuración que recoge este modelo.

Según este diagrama, cualquier transición térmica debe ocurrir horizontalmente para que se cumpla el principio de conservación de la energía. Estas transiciones encierran cambios no sólo del estado electrónico sino también del estado vibracional. Como se ha visto, la probabilidad de transición está relacionada con el cuadrado de la integral de los estados final e inicial. Esta integral será particularmente grande para aquel valor de la coordenada de configuración en el que, a energía constante, los puntos de máxima amplitud de las funciones de onda de los estados vibracionales inicial y final coinciden. Esto ocurre en la zona del espacio de configuración donde las superficies de energía están muy próximas o se cruzan.

Si el portador, en el estado electrónico excitado, está en la vecindad del punto de cruce de la figura 2, la probabilidad de una transición térmica será muy alta, para ello será necesario adquirir la energía de barrera E_B . De no alcanzarse este valor de la energía

la única posibilidad de transición es mediante efecto túnel.

Las transiciones verticales en el diagrama corresponden a los procesos de absorción o emisión de un fotón. Obsérvese que $S\hbar\omega$ también indica el reajuste de la energía de la red al producirse una transición de absorción óptica. La diferencia energética entre las transiciones de absorción y de emisión ópticas es precisamente lo que habíamos denominado desplazamiento de Franck-Condon, siendo este el método experimental usual para medirlo.

I.3.2. Cálculo cuántico de la probabilidad de emisión multifonón.

I.3.2.1. Aproximación adiabática.

Dentro de la aproximación adiabática analizada hasta ahora, la interacción electrón-fonón induce dispersión de portadores entre estados y, como se ha visto, introduce desplazamientos de los osciladores de la red, pero no puede ser la responsable de la emisión multifonón debido a que todos sus efectos ya se han tenido en cuenta. La responsable de que haya transiciones con la emisión de varios fonones, es decir, transiciones multifonón es la perturbación introducida por la ruptura de la aproximación adiabática [Huang and Rhys, 1950] [Kubo y Toyazawa, 1955] [Kovarskii, 1962] [Kovarskii y Sinyavskii, 1963]. La componente no adiabática del hamiltoniano es de la forma:

$$H_{NA}\psi(\mathbf{r},\mathbf{R})\Phi(\mathbf{R}) = H_L\psi(\mathbf{r},\mathbf{R})\Phi(\mathbf{R}) - \psi(\mathbf{r},\mathbf{R})H_L\Phi(\mathbf{R}) \quad (25)$$

donde Φ es la función de onda para todos los iones dependiendo de su vector de posición \mathbf{R} y Ψ lo es para todos los electrones dependientes de su posición \mathbf{r} y de las posiciones de los iones en cada instante. H_L es la parte del hamiltoniano debida a la energía cinética iónica

y al potencial interiónico. En términos de la función de onda monoeléctronica φ y de los modos normales desplazados de la red, Q_i , esta perturbación tiene la forma:

$$H_{NA} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{Q}) \phi(\mathbf{Q}) = - \sum_i \hbar \omega_i \left[\frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{Q})}{\partial Q_i} \frac{\partial \phi(\mathbf{Q})}{\partial Q_i} + \frac{\phi(\mathbf{Q})}{2} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{Q})}{\partial Q_i^2} \right] \quad (26)$$

De acuerdo con la regla de oro de Fermi la probabilidad de transición entre dos estados es:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle 1 | H_{NA} | 2 \rangle|^2 \delta(E_2 - E_1) \quad (27)$$

donde la suma se extiende a los estados finales de la transición. El cálculo de esta probabilidad que se realizará a continuación se ha utilizado el formalismo de Ridley [Ridley, 1978a].

La perturbación no adiabática no es nula en virtud de la dependencia en Q de la función de onda electrónica. Esta dependencia es lineal en primera aproximación. Tomando esta dependencia lineal resulta que el último término de la ecuación (26) se anula y causa la desaparición de la dependencia en Q de la parte electrónica del elemento de matriz. Esto constituye la aproximación condoniana, que no es válida para transiciones térmicas donde se requieren vibraciones de gran amplitud. En lugar de una dependencia lineal de $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{Q})$ en Q tomaremos la función de onda de la forma:

$$\varphi_1(\mathbf{r}, \mathbf{Q}) = \varphi_{10}(\mathbf{r}) + \frac{H_{12}}{E_{11} - E_{21}} \varphi_{20}(\mathbf{r}) \quad (28)$$

La dependencia en Q en el numerador es:

$$H_{12} = \langle 2 | V | 1 \rangle_Q \quad (29)$$

y la del denominador

$$E_{21} - E_{11} = E_{20} - E_{10} - \sum_i \hbar\omega_i (Q_{i2} - Q_{i1}) Q_i \quad (30)$$

Tomando el denominador como lineal en Q obtenemos una buena aproximación válida en orden infinito excepto en el punto de cruce.

Para realizar los cálculos es conveniente expresar el denominador de (28) como

$$\frac{1}{E_{21} - E_{11}} = \int_0^{\infty} \text{sen}[(E_{21} - E_{11})y] dy \quad (31)$$

y se continúa el cálculo con el método de la suma de Slater. Este trabajo no tiene como objeto desarrollar todo el laborioso cálculo. Vamos a dar sólo el resultado de la probabilidad de generación térmica para el modelo de una sola frecuencia y desestimando la aproximación condoniana:

$$W = \omega \frac{\pi}{(\hbar\omega)^2} e^{-2S(n+\frac{1}{2})} e^{-\frac{p\hbar\omega}{2K_B T}} R \quad (32)$$

donde S es el factor de Huang-Rhys, n el número de Bose-Einstein, y R es una suma compleja de términos conteniendo funciones de Bessel modificadas. p es el número de fonones emitidos en la transición:

$$p = \frac{E_T - S\hbar\omega}{\hbar\omega} \quad (33)$$

con E_T el nivel energético profundo de la impureza medido mediante técnicas térmicas.

Hay tres factores esenciales que configuran la ecuación (32): la contribución del solapamiento de las funciones de oscilador desplazadas que decrece al incrementarse S , $e^{-2S(n+1/2)}$, el peso térmico de la energía vibracional inicial, $e^{-p\hbar\omega/2KT}$, y la probabilidad de emitir o absorber p fonones, R .

En el límite de bajas temperaturas y acoplamiento débil, es decir, si se cumple que $(p+4)^2 \gg 4S^2n(n+1)$, se obtiene una probabilidad de captura, W^{mph} :

$$W^{mph} = W_0(n+1)^p e^{-2ns} \quad (34)$$

donde se ha considerado que el cociente de degeneraciones de los estados inicial y final es la unidad. Para los centros habituales en silicio y arseniuro de galio (casos que estudiaremos) esta condición se satisface hasta temperaturas mayores que la ambiente. A partir de ahora siempre nos mantendremos bajo este límite, salvo que se indique lo contrario.

En (34) W_0 vale

$$W_0 = \omega \frac{\pi}{(\hbar\omega)^2} \frac{S^{p-1} e^{-S}}{(p-1)!} \left[V_{21}^2 R_0 + |V_{21} \cdot \Delta|^2 \frac{p-1}{S} R_1 \right] \quad (35)$$

En esta ecuación

$$V_{21} = \langle 1 | V | 2 \rangle \quad (36)$$

y las componentes del vector Δ

$$\Delta_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q_2 - Q_1)_i \quad S = \sum_i \Delta_i^2 \quad (37)$$

donde $|1\rangle$ corresponde al estado libre en la banda y $|2\rangle$ al estado ligado.

De acuerdo con los trabajos de Ridley en la expresión (35) se pueden tomar valores constantes para $R_0=0.26$ y $R_1=0.18$, válidos si $S < p$ [Ridley, 1978a].

I.3.2.2. Aproximación estática.

Aunque la aproximación adiabática es muy usada para abordar este problema, no es la única alternativa para resolver la ecuación de valores propios del hamiltoniano. Otro formalismo válido es bajo la aproximación estática estudiada inicialmente por Markham

[Markham, 1956], quien indicó sus posibilidades, y que ha sido utilizada por diversos autores [Howgate, 1969] [Morante et al., 1982a,b] [Goguenheim y Lannoo, 1990]. El hamiltoniano del sistema electrón-impureza puede ser expresado como:

$$H = H_E + H_V + H_{ep} \quad (38)$$

donde H_E es la parte electrónica, H_V la parte vibracional, y H_{ep} corresponde a la interacción electrón-fonón.

Bajo la aproximación estática, el sistema electrónico en un estado b queda descrito por:

$$H_E \Omega_b = E_b \Omega_b \quad (39)$$

y se encuentra sometido a un potencial estático medio

$$V' = \langle \Omega_b | H_{ep} | \Omega_b \rangle \quad (40)$$

definido en el estado $|\Omega_b\rangle$, el cual actúa sobre los modos vibracionales cuyas funciones propias se expresan como

$$(H_V + V') \theta_{bV} = E_{bV} \theta_{bV} \quad (41)$$

Estas igualdades permiten definir el hamiltoniano estático de orden cero cuyas funciones propias Ψ_S son el producto de aquellas definidas en (39) y (41), y los valores propios son la suma de sus correspondientes autovalores,

$$H_S \Psi_S = E_S \Psi_S, \quad \Psi_S = \Omega_b \theta_{bV}, \quad E_S = E_b + E_{bV} \quad (42)$$

La diferencia con el hamiltoniano H es debida al término perturbativo responsable de las transiciones entre los estados electrónicos b y b' , con una probabilidad dada por

$$W_{bb'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{V'} \sum_V P_{bV} |\langle \Omega_{b'} \theta_{b'V'} | H_{ep} - V' | \Omega_b \theta_{bV} \rangle|^2 \delta(E_{b'} + E_{b'V'} - E_b - E_{bV}), \quad (43)$$

donde los sumatorios comprenden todos los estados finales e iniciales, P_{bV} es la probabilidad

de ocupación del estado inicial de los modos vibracionales en el equilibrio termodinámico

$$P_{bv} = \frac{e^{-\frac{E_b}{KT}}}{\sum_{v'} e^{-\frac{E_{b'v'}}{KT}}} \quad (44)$$

H_{ep} corresponde a la interacción lineal electrón-fonón dada en la ecuación 8.

La diferencia conceptual entre las ecuaciones (27) y (43) estriba en que en la aproximación adiabática el electrón lleva una energía cinética adicional para reunirse en la próxima posición del núcleo. En el caso de la aproximación estática, se considera una energía posicional adicional para tener en cuenta esto último.

De acuerdo con el método de cálculo de Kubo [Kubo, 1952] la probabilidad de captura térmica por el mecanismo multifonón a bajas temperaturas

$$S^2(n+1)n \ll p+1 \quad (45)$$

es:

$$W_{b'/b} = \omega \frac{2\pi}{(\hbar\omega)^2} \frac{S^{p-1} e^{-S} Y^2}{(p-1)! S^p \left(1 + \frac{S}{p}\right)^2} (n+1)^p e^{-2nS} \quad (46)$$

donde b indica el estado ligado y b' el estado libre, Y^2 y S (el factor de Huang-Rhys) son los elementos de matriz que dependen del acoplamiento electrón fonón y de las funciones de onda de los estados libre y ligado, y se calculan como

$$Y^2 = \frac{1}{2} S |\langle \Omega_{b'} | H_{ep} | \Omega_b \rangle|^2 \quad (47)$$

$$S = \frac{1}{2(\hbar\omega)^2} |\langle \Omega_{b'} | H_{ep} | \Omega_b \rangle|^2$$

siendo Ω_b la función de onda del estado ligado y $\Omega_{b'}$ la del estado libre.

Aunque en la revisión del proceso de captura por el mecanismo de emisión multifonón que acabamos de realizar aparecen dos tratamientos distintos, el primero partiendo de la aproximación adiabática y fuera del ámbito de la aproximación condoniana, y el segundo desde la perspectiva de la aproximación estática, Huang en 1981 [Huang, 1981] demostró que los elementos de matriz de la transición desde ambas aproximaciones son enteramente equivalentes. Además hemos comprobado que se llega a resultados similares desde ambos formalismos. Para este trabajo elegimos el resultado de Ridley [Ridley, 1978a] para la probabilidad de emisión multifonón, dados sus estudios posteriores sobre la aplicación de esta probabilidad para los distintos tipos de centros [Ridley, 1978b][Ridley, 1980][Ridley y Amato, 1981] [Ridley, 1993].

El paso siguiente a dar es proponer modelos para describir los estados libre y ligado de la partícula y estudiar la forma del potencial de acoplamiento electrón-fonón H_{ep} para utilizarlos en el formalismo de Ridley descrito en la ecuación 34.

I.3.2.3. Cálculo de los elementos de matriz.

Consideremos la transición de un portador desde un estado libre en la banda $|k\rangle$, caracterizado por su vector de onda k a un estado ligado de una imperfección de la red, $|T\rangle$ situado en la banda prohibida a una energía E_T del límite de la banda considerada. Además este nivel vendrá caracterizado por un radio efectivo r_T (que da idea de la localización del estado) y por su estado de carga (repulsivo, neutro o atractivo).

Según la expresión 35 habría que calcular dos elementos de matriz, por un lado el correspondiente al factor de Huang-Rhys, S , y por otro el de la interacción del estado ligado y libre a través del potencial de acoplamiento, V_{21} . Sin embargo, y debido a la falta de una información precisa de la función de onda del estado ligado, el factor S se introduce normalmente como un parámetro obtenido experimentalmente o de ajuste para los

tratamientos teóricos de la captura. Por esta razón, sólo nos propondremos calcular el elemento de matriz V_{21} que venía dado por

$$|V_{21}|^2 = |\langle k|V|T\rangle|^2 \quad (48)$$

Para calcularlo debemos conocer las funciones de onda de estos estados y la forma del potencial de acoplamiento electrón-fonón:

i) La función de onda del estado libre en la banda de conducción tiene una forma muy compleja, por lo que se han venido utilizando múltiples aproximaciones [Ridley, 1978b] [Amato y Ridley, 1980] [Ridley, 1980] [Ridley y Amato, 1981] [Morante et al., 1982a] [Morante et al., 1982b] [Amato, 1992] teniendo todas en común el límite de r pequeño (donde r representa la distancia a la imperfección) debido al alto grado de localización del estado ligado. El modelo más aproximado debe recoger las diferencias dadas por el estado de carga del centro. Nosotros vamos a utilizar el modelo de onda de Coulomb, que cumple estos requisitos, propuesto por Ridley en el estudio de la fotoionización de centros profundos con distinta carga [Ridley, 1980] [Swiatla y Bartczak, 1994]:

$$|k\rangle = \left(\frac{C_o}{V}\right)^{\frac{1}{2}} e^{ikr} \quad (49)$$

donde V es el volumen de normalización, k es el vector de onda del electrón en la banda y C_o es el factor de Sommerfeld que incluye la necesaria dependencia con el estado de carga del centro, dado por

$$C_o = 2\pi \frac{\eta}{e^{2\pi\eta} - 1}, \quad \eta = -Z \left[\frac{R_H^*}{E_k} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (50)$$

con Z la carga del centro, R_H^* la energía efectiva de Bohr del semiconductor y E_k la energía del electrón en la banda. En el caso de centros neutros C_o vale la unidad, reduciéndose la función de onda a una onda plana lo que concuerda con la dispersión débil que plantean estos centros. El modelo de la onda de Coulomb se considera válido para todos los centros neutros

y negativamente cargados si $kr \leq 1$ y para centros atractivos si $E_k \leq E_T$ [Ridley, 1980], siendo E_k la energía del portador libre. La expresión (49) la vamos a aproximar según la energía del electrón en

$$|k\rangle \approx \left(\frac{C_o}{V}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad kr_T \approx 0$$
$$|k\rangle \approx \left(\frac{C_o}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\text{sen}(kr)}{kr}, \quad kr_T \leq 1$$
(51)

Como puede apreciarse en la ecuación (51) para la segunda aproximación no se ha perdido totalmente la dependencia en el estado inicial k en la banda.

ii) Para representar al estado ligado se han venido utilizando distintas funciones de onda [Koster y Slater, 1954a,b]. Este punto es importante ya que según la función de onda escogida obtendremos unos elementos de matriz u otros. A lo largo del desarrollo histórico del estudio del mecanismo de emisión multifonón se han utilizado las siguientes aproximaciones:

- La función de onda gaussiana

$$|T\rangle \propto e^{-\frac{r^2}{a^2}}$$
(52)

que pronto se desechó por no representar adecuadamente al estado ligado, ya que proviene de un potencial $1/r^2$ que no proporciona estados ligados.

- La función de onda hidrogenoide

$$|T\rangle \propto e^{-\frac{r}{a}}$$
(53)

demasiado deslocalizada para aproximar bien un estado profundo.

- La función delta

$$|T\rangle \propto \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{v_T a}} \quad (54)$$

utilizada inicialmente para interpretar los espectros de fotoionización [Luckosky, 1965].

- La función tipo defecto cuántico [Bebb, 1969]

$$|T\rangle \propto r^{\nu_T - 1} e^{-\frac{r}{v_T a}} \quad (55)$$

siendo $a = m\epsilon_{OH}/m^*\epsilon_0$ con m la masa del electrón, m^* su masa efectiva en la banda, ϵ/ϵ_0 es la constante dieléctrica relativa del semiconductor, a_{OH} es el radio de Bohr; $\nu_T^2 = (R_H^*/E_T)$ con R_H^* la energía efectiva de Bohr y E_T la energía del nivel profundo.

- La función de onda tipo "bola de billar" [Ridley, 1980]

$$|T\rangle = \frac{1}{V_T^{\frac{1}{2}}}, \quad r \leq r_T \quad (56)$$

siendo $V_T = 4\pi r_T^3/3$, propuesta para modelar la parte más interna de la función de onda del estado ligado.

En la práctica las más utilizadas son las tres últimas. Un estudio de este tema se puede encontrar en un trabajo de Stoneham de 1979 [Stoneham, 1979]. Además en muchos casos, independientemente de su estado de carga la aproximación del defecto cuántico se toma al límite de la función delta [Morante et al., 1982a, 1982b] [Ridley, 1978b]. Incluso se han utilizado combinaciones de éstas para representar la función de onda en distintas regiones del espacio [Ridley, 1980] [Ridley y Amato, 1981]. El parámetro que realmente más influye en la magnitud de los elementos de matriz es el radio que acompaña a la coordenada r en los argumentos de las exponenciales. Además, físicamente, este radio cuantifica el grado

de confinamiento de la órbita ligada.

En la figura 3 se muestran las formas de algunas de esas funciones de onda con la coordenada r .

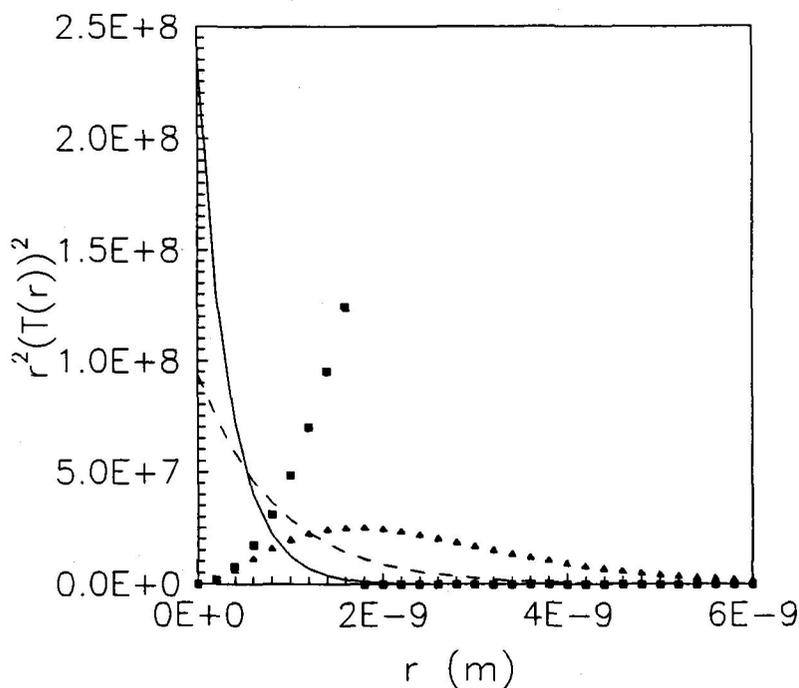


Figura 3.- Distintas formas de onda para el estado ligado: tipo defecto cuántico con $\nu_T=0.4$ (línea continua); tipo delta con $\nu_T=1$ (línea discontinua); tipo bola de billar con $r_T=a^*$ (cuadros); y tipo hidrogenoide (triángulos). En todas ellas se ha tomado $a^*=17.8 \text{ \AA}$ correspondiente al silicio.

En este trabajo hemos tomado como modelo de la función de onda del estado ligado una combinación del modelo de la bola de billar para la región más próxima a la impureza [Ridley, 1980]:

$$|T\rangle = \frac{1}{V_T^{1/2}}, \quad r \leq R_0 \quad (57)$$

mientras que para la región externa que supondremos responsable de la interacción con la

banda es más apropiado el modelo de función tipo delta

$$|T\rangle = A \frac{r_T}{r} e^{-\frac{r}{r_T}}, \quad r \geq R_0 \quad (58)$$

con $A = (2\pi r_T^3)^{-1/2}$ y $R_0 \ll r_T$ el radio del potencial efectivo de la trampa.

iii) Una vez elegidas las funciones de onda para calcular el elemento de matriz V_{21} debemos ocuparnos de la forma del potencial de acoplamiento electrón-fonón. La primera operación que se realiza es expandir dicho potencial en ondas planas cuyos momentos corresponden a los modos de vibración,

$$V = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i U(q_i) e^{iq_i r} \quad (59)$$

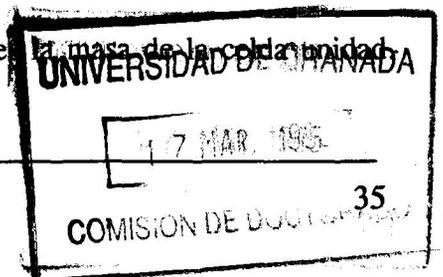
donde q_i es el vector de onda del modo i -ésimo y N es el número de modos. Para las proximidades de una imperfección aproximaremos como es usual [Henry y Lang 1977] [Morante et al. 1982a, 1982b] [Ridley, 1993]:

$$e^{iq_i r} \approx \frac{\text{sen}(q_i r)}{q_i r} \quad (60)$$

El término $U(q_i)$ depende del tipo de interacción electrón-fonón dominante en cada semiconductor. Así, en las imperfecciones en silicio el potencial de interacción se considera debido a la deformación [Morante et al., 1982b] [Ridley, 1993]. Además debido a la energía de los fonones se supone una interacción con modos ópticos [Ridley, 1993]. En este caso podemos asumir que

$$|U(q_i)|^2 = \frac{D^2}{M\omega/\hbar} \quad (61)$$

donde D es la constante del potencial de deformación y M es la masa de la celda unidad.



Esta forma de acoplamiento es el usado en la teoría de dispersión de electrones por la red.

En el caso del GaAs, el acoplamiento con modos longitudinales ópticos es posible a través de la interacción polar presente en este semiconductor [Seeger, 1991]. Para describirla habitualmente se utiliza la expresión aproximada [Morante et al., 1982a] [Ridley, 1993]:

$$|U(q_i)|^2 = \frac{e^2(M/V_0)\omega^2}{M\omega/\hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{1}{q_i^2} \equiv \frac{K_F}{q_i^2} \quad (62)$$

donde ahora M es la masa reducida, V_0 es el volumen de la celda unidad, ϵ_∞ y ϵ son las permitividades de alta frecuencia y estática. El acoplamiento piezoeléctrico, que depende de la deformación acústica, también es posible pero, presumiblemente, mucho más débil.

Escogida la forma de las funciones de onda de los estados inicial y final y el potencial de acoplamiento, el elemento de matriz queda de la siguiente forma:

$$V_{21} = \sum_i V_{21i} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \langle k | \frac{U(q_i)}{\hbar\omega} \frac{\text{sen}(q_i r)}{q_i r} | T \rangle \quad (63)$$

que debemos resolver para las dos partes en que hemos dividido el problema: bajas energías ($kr_T \approx 0$) y medias energías ($kr_T \leq 1$) del electrón en la banda de conducción. Hasta ahora no se había abordado el segundo cálculo despreciando en todo momento la energía del electrón en la obtención de la probabilidad de emisión multifonón. Nosotros, como mostraremos a continuación, conseguimos una expresión analítica válida hasta 0.3 eV de energía en los dos casos de potencial de acoplamiento anteriormente referidos.

- Región de bajas energías ($kr_T \approx 0$):

Para energías del electrón próximas al fondo de la banda de conducción y tomando las aproximaciones realizadas de acuerdo con las expresiones (48), (51), (58), (60) y (61),

se obtienen unos elementos de matriz:

$$V_{21}^2(0) \approx 32\pi S(\hbar\omega)^2 C_o \frac{(\nu_T a^*)^3}{V}, \quad (64)$$

$$|V_{21}(0) \cdot \Delta|^2 \approx V_{21}^2(0) S$$

La expresión 64 se introduce en la expresión 35 proporcionando unas probabilidades de captura por emisión multifonón para baja energía $W^{mph}(0)$ de centros neutros y cargados tanto en silicio como en arseniuro de galio:

$$W^{mph}(0) \approx \frac{36\pi^2 \omega (\nu_T a^*)^3 C_o}{V(p_o - 1)!} S^{p_o} e^{-S} [0.26 + 0.18(p_o - 1)] (n+1)^{p_o} e^{-2nS} \quad (65)$$

donde el número de fonones emitidos, p_o , será constante

$$p_o = \frac{E_T}{\hbar\omega} - S \quad (66)$$

y en el silicio $a^* = 18.7 \text{ \AA}$, $\nu_T = (0.032/E_T)^{1/2}$, mientras que en el GaAs $a^* = 103 \text{ \AA}$ y $\nu_T = (0.0053/E_T)^{1/2}$.

- Región de energías intermedias ($kr_T \leq 1$):

En el caso de energías no despreciables el elemento de matriz, $|V_{21}(\epsilon)|^2$ no tiene una forma analítica cerrada con las funciones de onda que hemos elegido. Por tanto, se ha evaluado numéricamente para energías en el rango de 0 eV hasta 0.5 eV a partir de las expresiones (48), (51), (58), (60) y (61), como se muestra en las figuras 4 y 5. En la figura 4 se ha calculado el módulo cuadrado del elemento de matriz con acoplamiento no polar, mientras que en la figura 5 se ha hecho lo propio con el polar.

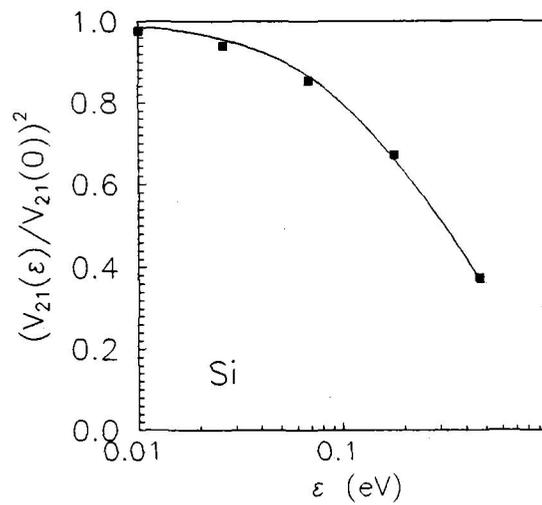


Figura 4.- Módulo cuadrado del elemento de matriz normalizado correspondiente a nuestros modelos de funciones de onda y acoplamiento por deformación óptica no polar (Silicio). El estado ligado tenía un radio característico de 5 Å. Los símbolos corresponden al cálculo numérico y la línea a la aproximación analítica.

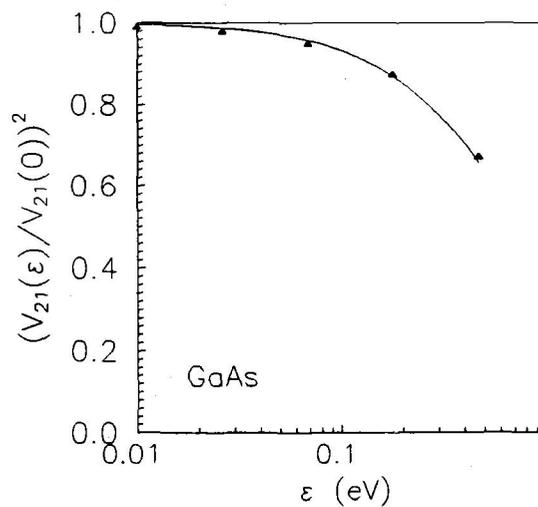


Figura 5.- Módulo cuadrado del elemento de matriz normalizado correspondiente a nuestros modelos de funciones de onda y acoplamiento por interacción polar óptica (Arseniuro de Galio). El estado ligado con radio característico de 10 Å. Los símbolos corresponden al cálculo numérico y la línea a la aproximación analítica.

Este resultado numérico se ha ajustado por una aproximación analítica de la forma:

$$|V_{21}(\epsilon)|^2 = |V_{21}(0)|^2 \frac{1}{[1+(kv_{T}a^*)^{2.5}]^n} \quad (67)$$

con $n=0.7$ para acoplamiento óptico no polar (para el silicio) y $n=1.7$ para polar óptico (para el arseniuro de galio), para el rango de interés del radio r_T . En ambas figuras, los símbolos corresponden al cálculo numérico de estas cantidades, siendo las líneas continuas las aproximaciones analíticas simples dadas por (67).

Con todo esto queda una probabilidad de captura en función de la energía:

$$W_{Si}^{mph}(\epsilon) = \frac{36\pi^2\omega(v_{T}a^*)^3}{V(p-1)!} \frac{C_o S^p e^{-S}}{[1+(kv_{T}a^*)^{2.5}]^{0.7}} [0.26+(p-1)0.18](n+1)^p e^{-2nS} \quad (68)$$

$$W_{GaAs}^{mph}(\epsilon) = \frac{36\pi^2\omega(v_{T}a^*)^3}{V(p-1)!} \frac{C_o S^p e^{-S}}{[1+(kv_{T}a^*)^{2.5}]^{1.4}} [0.26+(p-1)0.18](n+1)^p e^{-2nS}$$

donde ahora el número de fonones emitidos, p , crecerá al aumentar la posición energética del electrón con respecto al fondo de la banda

$$p = \frac{\epsilon + E_T}{\hbar\omega} - S \quad (69)$$

donde no hay que olvidar que en el cálculo de n y de p la energía de los fonones es diferente para el Si que para el GaAs.

Podemos expresar la probabilidad en función de la energía si incluimos la relación entre la energía y el vector de onda, que teniendo en cuenta la no parabolicidad, es

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \epsilon(1+\alpha\epsilon) \quad (70)$$

con α el parámetro de no parabolicidad.

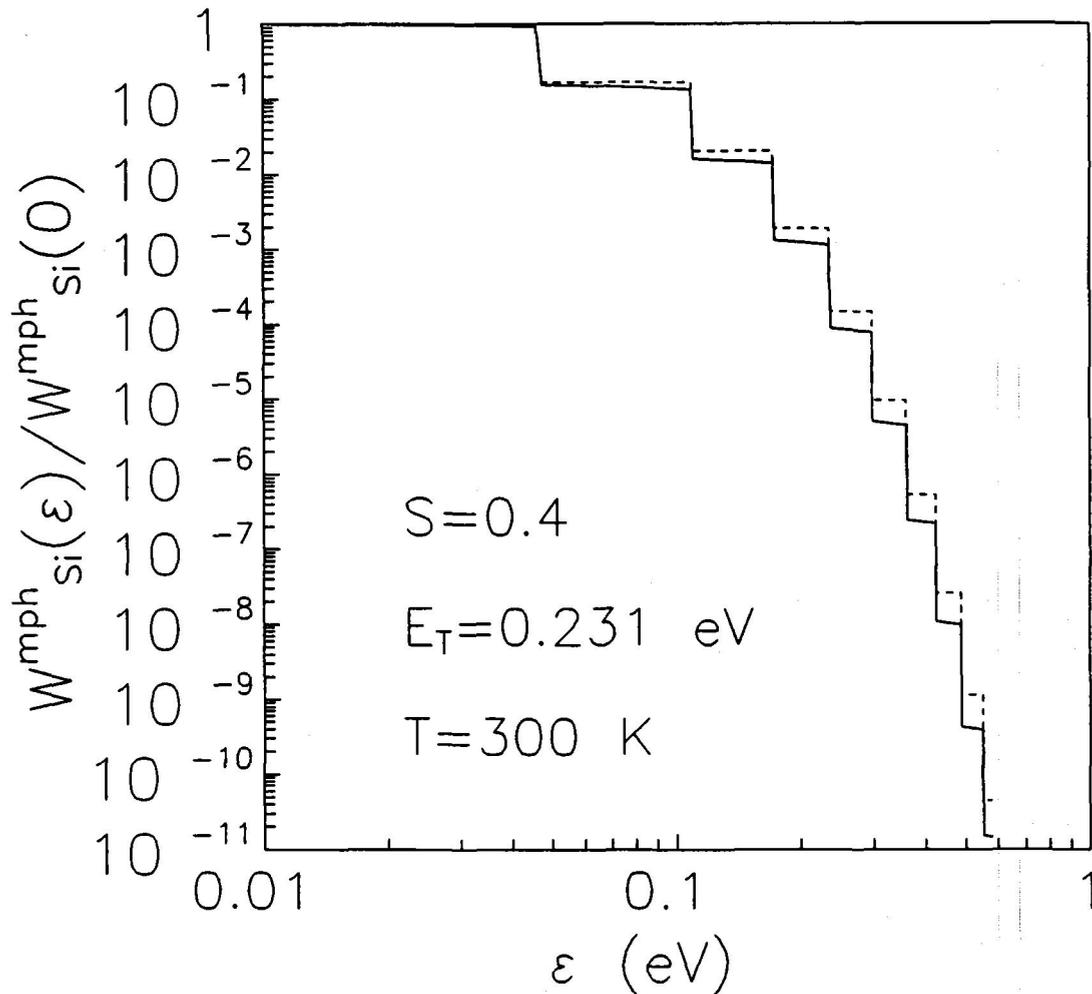


Figura 6.- Probabilidad de captura multifonón normalizada en función de la energía a 300 K. El trazo discontinuo corresponde sólo a la dependencia energética con el número de fonones p , mientras que el continuo incluye la contribución del elemento de matriz V_{12} .

En la figura 6 se muestra la relación $W_{\text{Si}}^{\text{mph}}(\epsilon)/W_{\text{Si}}^{\text{mph}}(0)$ a la temperatura de 80 K, con acoplamiento por deformación óptica no polar, en el rango de energías 0 a 0.5 eV. El trazo discontinuo corresponde al comportamiento energético despreciando la dependencia de los elementos de matriz con la energía, mientras que el continuo representa todas las contribuciones. Se observa como a medida que aumenta la energía del portador la diferencia de las dos probabilidades es mayor, con lo que es imprescindible, como veremos más

adelante, la inclusión de la dependencia energética del elemento de matriz. Por el contrario convergen para energías próximas al fondo de la banda.

En definitiva, los resultados obtenidos en las ecuaciones (65) y (68) se usarán para modelar la probabilidad de captura multifonón, que introduciremos en la simulación por Monte Carlo como veremos en el capítulo siguiente, sin campo y en presencia de campo eléctrico respectivamente.

I.3.2.4. Parámetros característicos.

Una vez planteada la forma de abordar el problema de la captura por el mecanismo de emisión multifonón observamos algunos inconvenientes. El problema común que introducen las expresiones para la probabilidad obtenidas en el apartado anterior es la gran cantidad de parámetros libres que quedan en dichas expresiones. Esto propicia que se manejen con gran elasticidad obteniendo valores de secciones eficaces de gran variedad de centros profundos, tanto en Si como en GaAs, muy próximos a los valores experimentales. Por ejemplo, las expresiones de las probabilidades son muy sensibles al parámetro p . Así, una pequeña variación en la energía del fonón implicado en el mecanismo de captura da como resultado variaciones en el número de fonones emitidos. Esto propicia que los valores del factor S varíen fuertemente de unos trabajos a otros al intentar ajustar los datos experimentales con distintos fonones [Morante et al., 1982a]. En concreto no existe acuerdo acerca de los valores que se deben asignar a los siguientes parámetros de las ecuaciones (65) y (68):

1º.- La naturaleza y la frecuencia del fonón implicado en la emisión multifonón.

2º.- El factor S sólo se conoce para pocos centros y mediante medidas ópticas, con lo que se utiliza como un parámetro libre en los estudios teóricos, dándose casos en los que hay

gran disparidad de valores para un mismo centro. Este factor caracteriza tanto la forma del acoplamiento electrón-red como al estado ligado, información que es fundamental para analizar el proceso de captura. Por esta razón, su obtención será uno de nuestros principales objetivos en el capítulo siguiente.

3°.- El modelo para la función de onda del estado ligado. Nosotros, de acuerdo con algunos estudios [Luckosky, 1965] [Ridley, 1978, 1993], hemos escogido una combinación de la función delta y la función bola de billar que por supuesto no es la única [Ridley, 1980] [Morante et al., 1982a]. Esto puede influir en la definición del radio de la órbita del electrón en la impureza.

En el próximo capítulo detallaremos las opciones que hemos tomados respecto a estos puntos, con el fin de obtener una expresión para la probabilidad de captura por el mecanismo de emisión multifonón con el menor número posible de parámetros libres.

I.4. MODELO DE CAPTURA EN DOS ETAPAS.

Como ya se ha mencionado anteriormente y ha sido referido por gran número de trabajos [Stoneham, 1975], los mecanismos de cascada y multifonón pueden presentarse juntos en el proceso de captura de un portador por un centro. Formalmente Gibb et al. en 1977 propusieron un modelo de captura en dos etapas en el que participan ambos mecanismos [Gibbs et al., 1977]. Fue aplicado para explicar la dependencia térmica de las secciones eficaces de captura de centros profundos con los siguientes estados de carga: atractivos antes de capturar y neutros cuando están ocupados. Debido a esa carga, cabe esperar una serie de estados excitados culombianos situados en la banda prohibida unidos al extremo de la banda. La captura de un portador, por tanto, tendría lugar en dos pasos, primero un proceso de cascada a través de los estados excitados muy próximos entre sí hasta alcanzar el estado de

Mecanismos de captura térmica por emisión de fonones

más baja energía accesible por la emisión de uno o dos fonones, seguido de un sólo salto, mediante una emisión multifonón, al nivel fundamental.

Este modelo supone que el nivel más bajo de los estados excitados accesible por cascada esté a una energía E_1 por debajo del fondo de la banda, caracterizado por una sección eficaz de captura σ_c . El salto siguiente al centro profundo de energía E_T se supone con una probabilidad ν . Esta segunda transición tiene lugar en competición con la reemisión térmica a la banda desde el nivel poco profundo equivalente, con una probabilidad dada según argumentos de balance de energía por $\sigma_c v_{th} N \exp(-E_1/K_B T)$. v_{th} es la velocidad media del portador en la banda, que varía con la temperatura como $T^{1/2}$, y N la densidad efectiva de estados en la banda, que para bandas parabólicas varía como $T^{3/2}$.

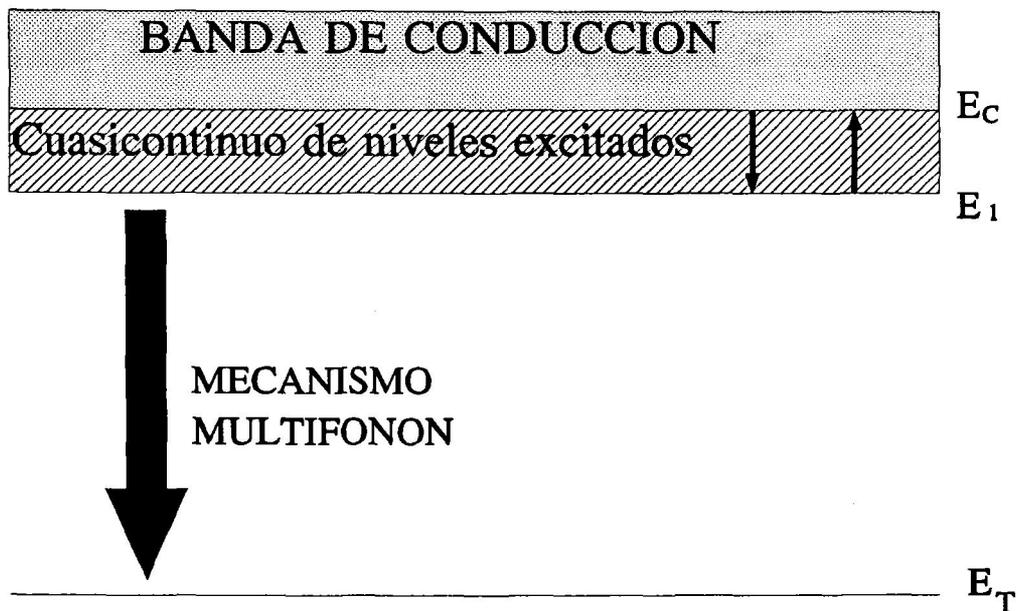


Figura 7.- Esquema de los niveles y las transiciones entre ellos en el modelo de captura en dos pasos.

Por tanto la sección eficaz propuesta proviene de la combinación de ambos

mecanismos:

$$\sigma_T = \frac{\sigma_c \nu}{\nu + \sigma_c \nu_{th} N e^{\frac{-E_1}{K_B T}}} \quad (71)$$

A altas temperaturas, cuando la reemisión es más probable que la captura por el estado profundo, $\sigma_c \nu_{th} N \exp(-E_1/K_B T) \gg \nu$ y la ecuación (71) se simplifica a

$$\sigma_T \approx \frac{\nu}{\nu_{th} N} e^{\frac{E_1}{K_B T}} \quad (72)$$

De acuerdo con las dependencias térmicas señaladas, en el caso anterior, si ν es independiente de la temperatura, σ_T decrece con la temperatura de la forma

$$\sigma_T \sim T^{-2} e^{\frac{E_1}{K_B T}} \quad (73)$$

Si ν representa un proceso multifonón activado, entonces

$$\sigma_T \sim T^{-2} e^{\frac{E_1 - E_A}{K_B T}} \quad (74)$$

siendo E_A la energía de activación de la emisión multifonón.

En general, si la probabilidad de transición multifonón, ν , es independiente de la temperatura, el comportamiento térmico de la sección eficaz de captura será debido al mecanismo de cascada, σ_c . En particular, a bajas temperaturas, cuando $\sigma_c \nu_{th} N \exp(-E_1/K_B T) \ll \nu$, $\sigma_T = \sigma_c$. Esto significa que la captura en el nivel poco profundo viene seguida inevitablemente por la captura del centro profundo. σ_T mostrará, por tanto, la dependencia térmica de la captura por cascada. Esto último siempre ocurrirá a muy bajas temperaturas.

Este modelo ha tenido éxito en reproducir la dependencia térmica de la sección eficaz de captura de los elementos del grupo del azufre (S, Se) en Si [Grimmeiss et al., 1980a,b]. Formalmente es aplicable a la captura de portadores por impurezas poco profundas, aunque la falta de medidas experimentales a temperaturas intermedias y altas no permite comprobarlo.

En el próximo capítulo desarrollaremos el modo de implementar este modelo de captura con el fin de calcular la sección eficaz de captura por simulación numérica por el método de Monte Carlo. Simularemos la captura por centros atractivos en silicio combinando los mecanismos de cascada y multifonón, y mejoraremos este modelo teórico contemplando la posibilidad de captura multifonón directa desde la banda sin intervención de los estados excitados.

I.5. CLASIFICACIÓN DE DEFECTOS SEGÚN EL MECANISMO DE CAPTURA.

Una vez revisada brevemente la información sobre los mecanismos de captura por emisión de fonones podemos establecer una clasificación de defectos atendiendo a los mecanismos que provocan la captura de portadores libres procedentes de las bandas:

a) Centros neutros o repulsivos, que al no poseer estados excitados próximos entre sí, no admiten el mecanismo de cascada y que supondremos capturan portadores directamente desde las bandas mediante el mecanismo multifonón. A la hora de la simulación, dependiendo del valor del campo eléctrico al que está sometido el defecto, utilizaremos una probabilidad dependiente o no de la energía vistas anteriormente.

b) Impurezas atractivas, tanto profundas como poco profundas, en los que podemos admitir el modelo de captura en dos etapas. La diferencia que habrá de unas a otras es que

los fonones implicados en el mecanismo multifonón serán distintos en cada caso, fonones de menor energía para centros poco profundos y de mayor energía para centros cargados profundos. En este tipo de impurezas cuando la captura sea en presencia de campo eléctrico comenzará a ser importante la captura por vía multifonón directamente desde la banda al estado fundamental sin intervención de los estados ligados excitados a causa de la posición energética del electrón cada vez más alejada del fondo de la banda a medida que aumenta el valor del campo.

Caso especial son los centros atractivos en GaAs, donde, como es conocido, la energía efectiva de Bohr que está relacionada con la energía mínima accesible por cascada E_1 , tiene un valor despreciable frente a la energía térmica de los portadores en la banda (para las temperaturas en que hay datos experimentales). Por esta razón, el efecto de la región de estados ligados que forman el cuasi-continuo adyacente al fondo de la banda apenas perturba la energía de los electrones y no cabe esperar que influya apreciablemente en el fenómeno de captura. De este modo, como se probará más adelante, suponiendo sólo el mecanismo de captura multifonón desde la banda podremos reproducir los valores de las secciones eficaces de captura térmica obtenidos experimentalmente.

CAPITULO II:

SIMULACIÓN DE LA CAPTURA TÉRMICA POR EMISIÓN DE FONONES MEDIANTE EL MÉTODO DE MONTE CARLO.

II.1.- INTRODUCCIÓN.

En este capítulo vamos a desarrollar el procedimiento por el cual hemos introducido los mecanismos de captura dentro de la simulación del transporte de carga en un semiconductor mediante el método de Monte Carlo con el fin de calcular la sección eficaz de captura. Aquí, nos hemos ocupado de la captura de electrones por parte de impurezas neutras y cargadas tanto en Si como en GaAs. Además, en Si estudiaremos la influencia del campo eléctrico en este fenómeno. La principal dificultad a la hora de llevar a cabo esta tarea la encontraremos en el carácter local que tiene el fenómeno de captura frente al tratamiento tradicional en el espacio de las energías y los vectores de onda del método de Monte Carlo para los distintos mecanismos de dispersión existentes en la red.

Antes de entrar en el análisis de la simulación de los procesos de captura se hará un breve repaso de las principales características del algoritmo de Monte Carlo aplicado al transporte de electrones en un semiconductor [Jacoboni y Reggiani. 1983]. Durante este desarrollo indicaremos los principios generales del método, señalando las particularidades para adaptarlo al fenómeno de la captura. A continuación mencionaremos, también escuetamente, los mecanismos inelásticos de una red sin defectos que han sido introducidos junto con los mecanismos de captura. En la simulación hemos considerados los mecanismos de dispersión no polares por fonones acústicos (tratados como inelásticos) y ópticos, mientras que para la red de GaAs se ha añadido la dispersión por fonones polares ópticos.

Una vez introducido el método numérico, expondremos con detalle la manera en que han sido introducidos los mecanismos de captura. Este problema fue tratado por Reggiani et al. [Reggiani et al., 1989, 1991], al estudiar el proceso de cascada en la captura de huecos por parte de niveles aceptadores en silicio tipo p a bajas temperaturas. En dicho trabajo, al igual que en nuestra simulación, sólo tendremos en cuenta los mecanismos inelásticos, ya que nos interesa únicamente la historia energética de los electrones. En concreto, hemos implementado:

i) El mecanismo de captura por el proceso de cascada. Aquí mostraremos como mediante un promediado espacial de la energía perturbada por el potencial coulombiano hemos conseguido eliminar el uso explícito de la variable espacial en la simulación. Este uso imponía una serie de limitaciones y problemas a la hora del cálculo [Reggiani et al., 1991]. Por otro lado, la extracción del tiempo de captura de la simulación no es un problema trivial. En esta parte del capítulo nos hemos planteado conseguir una definición correcta de esta magnitud a través de la comparación de nuestros resultados numéricos con los datos experimentales disponibles para impurezas donadoras poco profundas. Esto lo hemos conseguido mediante un estudio estadístico de los tiempos de captura de un

número grande de electrones.

ii) El mecanismo de captura por emisión multifonón ha sido introducido en la simulación a través de probabilidades que describen convenientemente esta transición. Se ha aplicado a centros en silicio y en arseniuro de galio. Para ello, hemos obtenido expresiones de esas probabilidades de captura en función de la energía inicial del electrón en la banda, lo que nos ha permitido estudiar además el efecto del campo eléctrico en la captura de electrones por impurezas en silicio. A continuación, hemos aplicado nuestro método para calcular secciones eficaces de captura térmica en función de la temperatura y compararlas con resultados experimentales teniendo como objetivos la confirmación de nuestros modelos y la obtención de un parámetro, de difícil extracción experimental y teórica, que caracteriza este fenómeno: el factor de Huang-Rhys, S . En concreto, para centros neutros en silicio se ha confirmado el valor del factor de Huang-Rhys, S , en el caso del nivel aceptador del Pt. También se han obtenido buenos ajustes con datos sobre centros en GaAs reproduciendo los valores experimentales del factor S . Una vez verificado nuestro procedimiento nos hemos ocupado de dos aspectos. Por un lado, la relación real existente entre la dependencia térmica de σ y de la probabilidad de captura. De hecho relaciones incorrectas han llevado a menudo a errores importantes en la interpretación de medidas experimentales. Dentro de este punto pondremos como ejemplo la diferencia entre las dependencias térmicas de σ para centros en Si y en GaAs, así como las ventajas de la simulación por Monte Carlo frente a las técnicas analíticas convencionales de cálculo de esta magnitud.

iii) El modelo de captura en dos etapas, propuesto para explicar la sección eficaz de captura térmica de centros profundos atractivos, también es simulado mediante nuestro procedimiento, combinando los dos mecanismos antes mencionados. Para tener en cuenta la captura por multifonón tanto desde la banda de conducción como desde los estados excitados de la impureza se ha obtenido una probabilidad que tiene en cuenta las

características del estado inicial del portador. Las consideraciones que hagamos al implementar dicho modelo nos permitirán obtener información sobre el proceso de captura por parte de este tipo de impurezas. Comprobaremos si son ciertas las hipótesis realizadas en este modelo así como la importancia de las transiciones no acústicas en el proceso de cascada. También en este punto se ha conseguido buen acuerdo entre nuestros resultados y los datos experimentales.

Finalmente, y dada la facilidad de obtener S con nuestro método hemos abordado el cálculo de la relación entre esa magnitud y la profundidad del nivel profundo, E_T , en impurezas profundas atractivas y neutras.

II.2.- MÉTODO DE MONTE CARLO.

II.2.1.- Fundamentos del método.

El método de Monte Carlo, aplicado al transporte de carga en semiconductores, consiste en la simulación del movimiento de uno o más electrones dentro del cristal, eventualmente sujeto a la acción de campos externos eléctricos o magnéticos y a unos mecanismos de dispersión dados, resolviendo la ecuación de transporte de Boltzmann. Las duraciones de los vuelos libres del portador entre dos de esas colisiones y los mecanismos de dispersión implicados se seleccionan estocásticamente de acuerdo con las probabilidades que describen los procesos microscópicos. Por tanto, este método radica en la generación de una secuencia de números aleatorios con una distribución de probabilidades dada.

Cuando el propósito es el análisis de un fenómeno en un estado estacionario, es

suficiente simular el movimiento de un solo electrón; por ergodicidad asumimos que un camino suficientemente largo de este electrón nos proporciona información del comportamiento del gas electrónico completo. Cuando el proceso bajo estudio no es estacionario se hace imprescindible simular un gran número de electrones, siguiendo sus dinámicas para obtener la información deseada.

Básicamente, el método de Monte Carlo aprovecha las características del movimiento de un portador en el seno de un cristal afectado por un campo externo. Por otro lado, estudia la dinámica del mismo durante un vuelo libre (cuya duración también decide el método). Indica cuando finaliza el período en que no se ve dispersado el portador, determina cuál de estos mecanismos de dispersión es el que actúa, y por último obtiene el nuevo estado del portador de acuerdo con el proceso de dispersión seleccionado, quedando el portador de nuevo en disposición de ser arrastrado por el campo externo (si lo hubiera). La repetición de esta secuencia de procesos interdispersión y de dispersión, constituyen en sí la simulación de dicho movimiento. Resumiendo, el método de Monte Carlo consiste en la selección de la duración del vuelo libre, el mecanismo de dispersión y el nuevo estado después de la misma, mediante la generación de números aleatorios conforme a unas distribuciones de probabilidad determinadas.

En nuestro caso, dado el carácter transitorio del fenómeno de captura, aplicaremos el método de Monte Carlo a un número N de electrones por separado. Estos electrones podrán estar afectados o no por un campo eléctrico externo. La simulación de un conjunto de electrones consiste en la simulación independiente de cada uno de ellos con una distribución de condiciones iniciales apropiadas. En este caso, la duración de la simulación para un portador está indefinida y finaliza cuando es atrapado por la trampa. Por tanto, a la hora de obtener valores aceptables de las magnitudes bajo estudio se hace necesario la simulación de un gran número de partículas ($N \rightarrow \infty$). El compromiso entre un buen resultado y la posibilidad de implementación práctica de este hecho en el

ordenador proporcionará el número de partículas simuladas. A la vista de lo explicado nos centraremos en analizar brevemente el método sobre un sólo electrón, resultando inmediata su traslación a un conjunto de ellos.

II.2.2.- Definición del sistema físico.

La simulación comienza con la definición del sistema físico a estudiar, incluyendo los parámetros del material y los valores de las magnitudes físicas, tales como la temperatura de la red T , el valor del campo eléctrico y la concentración de impurezas capaces de atrapar un portador. Las redes que se estudiarán serán las de silicio y arseniuro de galio, debido a su extensa utilización en microelectrónica. En la relación entre la energía y el vector de onda de la partícula $E(k)$ se incluyen las aproximaciones de masas efectivas y el parámetro de no parabolicidad. En el silicio sólo se incluye el mínimo absoluto de la banda de conducción mientras que en el GaAs se introducen los tres mínimos inferiores de dicha banda.

Asimismo en este nivel se decide la precisión deseada en los resultados.

II.2.3.- Condiciones iniciales.

Dada la importancia de las condiciones iniciales del portador en un proceso transitorio microscópico como el que se va a estudiar, es necesario asegurarse que son las adecuadas para que no desvirtúen los resultados. Por esta razón, para obtener una distribución de energías de nuestros electrones lo más real posible, se ha dejado evolucionar al electrón, sufriendo un número alto de dispersiones antes de activar los mecanismos de captura. Además, como la secuencia de números aleatorios es diferente

para cada partícula, cada una se encontrará en unas condiciones diferentes a la hora de comenzar a actuar sobre ella los efectos de las impurezas. Para anular el efecto de la energía inicial introducida en la simulación para cada electrón se desecha este tiempo inicial.

II.2.4.- El vuelo libre.

El vector de onda k del electrón cambia durante un vuelo libre debido al campo aplicado. Si no existe campo las magnitudes que definen su dinámica permanecen inalteradas. Si $\Gamma[k(t)]$ es la probabilidad de que un electrón con vector de onda $k(t)$ sufra una dispersión en dicho estado, la probabilidad de que un electrón, habiendo sufrido una colisión en $t=0$, no sufra otra colisión hasta después de un tiempo t es

$$\exp\left[-\int_0^t \Gamma[k(t')] dt'\right] \quad (1)$$

y por lo tanto, la probabilidad $P(t)$ de que un electrón sufra su colisión durante un intervalo de tiempo dt alrededor de t viene dada por:

$$P(t)dt = \Gamma[k(t)] \exp\left[-\int_0^t \Gamma[k(t')] dt'\right] \quad (2)$$

A causa de la complejidad de la integral del exponente, es impracticable obtener la duración de vuelos libres a partir de la ecuación 2 y de una distribución uniforme de números aleatorios (sólo es resoluble fácilmente cuando no hay campo eléctrico con lo que el vector de onda k no es función del tiempo durante el vuelo libre). Este problema fue resuelto mediante la introducción del concepto "autoscattering" o autodispersión [Jacoboni y Reggiani, 1983]: Si $\Gamma_M = 1/\tau_0$ es el valor máximo de $\Gamma(k)$ en la región de

interés, se introduce un nuevo mecanismo de dispersión ficticio, denominado "autoscattering", de manera que en cualquier instante de tiempo, la probabilidad total de dispersión del electrón sea constante e igual a Γ_M . Cuando el electrón sufre un "autoscattering", su estado k' después de la colisión se toma igual al estado k que tenía antes de la misma, de forma que en la práctica el electrón continúa su movimiento como si no hubiese ocurrido nada. Sin embargo, con $\Gamma(k)=\Gamma_M$ constante, la ecuación 2 se reduce a:

$$P(t) = \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{t}{\tau_0}} \quad (3)$$

y la duración de un vuelo libre t_r

$$t_r = -\tau_0 \ln(r) \quad (4)$$

donde r es un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1 [Jacoboni y Reggiani, 1983].

II.2.5.- Elección del mecanismo de dispersión.

Una vez transcurrido el tiempo t_r es necesario establecer qué mecanismo de dispersión es el responsable del fin del vuelo libre. Como la probabilidad de que un vuelo libre termine como consecuencia de un mecanismo n -ésimo es proporcional a su probabilidad de dispersión, $\Gamma_n(k)$, y como

$$\Gamma_M = \sum_n \Gamma_n(k) \quad (5)$$

el mecanismo responsable del fin del vuelo libre puede determinarse eligiendo un número aleatorio s , distribuido con igual probabilidad entre 0 y Γ_M y comparándolo sucesivamente

con las sumas parciales:

$$\begin{aligned} & \Gamma_1 \\ & \Gamma_1 + \Gamma_2 \\ & \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 \\ & \dots \end{aligned}$$

Se dice que ha actuado el mecanismo j -ésimo si la primera de la sumas parciales anteriores que sea mayor que s cumple: $s > \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \dots + \Gamma_j$.

La probabilidad de dispersión de un electrón por un mecanismo determinado depende de la energía que en cada instante posee el electrón. Una vez incorporado el concepto de "autoscattering", la suma de todas las probabilidades, es decir, la probabilidad total de dispersión, es constante e igual a Γ_M . Esto significa que la probabilidad de que el electrón sufra un "autoscattering" depende también de la energía del electrón (para que la suma sea constante). Por otro lado, el electrón sufrirá un "autoscattering" únicamente si el número aleatorio elegido es mayor que la suma de las probabilidades de dispersión efectivas (sin incluir el "autoscattering"). En tal caso, no haría falta calcular la probabilidad de cada mecanismo de dispersión por separado, si con anterioridad conocemos para cada valor de la energía dicha suma. Por esto y con intención de hacer más efectivo el algoritmo de simulación, inicialmente se obtienen los valores máximos de la probabilidad de dispersión efectiva en función de la energía del electrón. Sólo cuando se sabe que se ha producido una dispersión efectiva es cuando se calculan las distintas probabilidades para la energía concreta que posee el electrón en ese instante.

II.2.6.- Elección del estado siguiente.

Una vez que el mecanismo de dispersión que causó el fin del vuelo libre del

electrón ha sido determinado, debe elegirse un nuevo estado resultante de la dispersión, k_f . Si el vuelo libre termina con un "autoscattering", el estado final y el inicial coinciden, asignando los mismos vectores de onda que antes de la dispersión. Cuando ocurra una dispersión efectiva, k_f debe generarse de acuerdo el mecanismo que produjo la dispersión.

Entre los mecanismos de dispersión podemos distinguir los elásticos y los inelásticos. En los primeros la energía total del electrón no se modifica tras la dispersión, mientras que en los segundos se produce un cambio de dicha energía después de la dispersión. Debido a que en esta simulación nosotros sólo estamos interesados en la historia energética del electrón y a que sólo nos interesan los mecanismos que produzcan cambios de energía vamos a centrarnos en los mecanismos de dispersión inelásticos.

En estos mecanismos la energía total de electrón se modifica como consecuencia del proceso de dispersión. En este tipo de procesos se ven involucrados, además del electrón, otros agentes que asisten la transición aportando o quitando energía a la partícula. La conservación de la energía en la transición impuesta por la regla de oro de Fermi exige que se cumpla la ecuación:

$$E_{final} = E_{inicial} + U \quad (6)$$

donde U es la energía que el electrón emite o absorbe y que generalmente se intercambia con la red. Esta energía U se conoce una vez determinado el mecanismo causante de la dispersión.

Caso particular de nuestra simulación lo constituye el proceso de captura. Como se analizará en profundidad más adelante, incluimos los procesos de cascada y de emisión multifonón dentro de la simulación del transporte en el semiconductor. La inclusión del proceso de cascada se realiza a través de los estados excitados que produce el potencial asociado a impurezas atractivas. Estos estados se consideran como un cuasi-continuo

adyacente a la banda de conducción en los cuales se permite evolucionar al electrón. Se considerará capturado, y por tanto cesará la simulación para ese electrón, cuando la partícula sobrepase un cierto nivel en los estados ligados. Concretamente, si la energía que alcanza en un instante es menor que una denominada energía de corte, la simulación cesa y el electrón se considera capturado. En el caso de la emisión multifonón, este mecanismo se introduce como un mecanismo de dispersión más, con una determinada probabilidad. Cuando es seleccionado se detienen la simulación para esa partícula, considerándose por tanto capturada.

II.2.7.- Obtención de las propiedades de transporte.

Con lo visto hasta ahora, podemos estudiar la evolución energética de un electrón en un semiconductor afectado por un campo eléctrico arbitrario. Con el fin de estudiar las secciones eficaces de captura de los centros, como se verá más adelante, es necesario conocer el tiempo que permanece cada electrón en la banda de conducción antes de ser capturado por un defecto de la red. Asimismo, podemos calcular la velocidad media que ha llevado la partícula mientras se encontraba libre en dicha banda.

Estas magnitudes se han obtenido mediante la simulación independiente de la evolución de N electrones sujetos a los mecanismos de la red y a los mecanismos de captura. Como en este caso, el tiempo de simulación no está definido a priori para cada electrón (sino que es una variable que coincide con el tiempo que tarda el portador en ser atrapado), la condición de ergodicidad implica la simulación de un gran número de partículas ($N \rightarrow \infty$).

Si $\langle A \rangle_i$ es el valor medio de una magnitud física para el electrón i -ésimo, ese valor extendido a todo el conjunto de portadores simulados será:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle A \rangle_i \quad (7)$$

donde el valor de la magnitud $A[k(t)]$ promediado durante la historia de duración T del i -ésimo electrón se calcula como:

$$\langle A \rangle_i = \frac{1}{T} \int_0^T A[k(t)] dt \quad (8)$$

que expresado como suma de integrales de cada uno de los vuelos libres del electrón queda:

$$\langle A \rangle_i = \frac{1}{T} \sum_j \int_0^{t_j} A[k(t)] dt \quad (9)$$

donde t_j es la duración del vuelo libre j -ésimo del i -ésimo electrón.

II.3.- MECANISMOS INELASTICOS DE DISPERSIÓN DE LA RED SIN IMPUREZAS.

En este apartado se van a enumerar los distintos mecanismos de dispersión inelásticos que se han introducido para simular el transporte de electrones en un semiconductor. Dado que se han hecho simulaciones con un semiconductor no polar como el silicio y otro polar como el arseniuro de galio, se van a considerar en nuestra simulación tanto los mecanismos no polares como los polares.

Los mecanismos inelásticos de mayor peso en el transporte son los debidos a dispersiones por fonones. Dentro de estos hemos considerado:

- dispersión inelástica por fonones acústicos intravalle.
- dispersión por fonones ópticos no polares intravalle
- dispersión por fonones ópticos no polares intervale.
- dispersión por fonones polares ópticos.

En los Apéndices A y B se han detallado respectivamente las probabilidades de dispersión introducidas en nuestra simulación para todos estos mecanismos de dispersión inelásticos y las constantes físicas que modelan el comportamiento del electrón en la banda de conducción del Si y GaAs.

II.4.- SIMULACIÓN DEL PROCESO DE CASCADA.

II.4.1.- Procedimiento general.

Para introducir el mecanismo de cascada se ha atendido a los principios básicos que describen el comportamiento de un electrón ante la presencia de una perturbación tipo coulombiano, partiendo del trabajo de Reggiani en Si tipo p [Reggiani et al., 1989, 1991]. En él se simula el movimiento del portador en el espacio de configuración energético correspondiente a una sola impureza. De acuerdo con la suposición de que los niveles excitados superiores están muy próximos entre sí podemos considerar como un cuasi-continuo de estados la región situada entre la banda y el primer estado excitado E^1 creado por el potencial atractivo (situado, para las impurezas donadoras en Si, entre 12 y 15 meV por debajo del fondo de la banda de conducción), y por tanto se podrá aplicar la ecuación de Boltzmann.

La hipótesis que considera un continuo de estados excitados ligados desde el fondo de la banda hasta el primer estado excitado es plausible. Según unas medidas de centros donadores en el silicio [Janzen et al., 1984], coincidentes con la teoría de la masa efectiva: el nivel fundamental, $1s$, de un centro coulombiano ideal en el silicio está situado a 31.262 meV del fondo de la banda de conducción; el primer estado excitado, $2p^o$, a 11.492 meV; a partir de este nivel y en orden ascendente no hay una diferencia mayor de 3 meV entre el resto de niveles excitados. La precisión dada por los cálculos es de ± 0.01 meV. En todas nuestras simulaciones de captura por cascada de fonones en Si utilizamos $E^1 = 11.5$ meV (aquí, referido al fondo de la banda de conducción) y se permite al electrón evolucionar tanto en la banda como en los estados excitados ligados. Aunque a primera vista parezca que este límite al continuo se amplía demasiado, como veremos más adelante, sólo estudiaremos la historia energética del portador dentro de los estados excitados con energía de ionización menor o igual a $K_B T$. Como el estudio de captura por cascada que vamos a presentar se limita a unas temperaturas de hasta unos 80 K, el electrón sólo se moverá por estados con energías de 1 meV por debajo de la banda de conducción.

Consideramos nuestro sistema sin campo eléctrico externo y usamos una representación de la energía total del sistema. La energía cinética del portador, E_k , será igual a la energía total, E_o , menos la potencial debida a la perturbación coulombiana introducida por las impurezas, $U(r)$:

$$\begin{aligned} E_k &= E_o - U(r) \\ U(r) &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \end{aligned} \tag{10}$$

siendo ϵ la constante dieléctrica del material, e la carga del electrón y r la posición radial respecto a la impureza. De acuerdo con la figura 1, hemos asociado la región positiva de energías a la banda y la negativa a los estados ligados.

A la hora de seguir la evolución del electrón en el espacio de configuración de una impureza, pueden seguirse dos caminos: manejo explícito en la simulación de la variable espacial [Reggiani et al.,1991] o, considerando todas las posiciones relativas a la impureza como equiprobables, admitir que se puede promediar espacialmente las magnitudes necesarias para el tratamiento numérico, de manera que se obtenga una visión puramente energética del problema. Este segundo procedimiento es el que hemos introducido y desarrollado en este estudio. Con este método salvamos algunos inconvenientes derivados de la primera opción, como puede ser el hecho de acercarnos a la singularidad $r \approx 0$. En caso de haber elegido el primer método se habría hecho necesario, desde el punto de vista estrictamente numérico, la elección de un r mínimo que depende de parámetros ajenos a la física del problema.

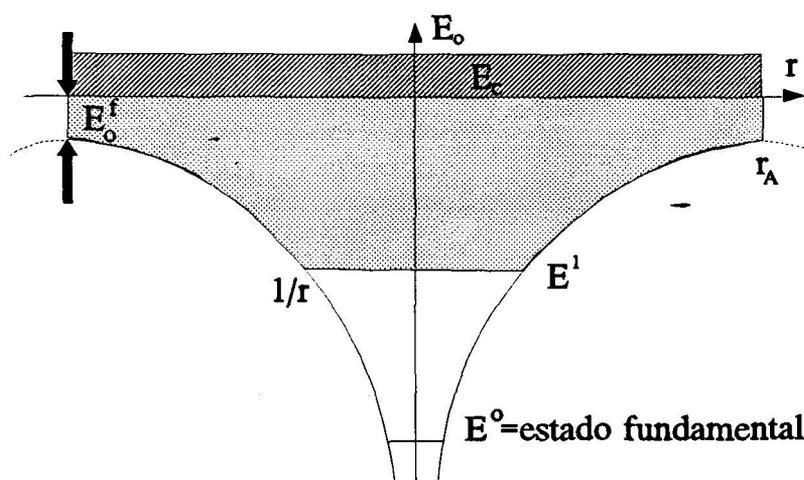


Figura 1.- Representación esquemática de la perturbación en energía que supone la inclusión de un potencial atractivo coulombiano en $r=0$. Se marca el espacio de configuración espacio-energía total correspondiente a una sola impureza que es donde se va a restringir la simulación de la historia energética de un electrón.

Para tener en cuenta la no uniformidad espacial que introducen estos estados y

para delimitar la simulación en el rango que cubre una impureza debemos hacer un promediado espacial tanto de la densidad energética de estados como de las probabilidades de dispersión, $P(E_o)$ [Abakumov et al., 1978]:

$$P(E_o) = \langle P(E_k) \rangle = \frac{\int_0^{r_m} P(E_k) r^2 dr}{\int_0^{r_A} r^2 dr} \quad (11)$$

considerando $r_A = (N_D^+)^{-1/3}$ como la semidistancia media entre impurezas en una muestra con una distribución aleatoria de concentración N_D^+ , tal y como se admite en las muestras reales [Abakumov et al., 1978] [Reggiani et al., 1989,1991] a efectos de potenciales aunque tenemos una distancia real entre las impurezas aleatoriamente distribuidas de $(2\pi N_D^+)^{-1/3}$ [Chandrasekhar,1943]; r_m viene determinado por la energía de la partícula: $r_m = r_A$ si $E_o > -E_o^f$ y $r_m = -r_A E_o^f / E_o$ si $-E^l < E_o < -E_o^f$, con $E_o^f = e^2 / 4\pi\epsilon r_A$.

Utilizando la variable adimensional $x = r/r_A$ la ecuación (11) queda:

$$\langle P(E_k) \rangle = 3 \int_0^{x_m} P(E_o + \frac{E_o^f}{x}) x^2 dx \quad (12)$$

donde ahora si $E_o > -E_o^f$, $x_m = 1$ y si $-E^l < E_o < -E_o^f$, $x_m = -E_o^f / E_o$.

Al trabajar con un promediado espacial es necesario calcular una energía efectiva que juegue el mismo papel que la energía E_o en el caso sin perturbar a la hora de calcular las probabilidades de dispersión y las energías de los fonones acústicos absorbidos o emitidos. Dicha energía efectiva debe incluir la perturbación que supone el potencial coulombiano que produce la impureza atractiva, es decir, buscamos un valor medio ϵ_m tal que nos permita expresar la ecuación (12) como:

$$3 \int_0^{x_m} P(E_o + \frac{E_o^f}{x}) x^2 dx = 3P(\epsilon_m) \int_0^{x_m} x^2 dx = P(\epsilon_m) x_m^3 \quad (13)$$

donde como se ve desaparece la dependencia espacial en la energía y podemos trabajar sólo con un valor eficaz de ésta. La ecuación (13) nos da la forma de calcular numéricamente este valor de ϵ_m , que resulta ser para los mecanismos de dispersión de fonones en el silicio:

$$\epsilon_m = \begin{cases} E_o + \frac{4}{3} E_o^f, & E_o > -E_o^f \\ \frac{|E_o|}{3}, & -E^1 < E_o < -E_o^f \end{cases} \quad (14)$$

Esta "traslación" en la energía es completamente equivalente al promediado espacial en toda la región que abarca la impureza. Por tanto de acuerdo con (13) y (14), las probabilidades $P(E_o)$ se calculan según:

$$P(E_o) = \begin{cases} P\left(E_o + \frac{4}{3} E_o^f\right), & E_o > -E_o^f \\ \left[\frac{-E_o^f}{E_o} \right]^3 P\left(\frac{|E_o|}{3}\right), & -E^1 < E_o < -E_o^f \end{cases} \quad (15)$$

En las figuras 2a, 2b y 2c se muestran las probabilidades de dispersión de los distintos mecanismos inelásticos de la red para distintos valores de la concentración de donadores. La representación incluye la zona de energía correspondiente a los estados ligados excitados del potencial coulombiano. Como se puede apreciar aparece una probabilidad no nula de los distintos mecanismos en esa zona de energías negativas. También se observa el crecimiento de dichas probabilidades con la concentración de donadores.

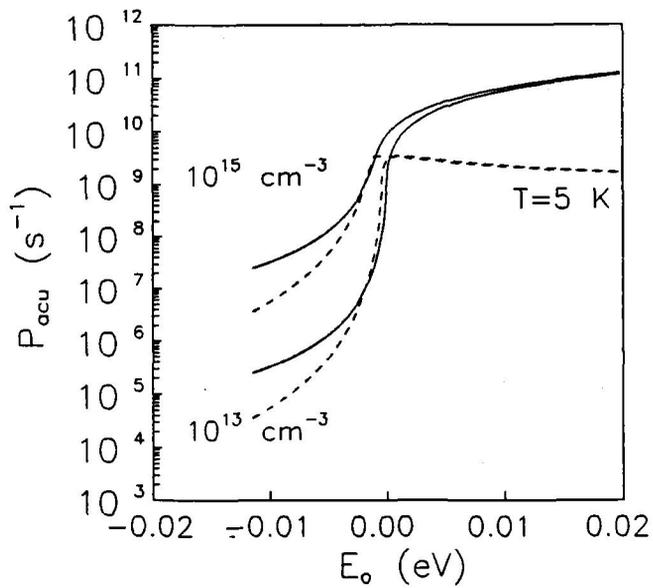


Figura 2a.- Probabilidades de absorción (línea discontinua) y de emisión (continua) de fonones acústicos en función de la energía total E_o , a 5 K, de acuerdo con el promediado espacial, para varias concentraciones de impurezas básicas ionizadas.

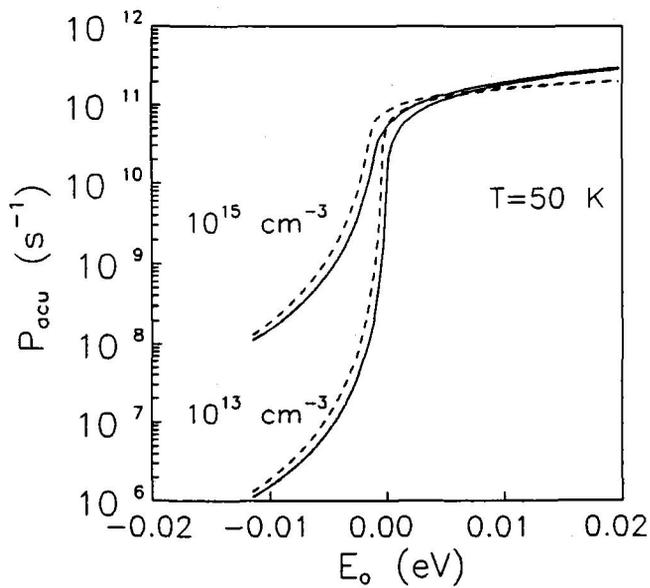


Figura 2b.- Probabilidades de absorción (trazo discontinuo) y de emisión (trazo continuo) de fonones acústicos en función de la energía, a 50 K, de acuerdo con el promediado espacial, para varias concentraciones de impurezas básicas ionizadas.

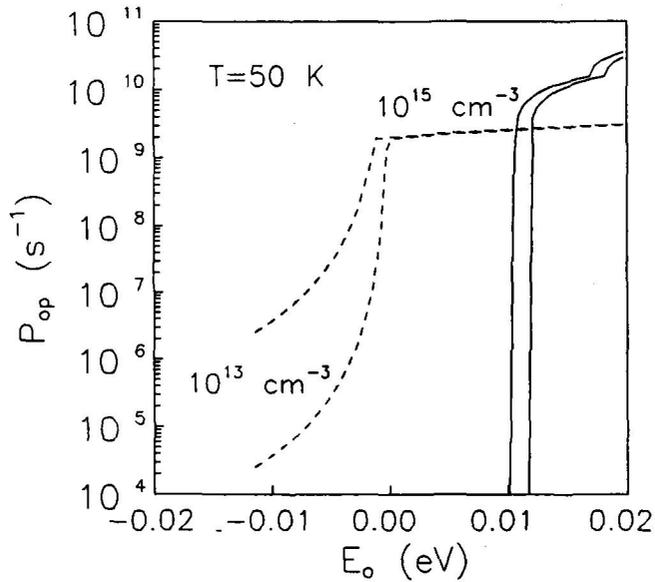


Figura 2c.- Probabilidades de absorción (línea discontinua) y de emisión (línea continua) de fonones ópticos en función de la energía, a 50 K, de acuerdo con el promediado espacial, para varias concentraciones de impurezas básicas ionizadas.

En cuanto al cálculo de las energías de los fonones acústicos, necesitamos conocer la energía de la partícula promediada a toda la impureza, si $E_o > -E_o^f$ se realiza la misma traslación que en el caso anterior, mientras que si $-E^1 < E_o < -E_o^f$ y para prohibir los fonones de energías que bajen al electrón del mínimo permitido para esta energía de la partícula, E^1 , se ha tomado una traslación de $(E_o + E^1)/3$. Estas energías promedio se utilizan para calcular las energías de los fonones según el tratamiento estándar [Jacoboni y Reggiani, 1983].

De esta forma sólo nos quedamos con la dependencia energética para el cálculo de las probabilidades de dispersión y de las energías de los fonones acústicos emitidos o absorbidos en dichas transiciones.

Por tanto, dentro de este contexto se introduce un electrón con energía inicial la

energía térmica correspondiente a la temperatura de simulación y se le permite evolucionar durante un número de dispersiones en el material perfecto antes de introducir los estados asociados a la impureza, para así evitar la posible dependencia con las condiciones iniciales. A continuación, se permite la captura, es decir, el electrón puede evolucionar tanto por la banda como en los estados ligados de acuerdo con las probabilidades definidas en (15). En el momento en que se considera capturado se detiene la simulación para ese electrón. Precisamente, un elemento importante de la simulación consiste en determinar cuando se considera capturado al electrón, es decir, definir adecuadamente el tiempo de captura.

Este tiempo de captura, τ_c , se ha definido como el tiempo que pasa el portador en la banda dividido entre el número de transiciones hacia la región de estados ligados [Reggiani et al., 1989]. Estas transiciones se pueden tener en cuenta de dos maneras, lo que implica definir dos tiempos de captura, τ_{c1} y τ_{c2} . Todas las que se realizan a la región negativa de energía, con lo que tendremos τ_{c1} , o sólo las que produzcan una incursión del electrón hacia regiones de energía por debajo de un cierto nivel E_{corte} , siendo E_{corte} una energía de corte situada un $K_B T$ por debajo de la banda de conducción, en este caso tendremos un tiempo τ_{c2} . Con esta definición τ_{c2} será mayor o a lo sumo igual a τ_{c1} .

Este procedimiento se repite para un número de electrones lo suficientemente alto para que se cumpla el principio ergódico, calculando el valor de las magnitudes de interés así como su valor medio para todos los electrones. En concreto, como resultado de la simulación se obtienen dos magnitudes: los tiempos de captura promedio, τ_{c1} y τ_{c2} , y la velocidad térmica media $\langle v \rangle$, a partir de las cuales calcularemos las secciones eficaces de captura. Dado el esquema con el que representamos el fenómeno de captura en la simulación por Monte Carlo, en todo momento tenemos un electrón por impureza ionizada. El tiempo de captura según Shockley, Read y Hall de una muestra con una concentración de impurezas ionizadas N_D^+ es:

$$\tau_c = \frac{1}{c_n N_D^+} \quad (16)$$

donde c_n es el coeficiente de captura de electrones, y sabiendo que

$$\sigma_n = \frac{c_n}{\langle v \rangle} \quad (17)$$

la sección eficaz promedio, σ_c , se calcula teniendo en cuenta (17):

$$\sigma_c = \frac{1}{\tau_c N_D^+ \langle v \rangle} \quad (18)$$

Como consecuencia de la consideración de dos tiempos de captura numéricos tenemos también dos secciones eficaces, σ_{c1} y σ_{c2} . Los trabajos realizados hasta ahora [Reggiani et al., 1989, 1993] no se han podido decantar por una sección eficaz u otra, sosteniendo que la sección eficaz medida en el laboratorio mantiene una dependencia intermedia entre σ_{c1} y σ_{c2} , como realmente muestran los datos experimentales. Sin embargo, como mostraremos a continuación, si en lugar de trabajar sólo con el valor medio del tiempo de captura τ_c obtenido en la simulación se hace un estudio estadístico de esta magnitud [Varani et al., 1993] se puede sacar valiosa información sobre el proceso de captura y conseguir un ajuste único entre la sección eficaz de captura experimental y la obtenida mediante este procedimiento numérico y, por tanto, obtener una definición única para el tiempo de captura.

II.4.2.- Comportamiento de la sección eficaz de captura con la concentración de impurezas poco profundas.

Una vez visto como se introduce el mecanismo de captura por cascada en la

simulación por Monte Carlo, vamos a aplicarlo al objeto de este trabajo: el cálculo de la sección eficaz de captura y el estudio de su dependencia con variables características de una muestra semiconductor.

Al obtener numéricamente las secciones eficaces de captura, se observa una considerable dependencia con la concentración de impurezas poco profundas, más acusada a muy bajas temperaturas, como se observa en la figura 3. En esta figura, se representan las secciones eficaces σ_{c1} (trazo continuo) y σ_{c2} (trazo discontinuo) para distintas concentraciones en función de la temperatura.

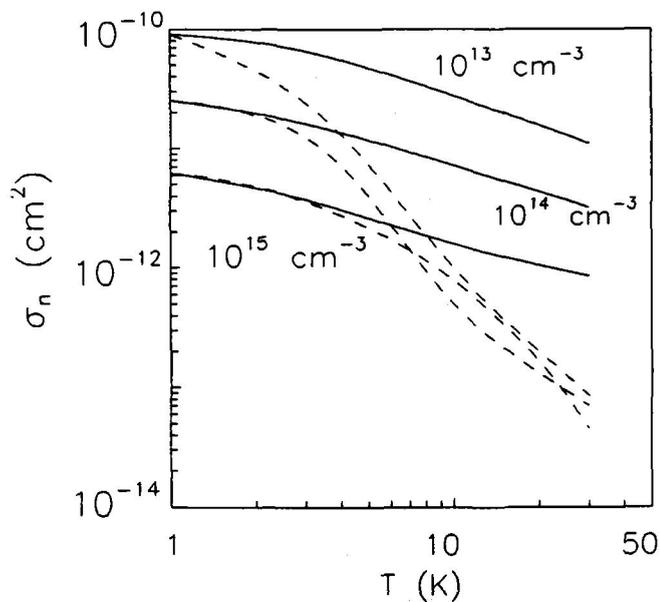


Figura 3.- Secciones eficaces de captura por cascada para varias concentraciones de impurezas ionizadas. Los trazos continuos corresponden a una energía de corte 0 y los discontinuos a $-K_B T$.

Por lo que respecta a los datos experimentales, no se ha observado dependencia con la concentración de impurezas poco profundas. Con el fin de explicar esta discrepancia se introdujo en la simulación el apantallamiento por otras cargas presentes en la red. Para ello se utilizó el potencial coulombiano apantallado clásico, $U_{ap}(r)$, con el

parámetro libre de la longitud de apantallamiento, λ :

$$U_{ap}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r} \quad (19)$$

Sin embargo no se obtuvo mejoría en la dependencia de σ con la concentración de impurezas introduciendo las longitudes de apantallamiento, λ , estimadas teóricamente [Kane, 1963].

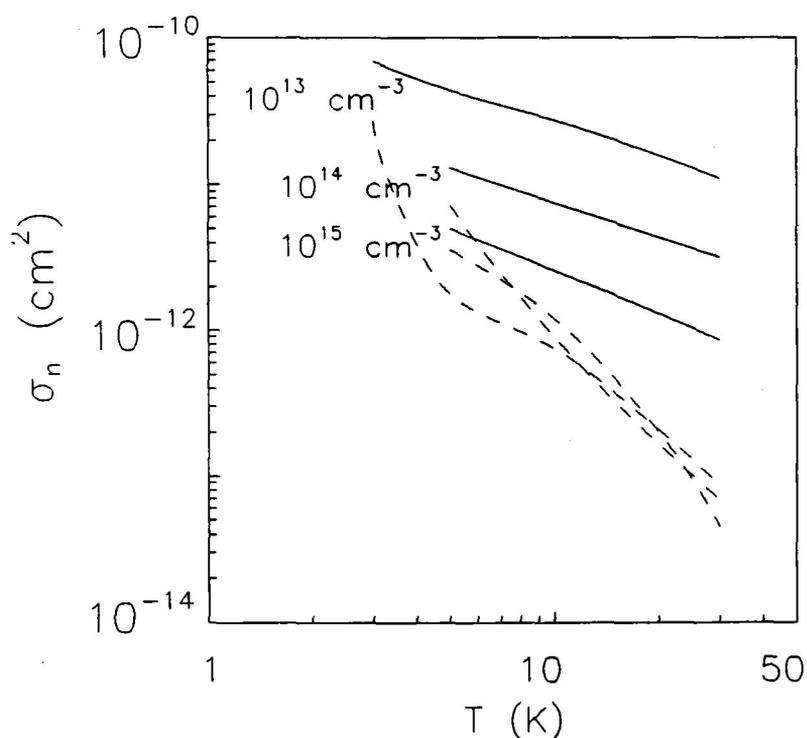


Figura 4.- Secciones eficaces de captura por cascada, corregidas con el nuevo fondo de la banda de conducción, para varias concentraciones de impurezas ionizadas. Los trazos continuos corresponden a una energía de corte de 0 y los discontinuos a $-K_B T$.

Otra explicación se encuentra en los tiempos tan cortos de captura que se obtienen a muy bajas temperaturas. Realmente uno de los problemas intrínsecos de este método

es el número tan pequeño de dispersiones ocurridas desde que se activa el mecanismo de captura para cada electrón hasta que resulta capturado. En las simulaciones se han obtenido un número comparable de dispersiones en todo el rango de N_D^+ (10^{13} - 10^{15} cm^{-3}) y realmente deberían haberse obtenido diferencias de un orden de magnitud por cada cambio de orden de magnitud en N_D^+ si se quiere ajustar con los datos experimentales. En concreto a 2 K de temperatura, para $N_D^+ = 10^{13}$ cm^{-3} la mayoría de capturas se producen con menos de 5 dispersiones. Aumentando N_D^+ en un orden de magnitud implicaría un número de dispersiones menor de la unidad. Por ello este procedimiento obtiene los mejores resultados para concentraciones bajas de impurezas (del orden de 10^{13} cm^{-3}).

Para corregir este error, intrínseco al procedimiento, debemos incluir modificaciones en la energía inicial de los electrones. Estas modificaciones deben tener en cuenta el solapamiento de estados excitados de mayor energía de impurezas vecinas, lo que provoca un banda de estados adyacente al fondo de la banda de conducción, E_c . En realidad habría que trabajar con un fondo de la banda de conducción efectivo, E_{ceff} , que marque el límite inferior del conjunto formado por la banda de conducción y esa banda debido a las impurezas poco profundas. Obviamente la anchura de la banda por impurezas crecerá a medida que aumenta la concentración de las mismas. De acuerdo con el esquema en energías mostrado en la figura 1, hemos definido ese fondo de la banda de conducción efectivo en

$$E_{ceff} = E_o^f \quad (20)$$

Por tanto, la energía inicial que se impone a los electrones en la simulación viene reducida por E_o^f . Por esta razón, no ha sido posible obtener datos sobre la sección eficaz de captura a muy bajas temperaturas con altas concentración de donadores ya que en estos casos el electrón penetra inicialmente en la región negativa de energías sin pasar por

estados con energía positiva. Sin embargo, como se muestra en la figura 4, con esta modificación se consiguen unos resultados menos dependientes de la concentración. Como se puede observar, los resultados correspondientes a la menor concentración engloban a los de las concentraciones superiores. De todas formas, cuando realicemos el estudio estadístico del tiempo de captura eliminaremos esta pinza donde quedan comprendidos los resultados experimentales y suprimiremos toda dependencia de la sección eficaz de captura con la concentración de impurezas ionizadas.

II.4.3.- Influencia de las transiciones no acústicas.

Antes de comparar los resultados de este método con medidas experimentales, vamos a acabar de presentarlo haciendo un comentario sobre la influencia de los distintos mecanismos de dispersión utilizados en el mismo. Como se indicó en el capítulo anterior, existe una controversia sobre la importancia de las transiciones no acústicas en el fenómeno de captura mediante el proceso de cascada. Para esclarecer este asunto, se calcularon los valores de las secciones eficaces de captura térmica por cascada a temperaturas altas incluyendo, por un lado todos los mecanismos de dispersión, y por otro eliminando las transiciones no acústicas.

En la figura 5 se representan las secciones eficaces de captura calculadas para una concentración $N_D^+ = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ en el rango de temperaturas entre 100 K y 250 K. La curva en trazo continuo corresponde a las simulaciones en las que se permiten las transiciones entre la zona positiva (banda) y la negativa (cuasi-continuo de estados ligados) mediante cualquier mecanismo. Las de trazo discontinuo son los resultados prohibiendo las transiciones no acústicas entre la región negativa de energías y la positiva. Como puede observarse en esa figura, la dependencia con la temperatura se ve fuertemente modificada con esta ausencia, sólo a bajas temperaturas, como cabía esperar, coinciden las curvas

ya que las transiciones acústicas son las que tienen mayor peso. Más adelante, cuando se realicen los ajustes de los resultados numéricos y los datos experimentales disponibles para la captura en dos etapas, se comprobará que es necesario introducir las transiciones no acústicas para obtener buenos ajustes.

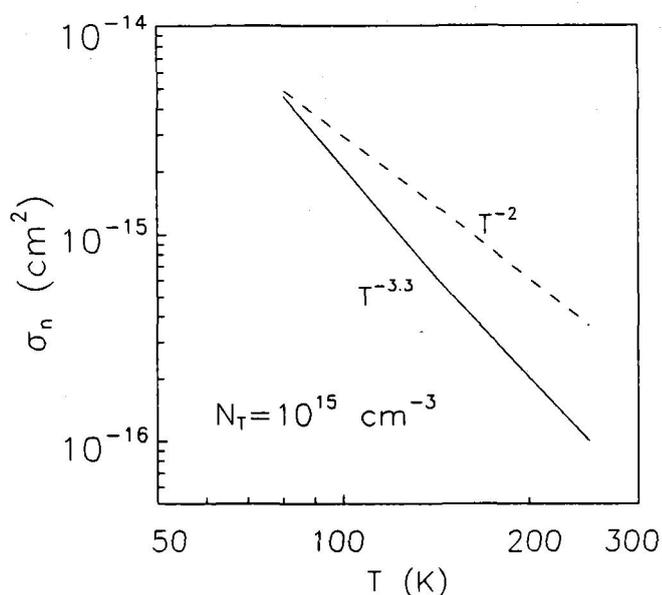


Figura 5.- Secciones eficaces de captura obtenidas por el modelo de cascada en dos etapas en función de la temperatura. La curva continua se ha obtenido permitiendo todas las transiciones en la captura por cascada, mientras que la discontinua prohíbe las no acústicas.

II.4.4. Comparación con los resultados experimentales.

En este apartado compararemos los valores numéricos de las secciones eficaces de captura térmica con los medidos experimentalmente.

Adoptando la misma notación que en los apartados anteriores, en la figura 6 se representan las secciones eficaces de captura térmica de electrones calculadas numéricamente y las obtenidas experimentalmente halladas en la literatura referentes al fósforo, arsénico y antimonio, todos ellos cargados positivamente antes de capturar un electrón de la banda de conducción. Los cálculos numéricos se realizaron para una concentración de donadores ionizados $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

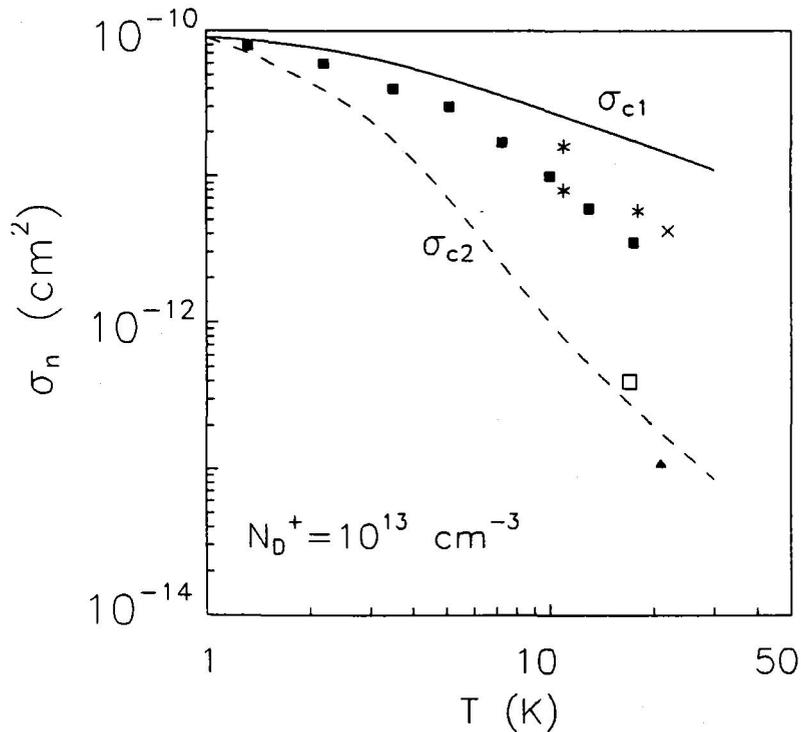


Figura 6.- Secciones eficaces de captura promedio de electrones, por parte de impurezas coulombianas atractivas en silicio tipo n en función de la temperatura. Las curvas numéricas se han obtenido para una concentración de donadores ionizados $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. La línea continua y la discontinua se refieren a σ_{c1} y σ_{c2} , respectivamente, obtenidas para una energía de corte $E_c = -K_B T$. Los símbolos representan los datos experimentales para varias impurezas donadoras: Si:P⁺, \blacksquare [Norton et al., 1973], \square [Sacks y Nordbryhn, 1979], \blacktriangle [Rosencher et al., 1984], Si:As⁺, * [Norton et al., 1973]; Si:Sb⁺, \times [Norton et al., 1973].

Como puede observarse en la gráfica, casi la totalidad de datos experimentales se sitúan entre las dos curvas teóricas, por lo que las medidas experimentales parecen reflejar una situación intermedia entre ambos casos. También se muestra como σ_{c2} es sistemáticamente menor que σ_{c1} , exhibiendo un decaimiento más pronunciado con la temperatura. De acuerdo con este procedimiento, estos resultados reflejan el diferente papel que juegan los estados excitados en la determinación de las secciones eficaces promedio. Se puede extraer como consecuencia que los estados con energía de ionización inferior a $K_B T$ son los que tienen mayor importancia a la hora de la captura por el proceso de cascada.

A la vista de las limitaciones para definir unívocamente un tiempo de captura, nos planteamos la necesidad de un estudio con mayor profundidad del fenómeno de captura por cascada. Por esta razón, hemos realizado un estudio estadístico del tiempo de captura promedio para silicio dopado con impurezas donadoras poco profundas. Este análisis se desarrollará a continuación, y en él se definirá el tiempo de captura que permitirá el ajuste unívoco de los datos experimentales de la figura 6.

II.4.5 Estadística de la captura por cascada de centros atractivos coulombianos.

A la hora de obtener mayor información sobre el proceso de captura por cascada, y dada la naturaleza probabilística del método de Monte Carlo hemos desarrollado en este epígrafe un estudio de la estadística del tiempo de captura obtenido para un conjunto amplio de electrones. En un trabajo previo relacionado con el ruido electrónico generado por emisión y captura de trampas [Varani et al., 1993] se ha encontrado que la distribución de tiempos de captura es no exponencial. Aquí, pretendemos realizar,

mediante nuestro procedimiento numérico, un análisis pormenorizado del fenómeno para conseguir adoptar un tiempo característico de captura que permita el ajuste con las medidas experimentales.

Este análisis requiere el manejo de gran número de datos. Por esta razón, hemos simulado la captura de más de 100.000 electrones para cada temperatura y concentración de impurezas donadoras estudiadas analizándose las distribuciones de electrones en función de estas variables para obtener su interpretación física.

En la figura 7 se puede observar el histograma del número de electrones, N_e , en función del tiempo medio pasado por el electrón en la región de energías positivas, que se definió como τ_{c1} , a una temperatura de 30 K para diferentes concentraciones de impurezas donadoras poco profundas. En este caso, la simulación de cada electrón se detiene cuando cae por debajo de una energía $K_B T$ por debajo del mínimo de la banda de conducción. En dicha figura N_e exhibe un doble decaimiento exponencial con dos constantes de tiempo distintas, lo que contradice la exponencialidad simple predicha por la estadística de Shockley y Read para este tipo de procesos. A la constante de tiempo rápida la denominaremos τ_r , y a la lenta τ_l . A continuación analizaremos el significado físico de cada una de estas constantes de tiempo.

En esta figura también se observa que la mayoría de las capturas suceden en tiempos cortos. Este hecho se atribuye al fuerte acoplamiento entre el proceso de captura por cascada y los mecanismos de dispersión de la red cerca del fondo de la banda de conducción. Debido a esto, cuando el electrón realiza una transición entre los estados ligados y la banda de conducción tiene una gran probabilidad de recombinarse de nuevo antes de evolucionar por la región de energías positivas. Este acoplamiento es consecuencia de la dependencia energética de los mecanismos de dispersión tal y como muestra la figura 8. En dicha figura se representan las probabilidades de emisión y

absorción de fonones acústicos a una temperatura de 5 K en la región de energías próximas a 0 eV. En la figura se indica con una doble flecha la región donde son muy probables los fenómenos de generación y captura consecutivas. Así, a energías inmediatamente menores que 0 eV domina el proceso de absorción, es decir, hay gran probabilidad de que el portador gane energía y vuelva a sobrepasar el nivel 0 eV. A energías superiores a 0 eV el electrón tiene mucha probabilidad de emitir un fonón cayendo de nuevo en los estados excitados de energía negativa.

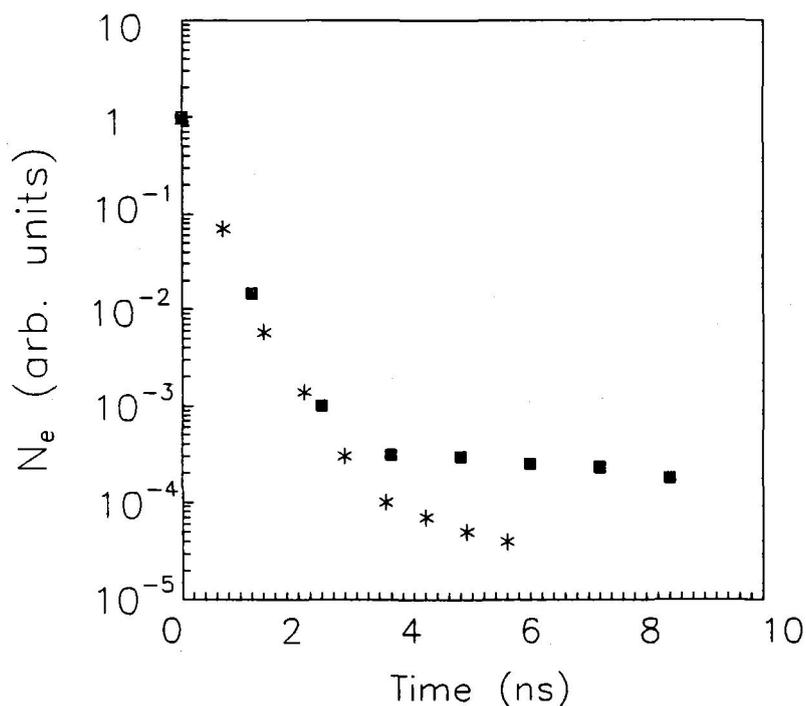


Figura 7.- Histogramas del número de electrones, N_e , en función del tiempo de captura medio obtenido mediante simulación por Monte Carlo a 30 K de temperatura. Los asteriscos muestran el caso con una concentración de impurezas ionizadas donadoras $N_D^+ = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y los cuadros corresponden a $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

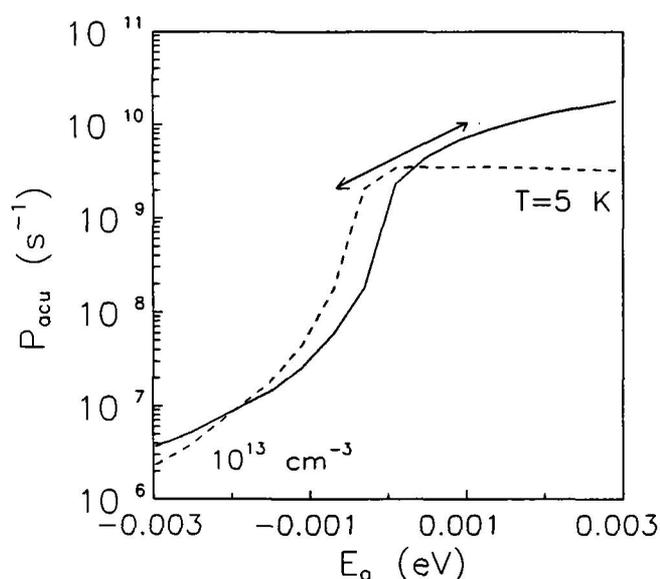


Figura 8.- Probabilidades de emisión (línea continua) y absorción (línea discontinua) de fonones acústicos alrededor del fondo de la banda de conducción a una temperatura de 5 K y con una concentración de impurezas donadoras ionizadas de $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

II.4.5.1. Constante de tiempo rápida, τ_r .

Para interpretar cada una de las constantes de tiempo vamos a estudiar su comportamiento en función de parámetros del semiconductor. Uno de ellos es la concentración de impurezas donadoras. El análisis con este parámetro tiene como objetivo determinar si estas constantes siguen el comportamiento de los datos experimentales. En la figura 9 se puede observar la poca dependencia de la constante de tiempo rápida, que notaremos como τ_r , con la concentración de impurezas poco profundas donadoras en el rango 10^{13} a 10^{16} cm^{-3} para varias temperaturas. En esta figura se observa un ligero decrecimiento de la constante de tiempo con la concentración de donadores, que da cuenta de la influencia de este parámetro en el promediado energético de las probabilidades de dispersión y que perturban la distribución de energías del electrón. De todos modos, este

comportamiento no concuerda con la dependencia experimental del tiempo de captura [Norton et al., 1973].

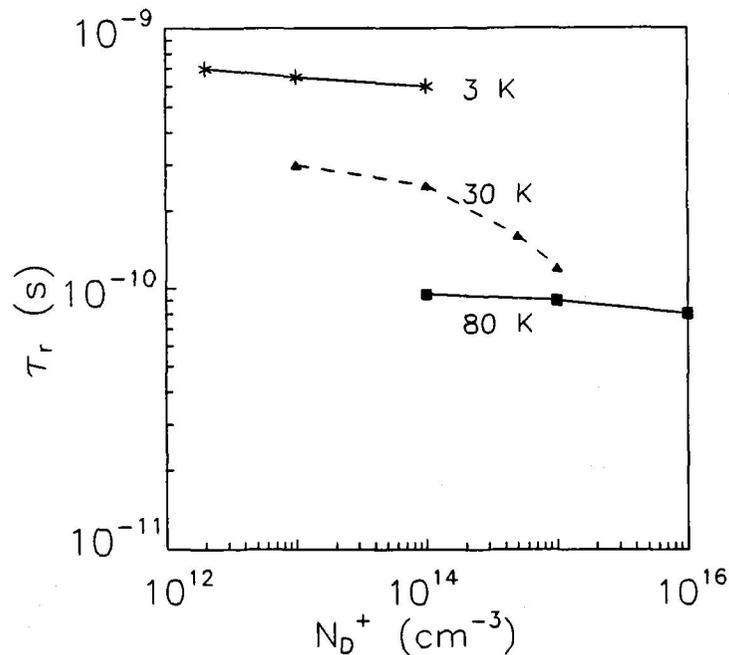


Figura 9.- Dependencia con la concentración ionizada de donadores, N_D^+ , de la constante de tiempo rápida, τ_r , extraída de histogramas como el de la figura 7. Los diferentes símbolos muestran el comportamiento para varias temperaturas: 3 K, 30 K y 80 K.

La explicación de la relación entre los mecanismos de dispersión y la constante de tiempo τ_r , se manifiesta principalmente en el estudio de la dependencia con el otro parámetro de interés en este caso: la temperatura. Como se ha demostrado para huecos en silicio tipo p [Varani et al., 1993], y en nuestro caso para electrones en Si tipo n el comportamiento con la temperatura de τ_r se ajusta bien al tiempo de relajación de la energía extrapolado a campo eléctrico nulo, $\tau_c(0)$ [Seeger, 1991]

$$\tau_{\epsilon}(0) = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{\langle \epsilon \rangle^{-\frac{3}{2}} K_B T}{e \langle v_d \rangle E} \quad (21)$$

donde $\langle \epsilon \rangle$ es la energía media del electrón, $\langle v_d \rangle$ es la velocidad media de deriva y E es el campo eléctrico externo aplicado. En la figura 10, se muestran la dependencia térmica de la constante rápida, τ_r , obtenida de los histogramas de la distribución de tiempos de captura (símbolos), en comparación con el tiempo de relajación de la energía τ_{ϵ} , dado por la ecuación (21) (línea). Se puede comprobar el buen acuerdo entre ambas cantidades en todo el rango de temperaturas analizado.

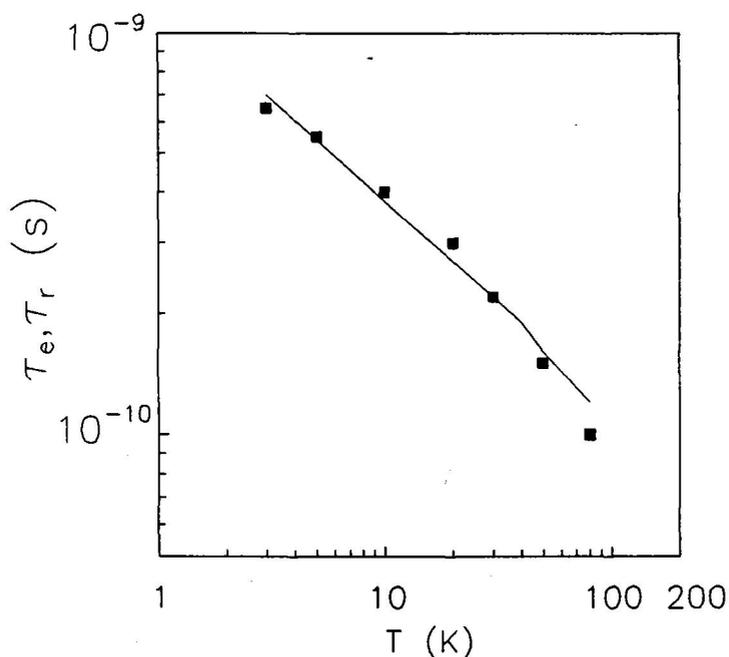


Figura 10.- Constante de tiempo rápida, τ_r , asociada a la distribución de electrones en función de la temperatura calculada mediante nuestra simulación por Monte Carlo (símbolos). La línea muestra la dependencia del tiempo de relajación de la energía, τ_{ϵ} , también en el límite de campo nulo.

El tiempo de relajación energético mide el tiempo medio que necesita un portador para ceder a la red el exceso de energía que le proporciona el campo eléctrico aplicado respecto a la energía térmica. La justificación de esta similitud entre ambos tiempos estriba en que en este caso la energía que proporciona al electrón la perturbación coulombiana también es intercambiada con la red de la misma forma que hubiese sido ganada por un campo eléctrico, es decir, a través de las dispersiones con la red. Así pues, al ser la pérdida de energía debida a los mismos mecanismos, el tiempo característico de estas capturas y emisiones rápidas coincide con el de la relajación de la energía.

II.4.5.2. Constante de tiempo lenta, τ_1 .

La constante de tiempo más lenta, que notaremos como τ_1 , es la que nos ha proporcionado mayor información a la hora de interpretar las medidas de la sección eficaz y, en concreto, el análisis de sus dependencias con la temperatura y concentración de impurezas poco profundas.

Así, en la figura 11 se representa τ_1 en función de la concentración de donadores ionizados, N_D^+ , para varias temperaturas. Como se puede observar, y se ha reflejado en dicha gráfica, τ_1 es inversamente proporcional a dicha concentración, es decir que $1/\tau_1 N_D^+$ es independiente de la concentración de donadores como se mide experimentalmente para los coeficientes de captura [Norton et al., 1973]. En la figura 12, se muestra la dependencia térmica de τ_1^{-1} para una concentración de donadores $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. De aquí, también podemos concluir que este comportamiento es muy parecido al del coeficiente de captura experimental con un mayor decrecimiento conforme aumenta la temperatura.

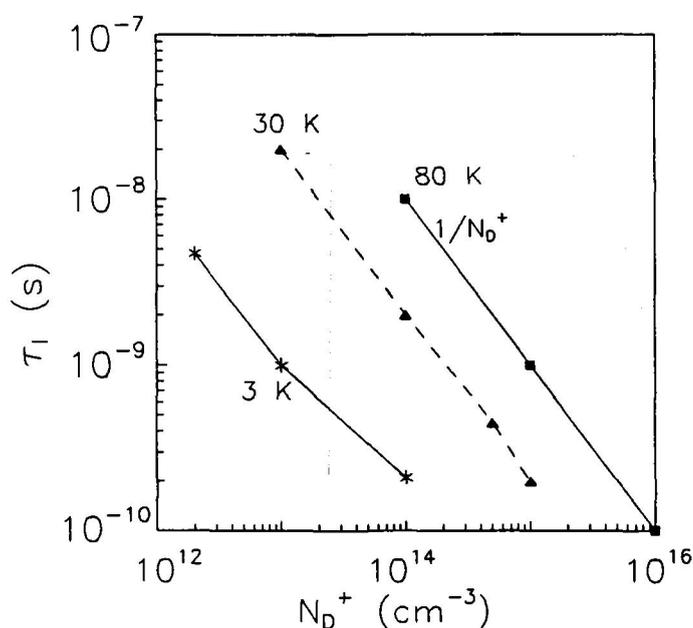


Figura 11.- Constante de tiempo lenta, τ_1 , asociada a la distribución de electrones con distintos tiempos de captura en función de la concentración de impurezas ionizadas, obtenida por simulación a $T=3$ K (asteriscos), $T=30$ K (triángulos), y $T=80$ K (cuadros).

De acuerdo con las dependencias de los tiempos de captura rápido y lento con la temperatura y N_D^+ , en principio la sección eficaz medida en el laboratorio debería ser una combinación de ambos tiempos. Sin embargo, para las medidas que tradicionalmente se utilizan para comparar con los estudios teóricos de captura de electrones por donadores [Norton y Levinstein, 1972], [Norton et al., 1973] se observa que sólo pudieron medir vidas medias del orden del nanosegundo. Como se observa en la figura 10, para todas las temperaturas, la constante de tiempo rápida τ_r es inferior al nanosegundo, con lo que difícilmente pudo ser detectable con su montaje experimental. Parece claro, por tanto, que el tiempo de captura realmente medido, al menos en ese experimento, fue el correspondiente a la constante lenta τ_1 . Si se dispusiera de aparatos de medida más precisos (capaces de medir tiempos de respuesta de décimas de nanosegundos) sería posible obtener dicha combinación de tiempos.

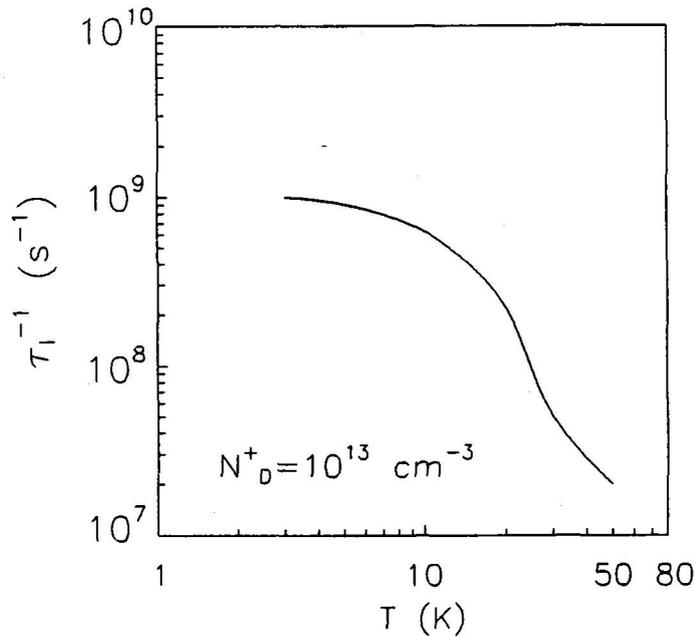


Figura 12.- Inversa de la constante de tiempo lenta, τ_1 , en función de la temperatura obtenida por el método de Monte Carlo en una muestra tipo n de concentración de impurezas poco profundas ionizadas de 10^{13} cm^{-3} .

Por lo tanto, si redefinimos la sección eficaz de captura de electrones con el tiempo de captura $\tau_c = \tau_1$ resulta:

$$\sigma_n = \frac{1}{\tau_1 \langle v \rangle N_D^+} \quad (22)$$

La dependencia térmica de la sección eficaz de captura definida en la ecuación (22) se muestra en la figura 13. Las simulaciones por Monte Carlo se realizaron para una concentración de donadores ionizados $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (línea continua). Ésta se compara con los resultados experimentales disponibles en la bibliografía correspondientes a impurezas donadoras poco profundas (P^+ , As^+ y Sb^+) en silicio (símbolos). De la figura se puede observar un buen acuerdo con la mayoría de los resultados experimentales. Además, se reproduce con mucha precisión la doble dependencia térmica obtenida teóricamente por Abakumov et al. [Abakumov et al., 1978] en su estudio analítico sobre

la sección eficaz de captura por cascada comentado en el capítulo anterior y definidas en la figura por las dependencias de T^{-1} a bajas temperaturas y de T^{-3} para temperaturas mayores (líneas discontinuas).

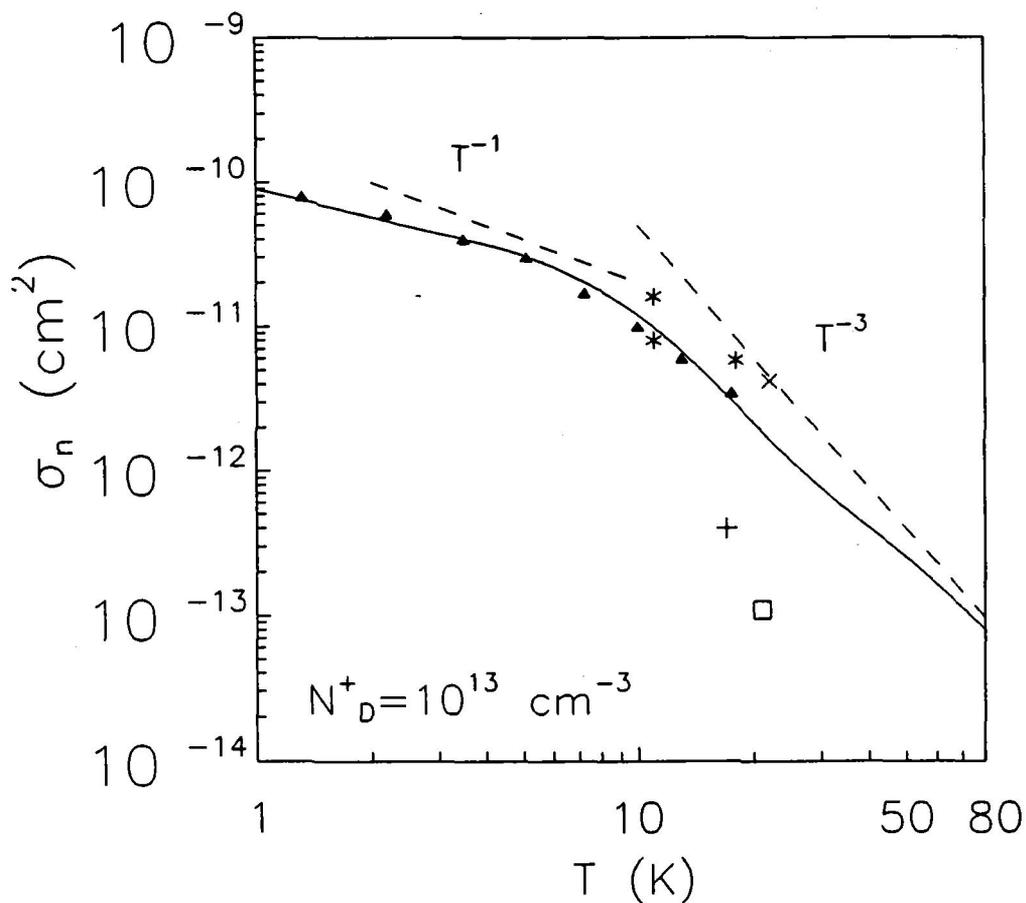


Figura 13.- Secciones eficaces de captura térmica de impurezas ionizadas en silicio tipo n en equilibrio en función de la temperatura. La concentración de donadores fue $N_D^+ = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. La línea continua representa la curva obtenida por simulación a partir de los tiempos τ_1 de histogramas como los de la figura 7. Los símbolos representan los datos experimentales de la figura 6.

En conclusión, nuestro análisis estadístico de la captura de centros poco profundos nos a permitido separar las dos constantes de tiempo asociadas al proceso de captura. La más rápida se ha mostrado provenir del acoplamiento de este proceso con los mecanismos

de la red a través del tiempo de relajación de la energía. La constante más lenta, se ha identificado como el tiempo de captura medido experimentalmente. Todo esto nos ha permitido mejorar el ajuste del comportamiento térmico de la sección eficaz de captura de electrones teórico y experimental. Todo el tratamiento aplicado a los centro atractivos poco profundos mencionado en el apartado anterior, junto con el análisis estadístico de los tiempos de captura promedio proporcionan una herramienta única para interpretar correctamente el proceso de captura por cascada.

El resultado final de este procedimiento es la inclusión de un proceso de captura en la simulación por Monte Carlo del transporte en un semiconductor, atendiendo solamente a los fundamentos físicos primarios del problema de un potencial ligante en el seno de material con partículas susceptibles de ser atrapadas. En esta simulación no ha sido necesario calcular la denominada probabilidad de "sticking", magnitud de muy engorroso y, a veces, oscuro cálculo, motivo de controversia entre los autores de trabajos teóricos sobre este asunto. Esto es posible ya que los fenómenos de captura y remisión se tienen en cuenta en el proceso de la simulación. Además, mediante el manejo único de una energía efectiva, hemos salvados algunos de los inconvenientes de los trabajos previos sobre simulación con Monte Carlo.

Para obtener una imagen completa del proceso de captura por parte de impurezas atractivas queda por incluir el último paso del electrón desde los estados excitados al estado fundamental de la impureza. Como se ha explicado en el capítulo anterior, el candidato para esta transición es el mecanismo de emisión multifonón, conformando el modelo de captura en dos etapas. Sin embargo, este último paso no es necesario incluirlo a tan bajas temperaturas ya que el proceso de cascada es dominante el fenómeno de captura a dichas temperaturas [Gibbs et al.,1977].

II.5.- SIMULACIÓN DEL MECANISMO DE EMISIÓN MULTIFONÓN.

II.5.1.- Procedimiento General.

Una vez detallado el procedimiento para implementar el mecanismo de captura por cascada mediante el método de Monte Carlo, en este apartado nos proponemos continuar con el estudio de la captura pero ahora en centros neutros, mediante la simulación del mecanismo de captura por emisión multifonón. En el capítulo anterior se estudió este mecanismo y se resumió en las probabilidades de transición multifonón, tanto para energías nulas como dependiente de la energía, denominadas $W^{\text{mph}}(\epsilon)$. Dichas probabilidades fueron obtenidas sin ninguna restricción espacial, es decir extendidas para todo el volumen V del cristal, magnitud que aparecía explícitamente en ambas expresiones finales. Para poder aplicar el mismo procedimiento que se ha usado para la captura por cascada, debemos restringir dichas probabilidades al espacio de configuración de una sola impureza.

Al simular la evolución de un electrón en el espacio correspondiente a una impureza, y si tenemos una densidad de impurezas vacías N_T capaces de capturar un electrón, estamos con una concentración real de N_T electrones libres por unidad de volumen. Esto se traduce en sustituir el volumen V del cristal por el espacio promediado correspondiente a una impureza, V_I .

Procediendo de forma análoga al apartado anterior, para una concentración de centros profundos vacíos N_T , V_I tendrá un valor

$$V_I = r_A^3 = \frac{1}{N_T} \quad (23)$$

Con esta sustitución la relación entre la probabilidad de emisión multifonón restringida a una impureza, $\langle W^{mph}(\epsilon) \rangle$, y la general será:

$$\langle W^{mph}(\epsilon) \rangle = W^{mph}(\epsilon) V N_T \quad (24)$$

De acuerdo con el capítulo anterior, las probabilidades de emisión multifonón a introducir en la simulación por Monte Carlo del transporte en el semiconductor son:

- para el caso de la expresión obtenida desde la aproximación adiabática no condoniana y para electrones de baja energía para cualquier tipo de centros profundos en silicio y GaAs

$$\langle W_{Si, GaAs}^{mph}(0) \rangle = \frac{36\pi^2 \omega S^{p_0} e^{-S} (v_T a^*)^3 C_0 N_T [0.26 + (p_0 - 1)0.18] (n+1)^{p_0} e^{-2nS}}{(p_0 - 1)!} \quad (25)$$

- para la expresión dependiente de la energía

$$\langle W^{mph}(\epsilon) \rangle = \langle W(\epsilon) \rangle (n+1)^p e^{-2nS}$$

$$\langle W_{Si}(\epsilon) \rangle = \frac{36\pi^2 \omega S^p e^{-S} C_0 (v_T a^*)^3 N_T}{(p-1)! [1 + (k v_T a^*)^{2.5}]^{0.7}} [0.26 + (p-1)0.18] \quad (26)$$

$$\langle W_{GaAs}(\epsilon) \rangle = \frac{36\pi^2 \omega S^p e^{-S} C_0 (v_T a^*)^3 N_T}{(p-1)! [1 + (k v_T a^*)^{2.5}]^{1.4}} [0.26 + (p-1)0.18]$$

Al utilizar las ecuaciones (25) y (26) se supone implícitamente que las impurezas están lo suficientemente alejadas entre sí como para despreciar toda influencia entre ellas a la hora de la captura. Esto supone que en la captura de un portador influye una sola impureza a la vez, sin solapamientos ni posible captura por parte de más de un centro a la vez.

Este estudio lo centramos en la captura de electrones de la banda de conducción por parte de centros profundos neutros tanto en Si como en GaAs. El electrón parte con energía inicial el valor térmico medio correspondiente a la temperatura de la red, y se le deja evolucionar siendo dispersado un cierto número de veces sin que se permita la captura, para evitar posibles dependencias con el estado inicial del portador. A continuación se activa el mecanismo de emisión multifonón introduciendo su probabilidad como un mecanismo más de dispersión en la simulación por Monte Carlo, y se almacena el tiempo que tarda el electrón en tener una emisión multifonón. En ese instante se supone el electrón capturado. Una vez acabada la simulación se obtienen la velocidad media en equilibrio, $\langle v \rangle$ y el tiempo de captura por electrón, τ_c . A partir de aquí, el esquema es como en la captura por cascada repitiendo el proceso de simulación para un número alto de electrones calculando los valores medios de ambas magnitudes, obteniéndose la sección eficaz de captura térmica media:

$$\sigma = \frac{1}{N_T \langle v \rangle \tau_c} \quad (27)$$

II.5.2.- Hipótesis sobre los parámetros característicos.

Sin embargo, existen algunas diferencias con la simulación del proceso de cascada, en concreto, los parámetros que caracterizan cada proceso. En el capítulo anterior, comentamos algunos puntos en donde no existe acuerdo unánime en relación con algunos parámetros que aparecen en las probabilidades de captura vía emisión multifonón. En este trabajo admitiremos algunas hipótesis sobre estos parámetros siempre desde el punto de vista de la simplicidad, aunque sin perder su significado físico. Las discrepancias surgen principalmente en tres aspectos:

1^a.- Aunque intuitivamente la introducción de una impureza en una red ideal puede introducir frecuencias y modos locales de vibración [Ridley, 1993], no hay evidencia experimental que pruebe, ni refute, definitivamente esta idea. La cuestión que se plantea es cuál es ese fonón que supondremos participante de la transición. En semiconductores polares, se han utilizado los polares ópticos para tal fin. En el estudio de centros en el GaAs, introduciremos el elemento de matriz calculado en el capítulo anterior con interacción polar y utilizaremos el fonón polar de energía 35 meV para calcular p . En el silicio, no hay tanto acuerdo en cuanto al fonón utilizado. Por ejemplo, Ridley [Ridley, 1993] menciona un fonón LO de 55 meV de energía. Otros usan promedios de energías de los fonones de mayor energía. En los resultados sobre fonones de Jacoboni y Reggiani [Jacoboni y Reggiani, 1983] se asigna una energía de 63 meV al fonón LO no polar en silicio, que es el fonón que nosotros utilizaremos para las simulaciones de captura en silicio.

En muchos trabajos teóricos sobre este tema se ha utilizado la energía del fonón casi como un parámetro libre, tomándose una frecuencia promedio de algunos fonones de la red como frecuencia a asignar a todos los fonones emitidos. Por ejemplo, en el caso de captura en el GaAs se han tomado valores desde 18 meV a 37 meV [Burt, 1979, 1981] [Morante et al., 1982a,b] [Pantelides, 1993]. Esta disparidad en el valor de este parámetro es fundamental ya que modifica a su vez el número de fonones, p , emitidos en el proceso. Como hemos mostrado, una variación en una unidad en p se traduce en una gran variación en la probabilidad resultante.

En conclusión, retomando la hipótesis de Henry y Lang [Henry y Lang, 1977], admitimos que se emiten fonones de la red de un sólo tipo [Lowther, 1980a,b]. Esto, aunque represente una aproximación, nos permitirá calcular otros parámetros relacionados con la energía de relajación implicada en el proceso, es decir, la energía de desplazamiento de Franck-Condon, $S\hbar\omega$.

2^a.- En cuanto al factor de Huang-Rhys, S , teóricamente su valor es de difícil determinación debido a la falta de conocimiento preciso del potencial y función de onda del estado ligado, aunque mediante medidas experimentales ópticas se puede calcular (a través de la energía de desplazamiento de Franck-Condon, $S\hbar\omega$, como indicamos en el capítulo anterior). Este factor representa una magnitud importante en la caracterización de los centros. Indica la fuerza del acoplamiento entre la impureza y la red: si S tiene un valor alto implica un fuerte acoplamiento, es decir, una fuerte distorsión de la red en la región circundante; si por el contrario la distorsión creada por la impureza es pequeña también lo es el factor de S asociado. Además, como demostraremos más adelante, el estado de carga del centro influye notablemente en el valor de S . Por tanto, un conocimiento preciso de dicho parámetro no sólo redundaría en poder calcular adecuadamente la probabilidad sino que se pueden extraer muchos datos acerca de la forma en que el centro se ubica en la red. De acuerdo con su importancia, uno de los objetivos de este trabajo será obtener este factor para aquellos centros en los que se conozcan medidas experimentales de la sección eficaz de captura térmica.

La obtención experimental o teórica del factor de Huang-Rhys para una impureza en concreto es una tarea difícil y, lo que usualmente se ha venido haciendo es dar relaciones generales entre S y las características del centro (profundidad energética, estado de carga, etc.) [Ridley, 1978b] [Stoneham, 1979]. Se dispone de datos de este factor para la captura de electrones del nivel aceptador del Pt en silicio donde se ha medido $S \approx 0.3$ [Mayo y Lowney, 1987, 1988], mientras que para el sistema GaAs:Cr²⁺ se ha obtenido el valor $S=3$ [Ridley, 1993]. Con estos datos y otros que mostraremos más adelante verificaremos la validez de las expresiones usadas para calcular la probabilidad multifonón, mediante ajuste de los resultados numéricos y los datos experimentales de la sección eficaz de captura. Una vez verificado nuestro método, lo utilizaremos para obtener los factores de Huang-Rhys, en aquellos casos donde no se encuentran disponibles por otros métodos.

3^a.- De acuerdo con los estudios de Jaros [Jaros, 1977] y Ridley, el radio de la función de onda del estado ligado es aproximadamente independiente de la impureza. En las expresiones (25) y (26) los radios efectivos para el Si y el GaAs son las cantidades $\nu_T a^*$ y que, como se puede observar, están elevadas al cubo. Esto indica que realmente son parámetros muy importantes a la hora de fijar la magnitud de la probabilidad de captura.

Siguiendo la mayoría de trabajos teóricos realizados hasta ahora [Ridley, 1978b] [Stoneham, 1979] [Morante et al., 1982a,b], hemos tomado como valores de estas magnitudes las que proporciona el modelo de defecto cuántico y la función delta. Para el silicio hemos tomado $a^* = 18.7 \text{ \AA}$ y $\nu_T = (0.032/E_T)^{1/2}$, siendo E_T la profundidad del nivel profundo en eV. Por ejemplo, para el Pt con $E_T = 0.231 \text{ eV}$ tenemos un radio efectivo de 7 \AA , mientras que para el Au con $E_T = 0.555 \text{ eV}$ queda $\nu_{Au} a^* = 4.5 \text{ \AA}$.

Análogamente, para los centros en GaAs hemos tomado

$$r_T = a^* \left(\frac{R_H^*}{E_T} \right)^{1/2} \quad (28)$$

donde para el GaAs $a^* = 103 \text{ \AA}$ y $R_H^* = 0.00543 \text{ eV}$. Para los centros que estudiaremos este radio está en torno a los 10 \AA . Esto permite unificar el tratamiento para muchos de los centros en distintos tipos de semiconductores.

En suma, podemos trabajar con las expresiones de las probabilidades de emisión multifonón sin parámetros libres ya que el valor de S es conocido para algunos casos. En las situaciones donde no conozca el valor de S nuestro procedimiento permite calcular tan importante magnitud como resultado de la comparación de las secciones eficaces simuladas y experimentales en función de la temperatura.

II.5.3.- Comportamiento de la probabilidad de captura.

Fijado por tanto, el tipo y frecuencia de los fonones participantes en la emisión multifonón, en este apartado analizaremos las dependencias de las probabilidades con otras características del sistema red-centro: la concentración de defectos, el factor de Huang-Rhys, la profundidad del nivel, la temperatura y la energía de los portadores.

La proporcionalidad entre las probabilidades de emisión multifonón y la concentración de centros, N_T , garantiza la independencia de la sección eficaz de captura respecto de este parámetro. Esto está de acuerdo con la suposición inicial de no interacción entre impurezas vecinas. Además esta proporcionalidad nos proporciona una ventaja: manejar un rango amplio de valores de N_T dentro del cual sabemos que el resultado va ser el mismo. La única limitación es que no podemos tomar N_T desproporcionadamente grandes (lo que redundaría en tiempos de computación menores) pues ello implicaría que la probabilidad de captura dejaría de ser despreciable respecto a las del resto de mecanismos de dispersión. Si ocurriera esto último, por ejemplo se vería falseado el dato de la velocidad térmica del portador obtenido de la simulación. En suma, conviene manejar rangos de N_T que produzcan probabilidades muy inferiores a las de dispersión por fonón, pero lo suficientemente altos como para que los tiempos de computación sean admisibles.

En la figuras 14a, 14b y 14c se muestran la dependencias térmicas de la probabilidad independiente de la energía, $\langle W^{mp}(0) \rangle$, para varios valores del factor de Huang-Rhys, cada una con un número de fonones emitidos, p , fijo. De estas gráficas se deduce que la dependencia térmica de la probabilidad de captura por emisión multifonón, en todo el rango de parámetros introducidos en la simulación, es débil en el caso del Si, mientras que para valores altos de p en GaAs sí se observa un fuerte crecimiento con la temperatura (Fig. 14c). Para valores bajos de p y S hay un débil crecimiento de dicha

magnitud con la temperatura. Este crecimiento se ve reducido conforme aumenta S para un p fijo. Esta tendencia se invierte, es decir, se observa un decrecimiento de la probabilidad con la temperatura para valores altos de S . Paralelamente a esto, podemos observar en cada gráfica la fuerte variación de la magnitud de la probabilidad al variar el factor S . En general, se obtiene una probabilidad mayor para valores mayores del factor de Huang-Rhys. Esta característica nos permitirá obtener con gran precisión este factor en los casos en que S se desconozca y sea un parámetro para el ajuste entre los resultados numéricos y los datos experimentales.

Para estudiar el efecto de la profundidad del nivel (a través del número de fonones emitidos, p), se representan en las figuras 15a y 15b las dependencias térmicas de la misma probabilidad, pero ahora variando el parámetro p , para dos valores fijos de S . En estas gráficas se puede observar un débil crecimiento con la temperatura para valores pequeños de S (Fig. 15a). Para acoplo electrón-fonón más fuerte (Fig. 15b), la tendencia con la temperatura depende del valor de p .

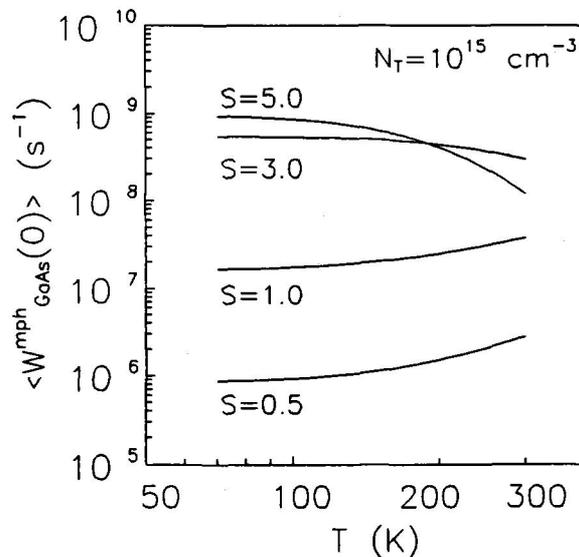


Figura 14a.- Probabilidades de emisión multifonón en función de la temperatura para una concentración de impurezas vacías de 10^{15} cm^{-3} . El parámetro p se ha mantenido constante con valor $p=5$ y $\hbar\omega=35 \text{ meV}$. En las distintas curvas el factor de Huang-Rhys vale 0.5, 1, 3 y 5.

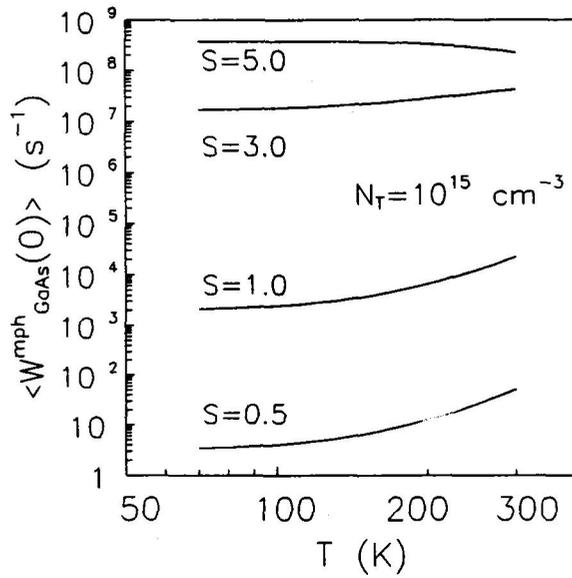


Figura 14b.- Probabilidades de emisión multifonón en función de la temperatura para una concentración de impurezas vacías de 10^{15} cm^{-3} . El parámetro p se ha mantenido constante con valor $p=10$, $\hbar\omega=35 \text{ meV}$. En las distintas curvas el factor de Huang-Rhys vale 0.5, 1, 3 y 5.

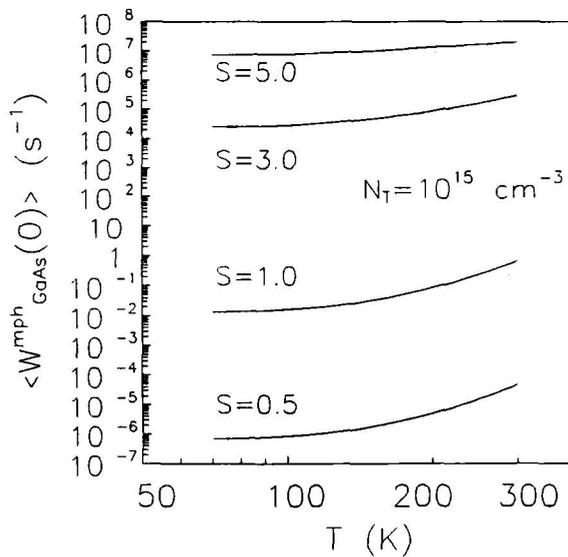


Figura 14c.- Probabilidades de emisión multifonón en función de la temperatura para una concentración de impurezas vacías de 10^{15} cm^{-3} . El parámetro p se ha mantenido constante con valor $p=15$, $\hbar\omega=35 \text{ meV}$. En las distintas curvas el factor de Huang-Rhys vale 0.5, 1, 3 y 5.

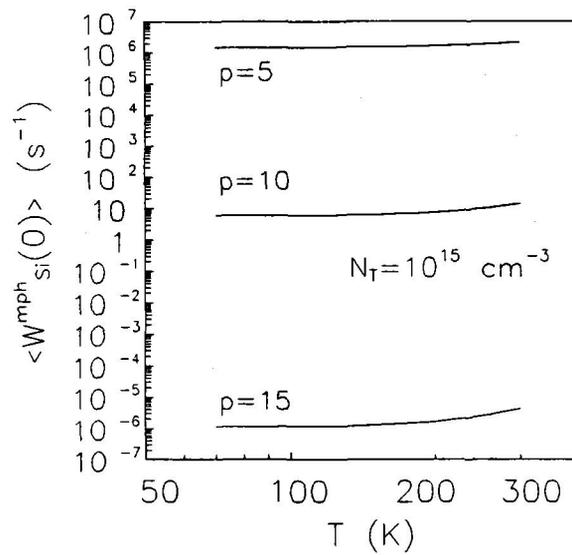


Figura 15a.- Probabilidades de emisión multifonón en función de la temperatura para una concentración de impurezas vacías de 10^{15} cm^{-3} . El parámetro S se ha mantenido constante con valor $S=0.5$, $\hbar\omega=63 \text{ meV}$. En las distintas curvas el número de fonones emitidos, p , vale 5, 10 y 15.

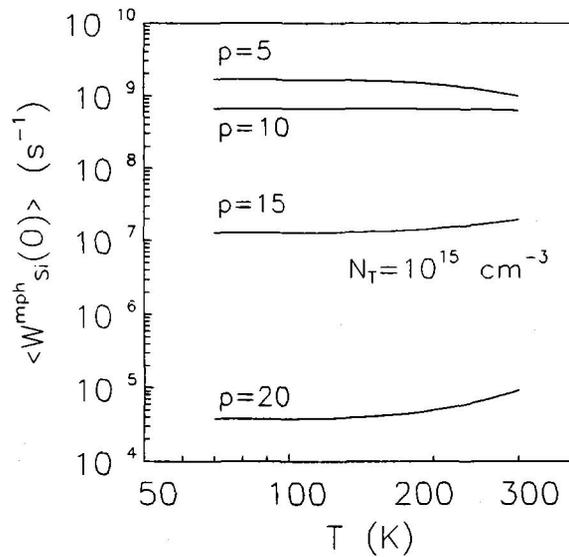


Figura 15b.- Probabilidades de emisión multifonón en función de la temperatura para una concentración de impurezas vacías de 10^{15} cm^{-3} . El parámetro S se ha mantenido constante con valor $S=5$, $\hbar\omega=63 \text{ meV}$. En las distintas curvas el número de fonones emitidos, p , vale 5, 10, 15 y 20.

Con referencia a la energía del electrón, como mostramos en la figura 6 del capítulo anterior, para valores altos de ϵ se obtiene un fuerte decrecimiento de la probabilidad a medida que aumenta la energía, que da cuenta del poco solapamiento entre los estados ligados y los estados de alta energía en la banda. Esto deberá traer como consecuencia un fuerte decrecimiento de la sección de captura al aumentar la energía media de los portadores (p. ej. por un campo eléctrico aplicado). A la vista de las dos expresiones de la probabilidad (para energía del electrón cero y energía ϵ), para un valor fijo de k , el resto de dependencias tanto térmicas como con el resto de parámetros son coincidentes (Figs. 14 y 15).

Una vez analizado en profundidad el comportamiento de las probabilidades de emisión multifonón, en el apartado siguiente compararemos las secciones eficaces de captura térmicas obtenidas numéricamente con las medidas experimentales. Debido a la diferencia de los comportamientos térmicos de las secciones eficaces de captura y de los mecanismos de dispersión de las redes de silicio y arseniuro de galio, la captura en estos dos semiconductores se va a estudiar por separado.

II.5.4. Estadística de la captura de electrones por emisión multifonón.

Antes de realizar este análisis vamos a terminar este apartado mostrando los resultados del estudio estadístico del tiempo de captura obtenido por simulación como hicimos con la captura por el proceso de cascada. El objetivo de este análisis es asegurarnos de que podemos tomar el valor medio de los tiempo de captura de cada electrón como el tiempo de captura, τ_c , para evaluar la Ec. (27). Como se explicó con anterioridad, este tiempo de captura se ha calculado por Monte Carlo para un número alto de electrones (mayor de 100.000) para poder hacer el tratamiento estadístico.

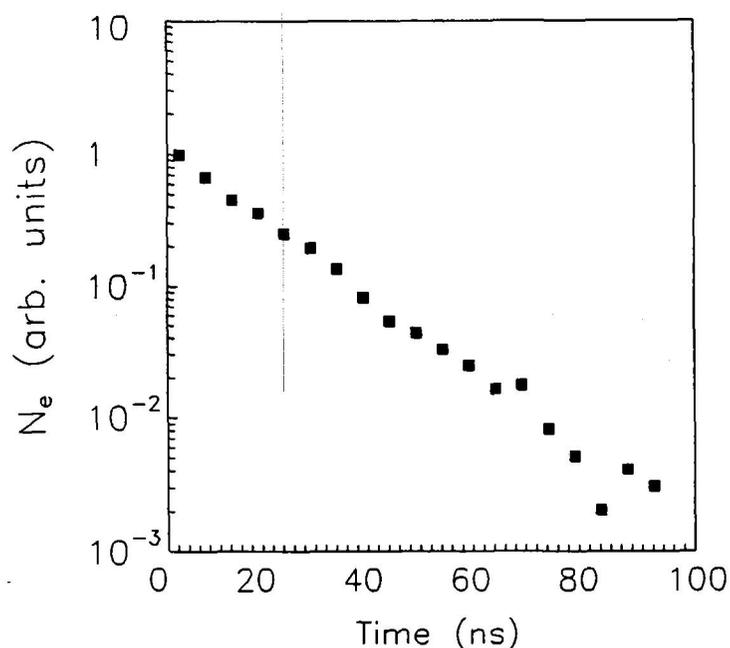


Figura 16.- Histograma del número de electrones con un tiempo de captura dado obtenido por simulación. Los datos introducidos fueron los del nivel aceptador del platino en concentración de $5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en silicio a $T=80 \text{ K}$.

En la figura 16 se representa el histograma de la distribución de electrones en función de su tiempo de captura dado para el nivel aceptador del platino a una temperatura de 80 K. La concentración de impurezas fue $N_T=5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Como se muestra, la distribución sigue una característica exponencial como predice la teoría de S-R-H, donde la desviación típica es igual a la media. Este resultado permite trabajar trabajando con el tiempo de captura promedio como tiempo característico para calcular las secciones eficaces de captura.

II.5.5. Comparación con los resultados experimentales de captura en Si.

Como ya se ha mencionado, no se ha detectado la existencia de estados excitados

asociados a los centros neutros en el silicio. Por esta razón, los estudios teóricos realizados sobre la captura por parte de estos centros atribuyen al mecanismo multifonón la responsabilidad de asistir estas transiciones directas desde la banda.

De acuerdo con las consideraciones que hicimos en el apartado anterior acerca de los parámetros que intervienen en la expresión de la probabilidad de transición multifonón sólo queda como parámetro libre el factor de Huang-Rhys, S . La obtención experimental de este factor va asociada a los espectros de la sección eficaz de foto-ionización de electrones de los centros en el semiconductor. Para este parámetro sólo se han encontrado medidas, en los casos de captura de electrones, para el nivel aceptador del platino, situado a 0.23 eV del mínimo de la banda de conducción, el valor del factor de Huang-Rhys hallado es $S \approx 0.3$ [Mayo y Lowney, 1987,1988] y resultados teóricos para el nivel aceptador del Au [Ridley, 1993].

Tomaremos estos dos centros como punto de partida para verificar el procedimiento numérico. Como se mencionó al principio de este capítulo, la dispersión de datos experimentales no nos permitirá calcular S con exactitud, sino con un determinado margen de error, dentro del cual quedarán comprendidos los resultados experimentales.

Las figuras 17 y 18 muestran el ajuste entre las secciones eficaces de captura simuladas y los datos experimentales para los niveles aceptadores del Pt y del Au en silicio respectivamente, en un amplio rango de temperaturas. La velocidad térmica del electrón para los resultados experimentales se consideró $v_{th}^n = 2.07 \times 10^7 (T/300)^{1/2}$ cm/s, por lo que algunos de dichos datos han sido modificados por un factor de escala para unificarlos a este valor de la velocidad. En la figura 17, para el sistema Si:Pt todos los datos experimentales se ajustaron con nuestros resultados teóricos variando el factor S en el rango 0.35-0.45, muy próximos al valor de 0.3 medido experimentalmente.

En cuanto al nivel aceptador del Au al ajustar los datos experimentales se ha obtenido un valor de S entre 1.1 y 0.9 (figura 18). Cálculos teóricos realizados por Ridley [Ridley, 1993], sitúan los factores de Huang-Rhys para el Pt y el Au próximos a la unidad, obteniendo valores menores para profundidades energéticas del nivel menores. Estos valores confirman la tendencia de incremento de S a medida que aumenta E_T . La reproducción con nuestro método del valor experimental de S en el caso del Pt en Si y de la tendencia de S con la profundidad del nivel expuesta en diversos trabajos teóricos garantizan su aplicabilidad para describir el fenómeno de la captura por parte de este tipo de centros. Además, en ambas figuras se muestra la alta sensibilidad de las secciones eficaces de captura numéricas respecto al factor S . Este hecho denota la precisión de nuestro procedimiento a la hora de calcular dicho parámetro cuando éste sea desconocido. Con la energía del fonón considerada de 63 meV, estos resultados proporcionan unos desplazamientos de Franck-Condon, $S\hbar\omega$, de unos 25 meV para el Pt y 63 meV para el oro.

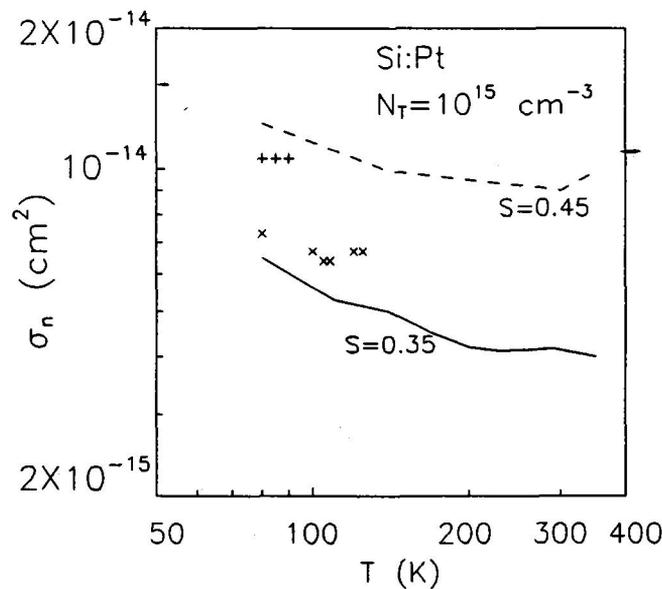


Figura 17.- Secciones eficaces de captura de electrones del nivel aceptador del Pt en Si. Las curvas muestran las simulaciones numéricas ($S=0.45$, curva discontinua; $S=0.35$, curva continua), considerando sólo transición multifonón. Los distintos datos experimentales se muestran con símbolos: + [Palma et al., 1993] y x [Brotherton et al., 1979].

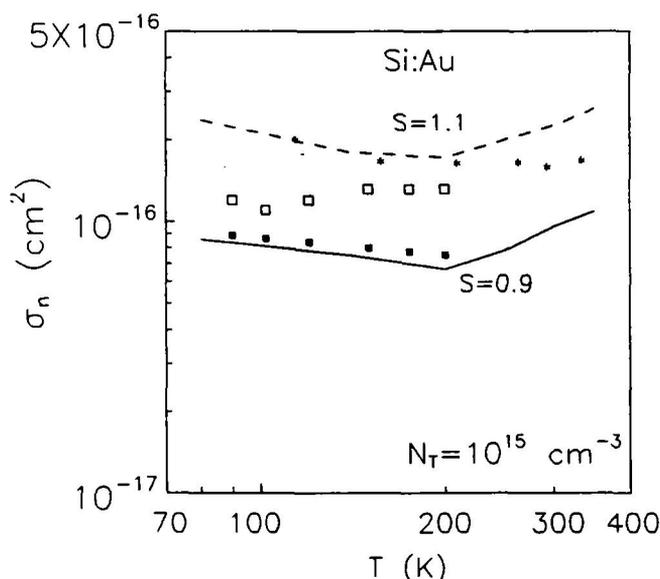


Figura 18.- Secciones eficaces de captura de electrones del nivel aceptador del Au en Si. Las curvas muestran las simulaciones numéricas ($S=1.1$, curva discontinua; $S=0.9$, curva continua), considerando sólo transición multifonón. Los datos experimentales se representan por símbolos: * [Lang et al., 1980], □ [Brotherton et al., 1979], ■ [Barbolla et al., 1976].

Para los niveles aceptadores del titanio en silicio [Morante et al., 1982c], cuyas secciones eficaces de captura se muestran en la figura 19, no se ha encontrado información sobre los factores S . Del ajuste entre nuestro cálculos y los datos experimentales hemos determinado unos valores $S=0.95$ y $S=0.45$ para los niveles situados a 515 meV y a 238 meV de la banda de conducción, respectivamente.

De los ajustes obtenidos hasta ahora se pueden sacar algunas conclusiones importantes. Como se muestra en estas últimas tres figuras (Figs. 17, 18 y 19), los datos experimentales de la sección eficaz de captura térmica abarcan un rango de temperatura reducido, no alcanzando muchos casos la región de temperatura ambiente. Sin embargo, como hipótesis de trabajo habitualmente se había supuesto la independencia térmica de esta magnitud [Sah et al., 1970] [Thurber y Lowney, 1987]. En este trabajo se ha

prolongado el cálculo de las secciones eficaces de captura térmica hasta temperatura ambiente, constatándose su práctica independencia.

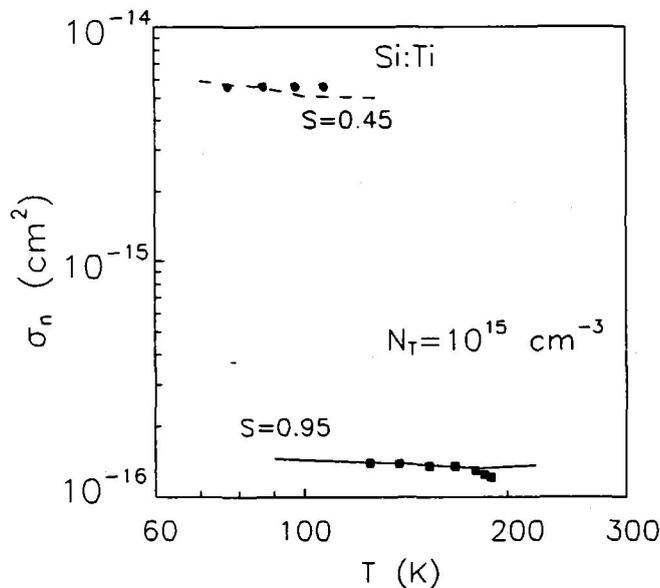


Figura 19.- Secciones eficaces de captura de electrones para los dos niveles aceptadores del Ti en Si. Las curvas representan los cálculos teóricos, mientras que los símbolos muestran las medidas experimentales [Morante et al., 1982c].

Pero quizás una de las aportaciones más importantes del presente estudio teórico es considerar al fonón óptico no polar del silicio como el causante de la transición multifonón, apoyando a Henry y Lang en su idea de que era un fonón de la red el responsable de tal transición. Esta consideración, que simplifica el ya de por sí complicado cálculo de la probabilidad multifonón, está en contraposición con aquellos autores que proponen fonones locales como los responsables en dicha transición. Tratar la frecuencia del fonón como otra variable en la expresión de la probabilidad permitía el ajuste de cálculos teóricos con datos experimentales para una gran variedad de valores del factor de Huang-Rhys [Burt, 1979, 1981] [Pässler, 1980] [Morante et al., 1982a,b], lo que hacía muy difícil su determinación unívoca. En nuestro caso, al comparar los

resultados numéricos con experimentales en los que se conoce el factor S ha permitido validar la hipótesis del fonón de la red.

Hasta ahora sólo se han estudiado las secciones eficaces de captura de electrones en régimen de recombinación libre, es decir, en ausencia de campo eléctrico. Sin embargo, debido a la miniaturización de los dispositivos, los fenómenos de transporte ocurren en regiones con campo eléctrico cada vez mayor. Por ejemplo, la captura de portadores en el canal de un transistor MOS por parte de los estados superficiales ocurre en presencia del campo eléctrico transversal y el longitudinal.

Al aumentar el campo eléctrico en la región de captura, la energía media que llevan los portadores de la banda susceptibles de ser capturados es cada vez mayor. En estas condiciones, el cálculo derivado de la probabilidad de emisión multifonón para energías bajas no es válida. Por esta razón, calculamos una expresión de la probabilidad de transición multifonón en función de la energía. Al contemplar explícitamente el vector de onda del electrón en la banda y la dependencia energética del parámetro p , obtuvimos una probabilidad diferente según la posición del mismo en la banda (Ec. 27). En los apartados anteriores, se mostró la evolución del cociente de ambas probabilidades con la energía. En ella se comprobaba como para altas energías la probabilidad de emisión multifonón decrecía fuertemente como resultado del menor solapamiento entre las funciones de onda del electrón libre y del estado ligado y el aumento del número de fonones necesarios para la transición. El comportamiento en temperatura es idéntico que en el caso de la probabilidad independiente de la energía con lo que, para tener una visión simplificada de la influencia del campo eléctrico en la sección eficaz de captura podemos decir que dicha magnitud tiene un comportamiento como el estudiado hasta ahora, salvo un factor que decrece al aumentar el campo.

Nuestra expresión de la probabilidad multifonón dependiente de la energía dada

en (26) se ha utilizado para estudiar las secciones eficaces de captura térmica de los niveles aceptadores de oro y del platino en función del campo eléctrico. En la figura 20 se muestra ese ajuste entre resultados experimentales y teóricos para el nivel aceptador del Pt. Como se puede observar los datos experimentales (con campo eléctrico [Brotherton y Bradley, 1982] y sin campo eléctrico [Palma et al., 1993]) se han ajustado óptimamente. Además, el valor del factor de Huang-Rhys necesario para el buen acuerdo es 0.4, similar al obtenido en el ajuste en ausencia de campo y muy cercano al medido experimentalmente [Mayo y Lowney, 1987].

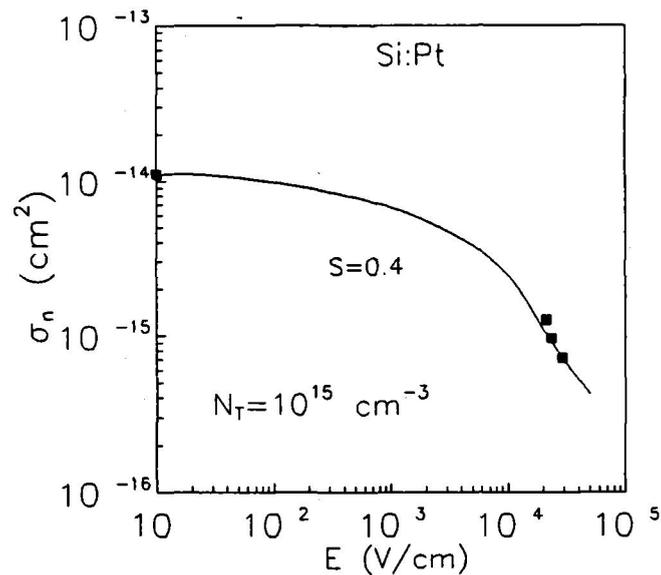


Figura 20.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel aceptador del Pt en Si en función del campo eléctrico a 77 K. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales sin [Palma et al., 1993] y con campo eléctrico [Brotherton y Bradley, 1982].

Análogamente, en la figura 21 se muestra el ajuste para el nivel aceptador del oro. Los valores del factor S que mejor ajustan los datos sin campo eléctrico y en presencia de campo están comprendidos entre 0.9 y 1.1 al igual que en los datos sin campo de la figura 17. Este hecho puede estar causado tanto por la dispersión de valores de la sección

eficaz en ausencia de campo como por los problemas de las medidas de σ en presencia de campo, como menciona el propio autor [Brotherton y Bradley, 1982]. Se ha intentado ajustar estos datos experimentales usando la expresión independiente de la energía obteniéndose unos decrecimientos menos pronunciados que los medidos experimentalmente.

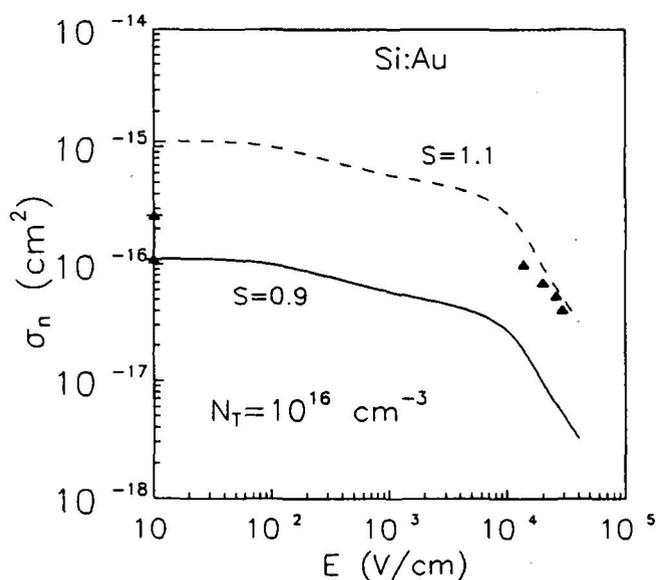


Figura 21.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel aceptador del Au en Si en función del campo eléctrico a 77 K. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales [Brotherton y Bradley, 1982].

Como punto destacado de esta comparación numérico-experimental de σ con campo y sin campo eléctrico se deriva que los valores de los factores de Huang-Rhys para los niveles aceptadores del platino y del oro se encuentran entorno a 0.4 y 1 respectivamente. Además, la expresión de la probabilidad de emisión multifonón se confirma como válida para estudiar la captura de electrones con altas energías en la banda, mientras que la otra expresión, independiente de la energía, es correcta sólo para la captura en ausencia de campo eléctrico.

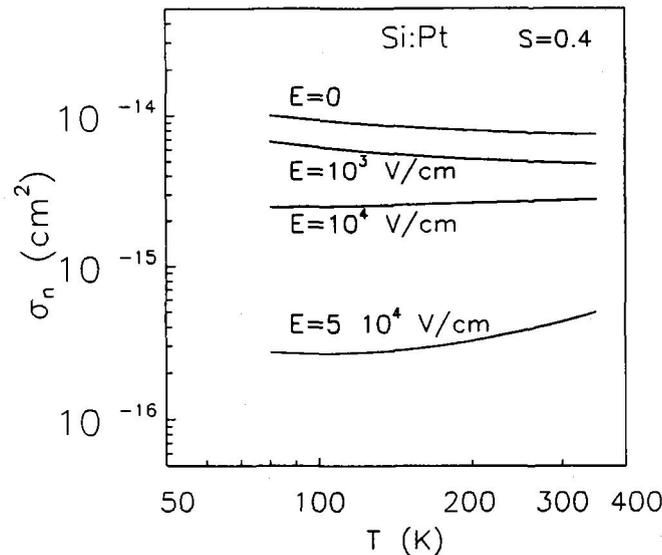


Figura 22.- Comportamiento térmico de la sección eficaz de captura teórica del nivel aceptador del Pt, para campos eléctricos aplicados desde 0 a 10^5 V/cm.

Para obtener una visión global de la influencia del campo eléctrico en la sección eficaz de captura térmica de electrones, en la figura 22 se muestran los comportamientos térmicos de las secciones eficaces de captura de electrones calculadas numéricamente para varios campos eléctricos. Para la obtención de esta figura se han introducido en las simulaciones los datos del nivel aceptador del Pt en silicio, es decir, $S=0.4$ y $E_T=0.231$ eV. Podemos observar que para campos menores de 10^4 V/cm se mantiene la independencia con T, mostrando la sección eficaz de captura numérica un crecimiento con la temperatura para campos altos. Para explicar este cambio en la tendencia térmica hemos representado el cociente entre las probabilidades de captura teóricas del mencionado centro a $T=80$ K y $T=350$ K así como del centro aceptador del oro (Fig. 23). El comportamiento es similar en los dos casos mostrando un crecimiento del cociente con la energía (es decir, con el campo eléctrico), tal y como predice el factor $(n+1)^p$ de

la ecuación (9). Esto significa que, para campos altos, el electrón tiene una mayor probabilidad de ser capturado a altas temperaturas, por esta razón se incrementa σ en estas condiciones

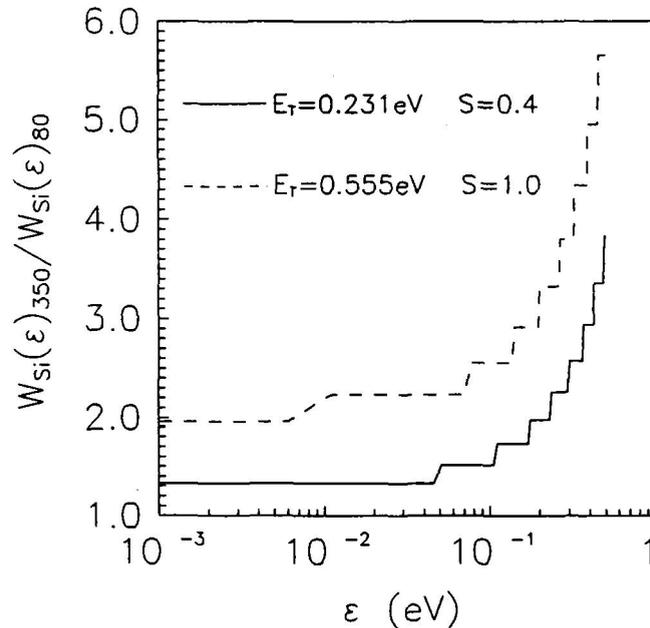


Figura 23.- Cocientes entre las probabilidades de captura teóricas calculadas a 80 K y 350 K para el nivel aceptador del platino (línea continua) y del oro (línea discontinua) en función de la energía. Los parámetros para el cálculo fueron $S=0.4$ y $E_T=0.231$ eV para el Pt y $S=1$ y $E_T=0.555$ eV para el oro.

II.5.6. Comparación con los resultados experimentales de captura en GaAs.

Una vez verificado nuestro procedimiento numérico para centros en silicio, en este apartado intentaremos reproducir la dependencia térmica de las secciones eficaces de captura de defectos en GaAs. Como pudimos observar en la Fig. 14c, en estos casos, la dependencia térmica de la probabilidad es acusada. Sin embargo, como analizaremos en el apartado siguiente, no es la única contribución a este fenómeno.

II.5.6.1. Captura por metales de transición.

Realizadas esas consideraciones pasemos a comparar nuestros resultados numéricos con los datos experimentales. En este apartado se van a estudiar la captura de electrones por parte del nivel situado a 0.75 eV del fondo de la banda de conducción causado por el Cr en estado neutro y por parte del nivel creado por el Fe neutro situado a 0.91 eV también respecto del fondo de la banda de conducción.

Desde que se observó que el arseniuro de galio semiaislante podía obtenerse mediante el dopado con cromo, se han desarrollado bastantes trabajos de investigación sobre las propiedades del sistema GaAs:Cr. El interés por el GaAs semiaislante estriba en su resistividad cercana al valor teórico máximo del GaAs, pudiéndose usar como substrato de dispositivos de GaAs, especialmente transistores de efecto de campo. El Cr en GaAs presenta varios niveles en la banda prohibida según su estado de carga [Pantelides, 1993]. El nivel que vamos a estudiar se encuentra en la región central de la banda prohibida con lo que las transiciones a la banda de conducción y de valencia suceden en el mismo rango de energías.

El átomo libre de Cr posee una configuración electrónica externa $3d^5 4s^1$. Cuando el átomo reemplaza a un átomo de galio de la red de GaAs, tres de los electrones forman parte del enlace, quedando una configuración $3d^3$. Si en esta situación neutra, que es la que vamos a analizar, la impureza de cromo captura un electrón de la banda de conducción, queda con una configuración $3d^4$. Para esta transición d^3-d^4 , el nivel profundo asociado se sitúa a 0.75 eV del mínimo de la banda de conducción. La forma de acoplamiento de ese defecto con la red y la energía de relajación de la misma al producirse la captura se recogen en el factor de Huang-Rhys, S . Hasta ahora, los datos referidos en la bibliografía respecto al desplazamiento de Frank-Condon, $S\hbar\omega$, y al propio factor de Huang-Rhys son diversos. Por un lado [Martínez et al., 1981], mediante

medidas de absorción obtuvo, $S\hbar\omega=170$ meV, con una frecuencia del fonón de 28 meV, por otro lado, el ajuste con espectros de la sección eficaz de foto-ionización con un fonón de 30 meV, se ha obtenido un factor de Huang-Rhys $S=3$ [Amato y Ridley, 1980].

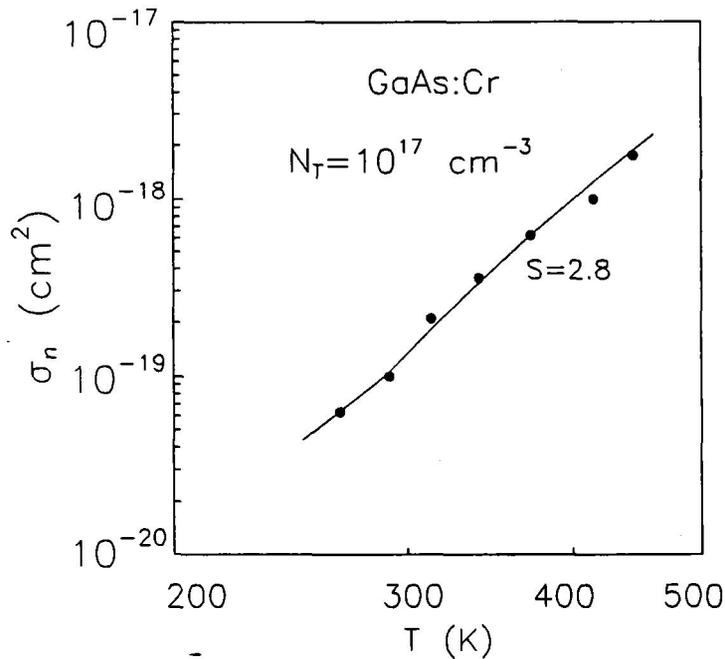


Figura 24.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel del Cr situado a 0.75 eV del fondo de la banda de conducción del GaAs. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales [Henry y Lang, 1977].

En la figura 24 se muestra el ajuste entre los valores teóricos de la sección eficaz de captura térmica de este nivel y medidas experimentales [Henry y Lang, 1977]. En nuestro cálculo numérico se ha utilizado el fonón polar de la red de GaAs, con valor 35 meV. El resto de parámetros son los indicados en el desarrollo realizado en el apartado anterior. El factor de Huang-Rhys que permite el mejor ajuste con los datos experimentales es $S=2.8$, lo que proporciona un desplazamiento $S\hbar\omega=98$ meV. Este valor se sitúa entre los 90 meV obtenidos por Amato y Ridley y los 170 meV medidos

por Martínez et al..

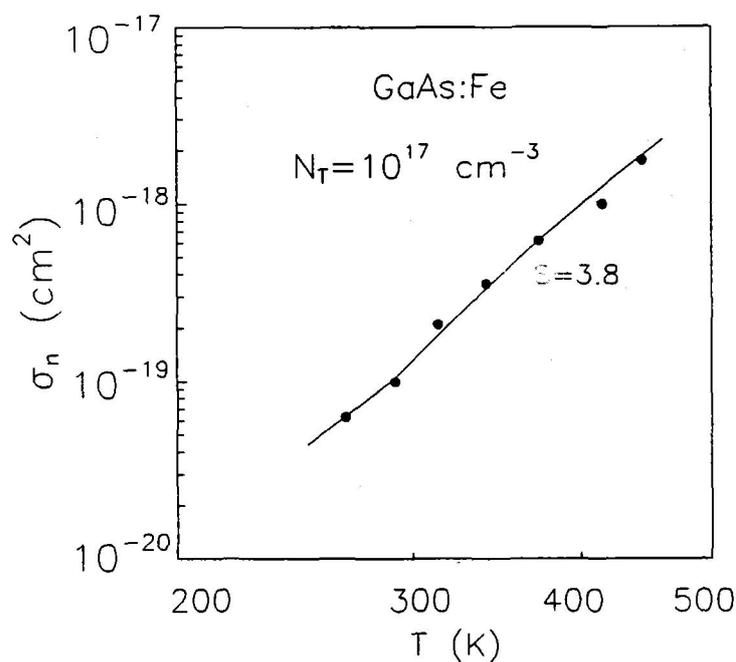


Figura 25.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel del Fe situado a 0.91 eV del fondo de la banda de conducción del GaAs. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales [Henry y Lang, 1977].

Con respecto al centro creado por el hierro, los trabajos iniciales sobre transporte en el GaAs impurificado con hierro (GaAs:Fe) establecieron la existencia de un nivel aceptador dominante situado a 0.52 eV de la cima de la banda de valencia. Este valor de la energía de activación se ha visto confirmado en varios trabajos posteriores sobre el sistema GaAs:Fe [Pantelides, 1993]. Al contrario que con el cromo, no se ha hallado en la literatura referencia alguna al valor del factor de Huang-Rhys. En este caso utilizaremos nuestro procedimiento para obtener el valor de dicho parámetro. Como medidas experimentales de σ se usaran las de Henry y Lang [Henry y Lang, 1977]. Su ajuste con los resultados numéricos se muestra en la figura 25, donde, como se puede

observar, existe un buen acuerdo con los experimentales reproduciéndose la dependencia térmica incluso para altas temperaturas.

De la figura se extrae el valor $S=3.8$ para el factor de Huang-Rhys, lo que proporciona un desplazamiento de Franck-Condon, $S\hbar\omega=133$ meV. Se ha utilizado en la simulación una distancia energética a la banda de conducción de 0.910 eV, de acuerdo con un ancho de la banda prohibida promedio de 1.43 eV. En el GaAs, al igual que en el silicio, y como se ha calculado teóricamente [Ridley, 1978b] [Stoneham, 1979], también se obtiene un valor mayor de S a medida que aumenta la profundidad del nivel energético del centro que captura.

II.5.6.2. Captura por los defectos EL2 y EL3.

Además de las impurezas que se introducen deliberadamente, aparecen en el GaAs defectos nativos que se originan durante el crecimiento del cristal mediante el procedimiento de epitaxia en fase líquida (LPE). La importancia de este estudio radica en que actualmente la mayoría del arseniuro de galio que se fabrica para uso comercial se obtiene mediante este proceso. Nos ocuparemos de estos centros: el EL2 y el EL3.

La existencia de un centro profundo en la mitad de la banda prohibida del GaAs se postuló en 1961 por la medida de la alta resistividad volúmica de este material. Posteriores experimentos espectroscópicos confirmaron dicha existencia y proporcionaron información detallada sobre las propiedades electrónicas y ópticas de este nivel, que se denominó EL2. Se ha demostrado que tiene una importante influencia en las propiedades de los materiales semiaislantes y, por esa razón, ha cobrado un considerable interés. Pero este nivel presenta algunas propiedades extrañas, raramente observadas en otros centros

profundos en semiconductores [Pantelides, 1993]. La incertidumbre sobre su origen físico-químico y el problema para interpretar sus propiedades observables, no están todavía del todo resueltos.

Inicialmente, este defecto fue asociado al oxígeno. Al introducir oxígeno aumentando la presión parcial del mismo durante el proceso tecnológico de crecimiento o bien añadiendo Ga_2O_3 , el análisis por efecto Hall constató la presencia de un nivel situado aproximadamente a 0.75 eV de la banda de conducción, el cual fijaba el nivel de Fermi en la mitad de la banda prohibida. Dado que la disminución en la concentración de electrones guardaba una aparente relación con el tratamiento con O, se relacionó dicho nivel con esta impureza, a la que se supuso de carácter aceptador. No obstante, también se indicó la posibilidad de que fuera un nivel donador, como cabría esperar de un oxígeno sustitucional de un átomo de arsénico, O_{As} . Más adelante, diversos trabajos, mostraron la evidencia de que no se puede asociar el centro EL2 con el oxígeno. A partir de estos trabajos la actividad investigadora en orden a determinar el origen de este defecto ha sido incesante, dada su importancia tecnológica.

El acoplamiento de este defecto con la red es un parámetro importante para aportar información sobre su naturaleza. Sin embargo, existen algunas discrepancias sobre este tema [Morante et al., 1982a] [Pantelides, 1993]. La aportación que ofrece nuestro trabajo consiste en aplicar un modelo para la captura de electrones por parte de dicho nivel y, como consecuencia, obtener el factor de Huang-Rhys. Al igual que en los defectos en GaAs estudiados anteriormente, hemos modelado el fenómeno como una transición directa banda-centro asistida por la emisión de p fonones de la red. También se ha utilizado en la simulación el fonón polar óptico del GaAs con una energía de 35 meV.

Los parámetros térmicos sobre los que existen datos para este centro son: distancia energética al fondo de la banda de conducción de 0.825 eV [Martin et al., 1977] a 1.0

eV [Henry y Lang, 1977]; el desplazamiento de Franck-Condon obtenido, tanto por medidas térmicas como ópticas [Pantelides, 1993] [Chantre et al., 1981], varía entre 100 y 160 meV con un fonón local en todos los casos de alrededor de 20 meV. Este valor de la energía del fonón (considerado como un valor promedio de todas las energías de los fonones implicados en la transición) es demasiado pequeño para explicar el valor relativamente grande de σ_n por debajo de 80 K ($\sigma_n \approx 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^2$), por lo que se admitió que la captura de electrones podría ocurrir vía estados excitados tipo hidrogenoide [Pantelides, 1993]. Nosotros mostraremos que no es necesaria dicha suposición.

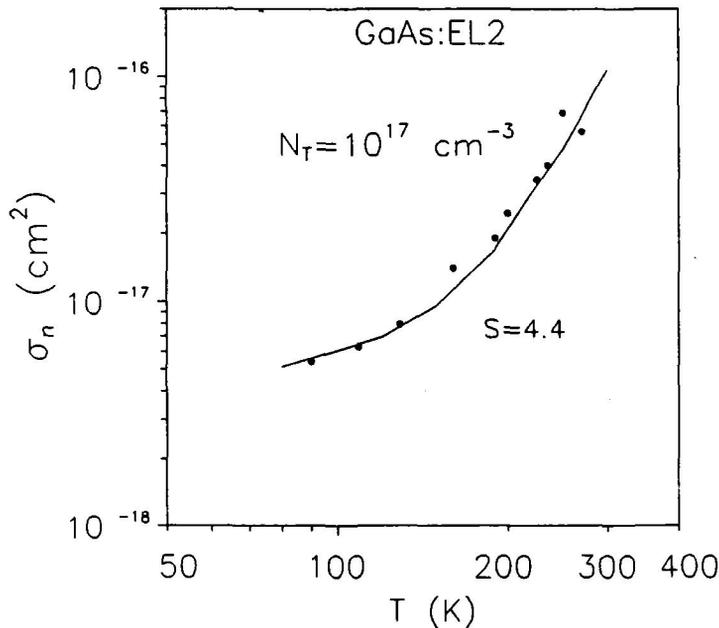


Figura 26.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel EL2 situado a 0.825 eV del fondo de la banda de conducción del GaAs [Martin et al., 1977]. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales [Henry y Lang, 1977].

El ajuste entre los datos experimentales y los obtenidos mediante nuestro procedimiento numérico se muestra en la figura 26. De este análisis hemos obtenido un factor de Huang-Rhys $S=4.4$ tomando $E_T=0,825 \text{ eV}$ y $S=6.0$ con $E_T=1.0 \text{ eV}$, lo que

junto al dato del fonón polar de 35 meV resulta un desplazamiento de Franck-Condon de aproximadamente entre 150 meV y 210 meV situados entre los resultados de trabajos anteriores. Como consecuencia de este buen acuerdo obtenido con nuestro modelo, podemos extraer las siguientes conclusiones:

i) La adopción de un fonón local, en principio desconocido, no es necesario para explicar la transición multifonón. Aquí, hemos utilizado el fonón polar óptico del GaAs con muy buenos resultados.

ii) Tampoco ha sido necesaria la inclusión de transiciones desde estados excitados como se había propuesto en otros trabajos para justificar precisamente la intervención del fonón local. Sin estas transiciones se reproducen los valores de σ_n incluso a bajas temperaturas.

A pesar de las simplificaciones que supone nuestro modelo (fonón de la red y transición directa desde la banda) se ha obtenido un valor de $S\hbar\omega$ coincidente con los obtenidos experimentalmente. La razón básica de estas conclusiones estriba en el hecho de considerar el proceso de captura como uno más dentro del resto de mecanismos de dispersión de la red semiconductor. Esto sólo es posible mediante simulación por Monte Carlo.

Otro defecto asociado al arseniuro de galio obtenido por LPE es el denominado EL3. Este nivel profundo, debido a su posición en la banda prohibida, no ha despertado tanto la curiosidad de los investigadores como el anterior. La distancia energética de dicho nivel respecto de la banda de conducción es de aproximadamente 0.73 eV. Respecto a los resultados hallados en la bibliografía sobre las energías de fonones de la transición multifonón y el factor de Huang-Rhys, hay que mencionar la gran dispersión existente. Según algunos autores, la energía del fonón implicado en la transición va desde los 18

meV hasta más de 35 meV. En cuanto al factor S se han obtenido, con otros ajustes entre datos experimentales y teóricos, valores desde 3 a más de 10 [Burt, 1979, 1981] [Morante et al., 1982a]. Medidas ópticas realizadas proporcionan un desplazamiento de Franck-Condon de unos 0.05 eV [Chantre et al., 1981].

En la figura 27 se muestra el ajuste entre los datos experimentales [Henry y Lang, 1977] y el resultado de nuestra simulación. Como se puede observar el acuerdo es bastante bueno en todo el rango de temperaturas. El valor del factor de Huang-Rhys extraído del ajuste es $S=2.3$, lo que resultando un desplazamiento de $S\hbar\omega=80$ meV, bastante menor que en el caso del centro EL2 y próximo a las medidas experimentales [Chantre et al., 1981].

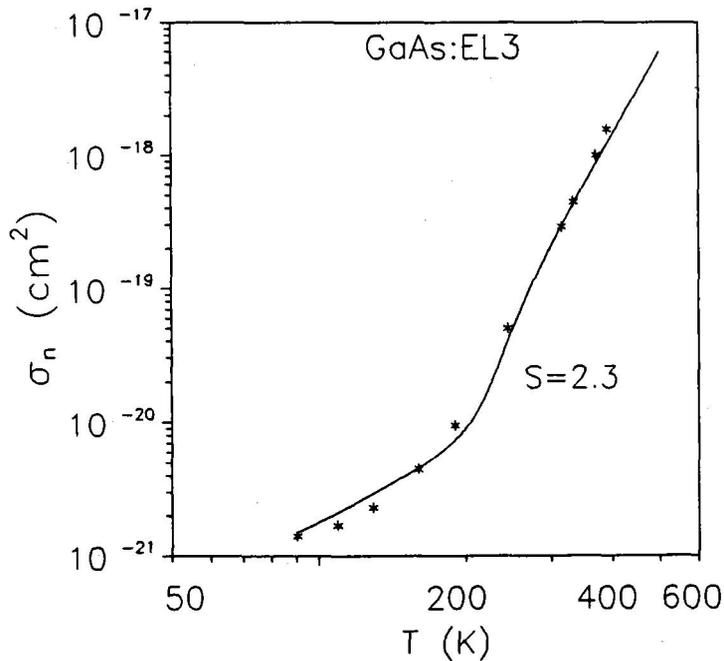


Figura 27.- Secciones eficaces de captura térmica de electrones por el nivel EL3 situado a 0.73 eV del fondo de la banda de conducción del GaAs. La curva representa la simulación del proceso de emisión multifonón. Los símbolos muestran los resultados experimentales [Henry y Lang, 1977].

A la vista de los ajustes obtenidos para los centros neutros en silicio y en arseniuro de galio, podemos observar un hecho diferencial bastante importante. Partiendo de la base de que hemos utilizado la misma expresión para la probabilidad multifonón en ambos casos se han obtenido resultados diferentes: en las simulaciones de las secciones eficaces de captura térmica de electrones por parte de impurezas en silicio es patente la práctica independencia térmica de dichos resultados numéricos, acorde con los datos experimentales. Sin embargo, en los centros estudiados en el arseniuro de galio, se obtienen unos valores numéricos fuertemente dependientes con la temperatura.

Demostraremos que parte de la responsabilidad de este cambio tan brusco de un semiconductor a otro se debe a los comportamientos térmicos del resto de los mecanismos de dispersión y de la competencia entre éstos y el mecanismo multifonón en función de la temperatura. Este punto, que no se había podido establecer hasta ahora y que es una consecuencia directa del uso del método de Monte Carlo, explica perfectamente esta fuerte dependencia térmica en el caso de centros en GaAs, como analizaremos en profundidad a continuación.

II.5.7 Interpretación de la dependencia térmica de las medidas experimentales de la sección eficaz de captura.

Demostrada la eficacia de nuestro procedimiento numérico para reproducir las secciones eficaces de captura de centros neutros tanto en Si como en GaAs, estamos en buena disposición para profundizar en dos aspectos ligados entre sí. Por un lado, analizar el rango térmico de aplicabilidad de las expresiones de la probabilidad de captura utilizadas. Este estudio no se podía realizar previamente al cálculo de las secciones eficaces de captura debido al desconocimiento de los factores S . Y por otro lado explicar

el origen de la diferencia tan importante en los valores de S desprendidos de nuestro estudio y los obtenidos en los ajustes analíticos de σ_n a partir de las probabilidades de captura, tal y como se muestra en la Tabla I:

Tabla I: Comparación de los desplazamientos de Franck-Condon, $S\hbar\omega$, para los defectos EL2 y EL3 según distintas fuentes.

Fuente	EL2	EL3
Exp. [Pantelides, 1993]	100 - 160 meV	50 meV
Nuestro trabajo	150 meV	80 meV
[Morante et al., 1982a]	374 meV	142 meV
[Goguenheim y Lannoo, 1990]	-	17 meV
[Zheng et al., 1994]	430 meV	116 meV

Además incidiremos en cual es la información directa que se puede extraer a partir de medidas de la sección eficaz de captura en función de la temperatura. Este asunto no está en absoluto resuelto ya que, a menudo, una mala interpretación de las medidas lleva a errores importantes sobre dicho fenómeno y sobre la estructura del centro [Goguenheim y Lannoo, 1990]. En los dos apartados siguientes nos ocuparemos de estos dos aspectos ligados a la interpretación de las medidas de σ .

II.5.7.1. Rango de validez térmico de la probabilidad de captura por multifonón.

Tal como expusimos en el capítulo anterior, la probabilidad de captura por emisión multifonón utilizada como base para nuestros cálculos tiene la forma [Ridley, 1978a] [Pässler, 1980]:

$$W^{mph} = W_o(n+1)^p e^{-2nS} \quad (29)$$

donde W_o es un prefactor independiente de la temperatura y donde la dependencia con T va en n dado por

$$n = \frac{1}{e^{\hbar\omega/K_B T} - 1} \quad (30)$$

La condición de validez, que determina el rango de temperaturas y de acoplamiento permitido con la expresión (29), venía dada por:

$$(p+4)^2 \gg 4S^2 n(n+1) \quad (31)$$

Utilizando los valores experimentales de S , la expresión (29) no tiene una dependencia térmica tan marcada con la temperatura como muestran las secciones eficaces experimentales de centros en GaAs. Para interpretar estas medidas se ha utilizado como modelo la sección eficaz de captura activada térmicamente [Goguenheim y Lannoo, 1990]:

$$\sigma_n = \sigma_{n\infty} e^{-E_A/K_B T} \quad (32)$$

donde $\sigma_{n\infty}$ es la sección eficaz en el límite de temperatura infinita y E_A es la pendiente obtenida en el diagrama de Arrhenius de σ_n en función de $1/T$. Habitualmente, esta dependencia casi exponencial observada para muchos centros en el rango de temperaturas entre 200 y 450 K [Henry y Lang, 1977] se ha explicado teóricamente esgrimiendo que la probabilidad de captura vía multifonón responsable de este proceso, W_{GaAs} , también tiene la forma [Gibss et al., 1977]:

$$W_{GaAs} = W_o e^{-\frac{E_B}{K_B T}} \quad (33)$$

donde W_o es un factor independiente de la temperatura y E_B es el potencial barrera

definido en el diagrama de configuración coordinado. Sin embargo, a pesar de que dicha expresión es válida para muy altas temperaturas y fuerte acoplamiento es decir cuando deja de cumplirse la desigualdad (31), se ha utilizado para interpretar la dependencia térmica de σ_n dentro del rango delimitado por dicha condición.

En concreto, en la Tabla II se muestran los valores de los dos miembros de la desigualdad (32), a 400 K de temperatura, para valores típicos de los parámetros S y p de centros neutros en GaAs [Palma et al., 1995]. El fonón implicado en la emisión múltiple es el polar óptico de la red de GaAs cuya energía es de 35 meV.

Como se puede observar en dicha tabla, a altas temperaturas, la condición dada por (31) se satisface ampliamente, incluso si se sobreestiman los valores del parámetro S [Burt, 1979, 1981] [Morante et al., 1982a,b], por lo tanto, la probabilidad de captura por emisión multifonón dada por la expresión (29) es aplicable para centros en GaAs en esas condiciones térmicas y no la Eq. (33).

Tabla II: Comparación de ambos lados de la desigualdad 34 para valores usuales de p y sobreestimados de S de centros neutros en GaAs, a 400 K de temperatura.

p	S	$(p+4)^2$	$2S^2n(n+1)$
20	3	576	16.5
20	5	576	45.8
25	5	841	45.8
30	6	1156	66

En consecuencia, la energía de activación aparente, E_A , obtenida de los diagramas

de Arrhenius, σ vs. $1/T$, no puede tomarse como la energía de barrera del diagrama de configuración coordinado E_B . La confusión en este punto conduce a importantes errores sobre la estructura íntima del defecto en la red, ya que, sabiendo que para altas temperaturas [Ridley, 1993]:

$$E_b = \frac{E_T^2}{4S\hbar\omega} \quad (34)$$

si identificamos E_B con E_A y evaluamos (34), el error cometido en el factor de Huang-Rhys, S , es muy importante, lo que implica una indeterminación en el desplazamiento de Franck-Condon y en otros parámetros que caracterizan este fenómeno.

En definitiva, el hecho de una sección eficaz de captura fuertemente dependiente con la temperatura no implica necesariamente la misma dependencia térmica de la probabilidad de captura. Esta implicación errónea ha sido ampliamente utilizada para interpretar medidas de σ y obtener información acerca de los parámetros (S , p y energía del fonón) que configuran dicha probabilidad.

Demostrada la validez de la expresión (29) para los centros estudiados, como hemos mostrado en la figuras 14 y 15, esta probabilidad muestra un dependencia menos acusada que las medidas experimentales de σ para el rango de parámetros S y p manejado. Por esta razón, los resultados de sección eficaz de captura obtenidos analíticamente a partir de dicha ecuación no habían sido utilizados por el propio Ridley para interpretar la sección eficaz de captura de electrones por parte de centros neutros en GaAs. A pesar de ello, se realizaron algunos intentos posteriores en este sentido [Burt, 1979] [Pässler, 1980] [Morante et al., 1982a], pero utilizando valores anormalmente altos para el parámetro S lo que no justifica la hipótesis de acoplamiento débil ($S \ll p$) ni las medidas experimentales de S , como se ha mostrado en la Tabla I.

Para algunos autores [Goguenheim y Lannoo, 1990] [Zheng et al., 1994] estos

malos resultados llevan a realizar nuevos y muy complejos cálculos analíticos que en ocasiones oscurecen la interpretación de resultados, y tampoco han demostrado reproducir los valores experimentales de S . En nuestro caso, hemos utilizado las expresiones simplificadas de la probabilidad multifonón calculadas por Ridley, pero no hemos intentado obtener analíticamente a partir de ella la sección eficaz de captura, sino que, con nuestro procedimiento de simulación de la captura de electrones incluimos las influencias del resto de mecanismos de la red obteniendo así una visión más global y realista del fenómeno de captura. En el siguiente apartado analizaremos la relación entre la sección eficaz de captura y la probabilidad de emisión multifonón.

II.5.7.2. Comportamiento térmico de la probabilidad de captura por multifonón y de la sección eficaz.

Se ha visto que la sección eficaz de captura de centros en GaAs no puede explicarse mediante una probabilidad de captura diferente de la utilizada en el caso de centros en Si. Se ha mostrado también que, si se usa la expresión (29), se pueden ajustar datos experimentales pero con valores de S no acordes con resultados experimentales. Por tanto, se hace necesario explicar el porque de esta aparente contradicción.

Por esta razón, analizamos ahora, el comportamiento térmico de la probabilidad y de la sección eficaz de captura de defectos en Si y en GaAs. Para ello hemos calculado en ambos casos, mediante nuestro método numérico, los tiempos de captura de electrones por parte de algunos centros neutros (captura vía multifonón). En cada caso, también hemos calculado las dependencias térmicas de la probabilidad de emisión multifonón, dada por (29), para estudiar cómo compiten el mecanismo multifonón y el resto de mecanismos de dispersión en función de la temperatura.

En las figuras 28 y 29 se reproducen las dependencias térmicas de la inversa del tiempo de captura medio obtenido por simulación (líneas continuas) y la probabilidad introducida para calcularlo (líneas discontinuas) de los niveles aceptadores del Pt y Au en Si respectivamente. En esta figura se constata el buen acuerdo en todo el rango de temperaturas. Como hemos podido comprobar a lo largo de este trabajo esta característica es común a los centros neutros estudiados en Si. En consecuencia, el resto de mecanismos de dispersión de fonones no altera dicho comportamiento con la temperatura, pero como veremos a continuación, esto es particular para la red de silicio.

Análogamente, en las figuras 30 y 31 se muestran las mismas magnitudes para los centros de Cr y el nivel EL2 en GaAs respectivamente. Estos casos son ejemplos de la marcada influencia de la simulación en el cálculo de σ , dando lugar a dependencias más fuertes que las correspondientes probabilidades. La razón de este hecho es que a diferencia del Si, entran en juego las probabilidades de dispersión de origen polar las cuales decrecen con la energía del portador [Jacoboni y Reggiani, 1983]. La competencia entre un mecanismo que aumenta su probabilidad con T (captura) y otros que disminuyen (mecanismos polares) hace que la captura se vea más favorecida y de forma neta se obtenga una variación superior a la de la probabilidad. La principal razón para explicar las diferencias en el factor S obtenido por este método numérico y los métodos analíticos no radica en cuestionar el rango de aplicabilidad de la expresión de la probabilidad sino en la forma de obtener la sección eficaz de captura.

En conclusión, hemos analizado la captura por emisión multifonón calculada mediante la expresión (29), la cual es aplicable en el rango de temperaturas estudiado en este trabajo. Se concluye también que para una obtención correcta de la sección eficaz de captura y de los parámetros asociados a este fenómeno es necesario realizar una simulación completa del movimiento del electrón en la red semiconductor, y hasta la fecha, el método de Monte Carlo parece el procedimiento ideal para este propósito.

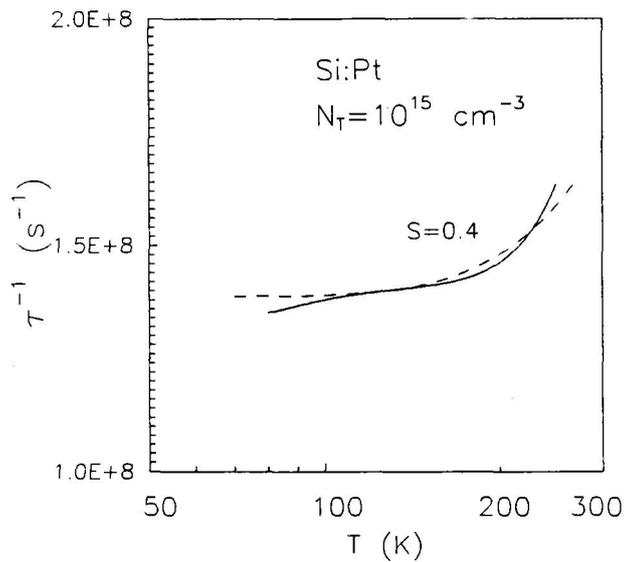


Figura 28.- Inversa del tiempo de captura de electrones (línea continua) y probabilidad de captura (línea discontinua) del nivel aceptador del Pt en Si en función de la temperatura. Las curvas representan nuestras simulaciones numéricas para $S=0.4$ y concentración de impurezas $N_T=10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

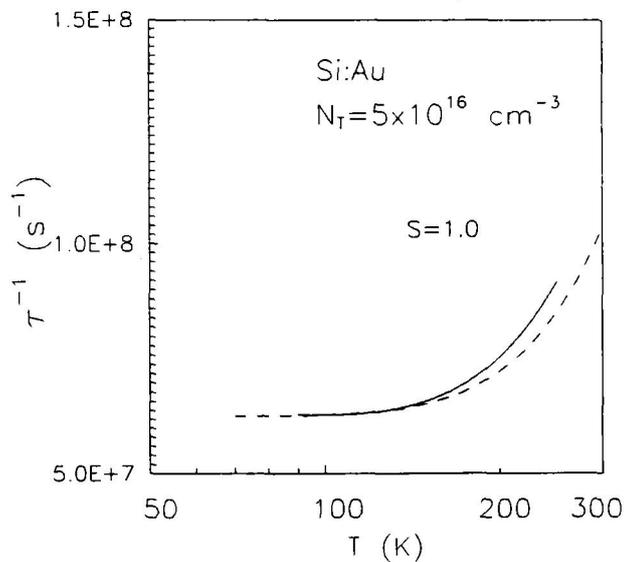


Figura 29.- Inversa del tiempo de captura de electrones (línea continua) y probabilidad de captura (línea discontinua) del nivel aceptador del Au en Si en función de la temperatura. Las curvas representan nuestras simulaciones numéricas para $S=1.0$ y concentración de impurezas $N_T=5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

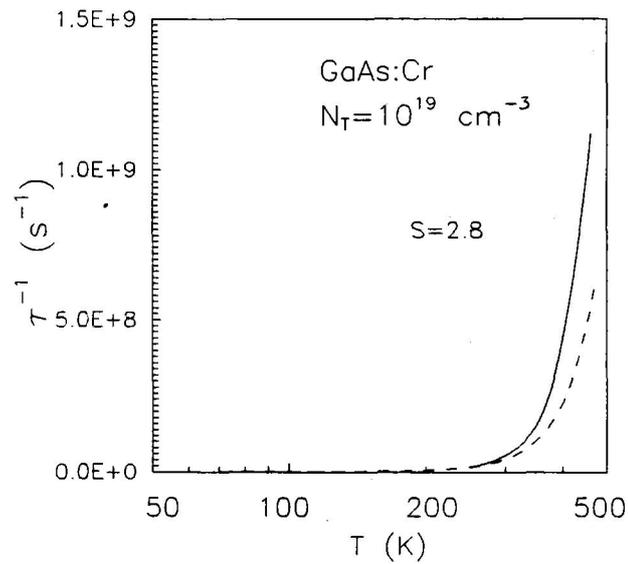


Figura 30.- Inversa del tiempo de captura de electrones (línea continua) y probabilidad de captura (línea discontinua) del nivel aceptador del Cr en GaAs en función de la temperatura. Las curvas representan nuestras simulaciones numéricas con $S=2.8$ y concentración de centros $N_T=10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

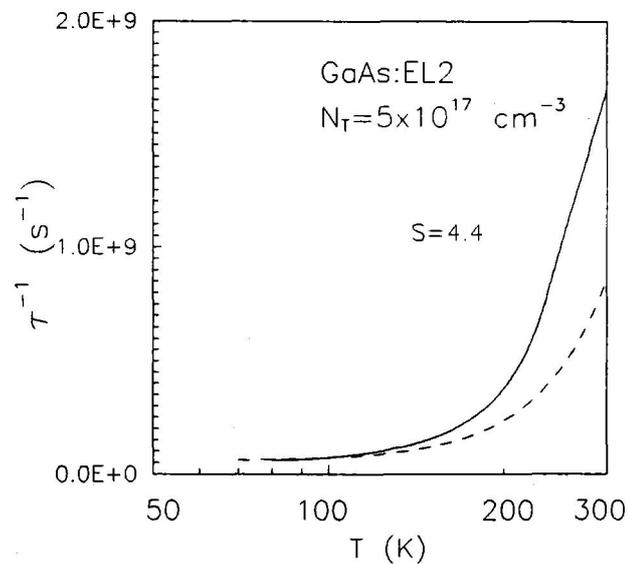


Figura 31.- Inversa del tiempo de captura de electrones (línea continua) y probabilidad de captura (línea discontinua) del defecto EL2 en GaAs en función de la temperatura. Las curvas representan nuestras simulaciones numéricas con $S=4.4$ y concentración de centros $N_T=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

II.6.- SIMULACIÓN DE LA CAPTURA EN DOS ETAPAS.

II.6.1.- Procedimiento numérico.

Los mecanismos de captura por el proceso de cascada y por emisión multifonón han quedado recogidos por nuestro procedimiento numérico por Monte Carlo en dos apartados anteriores. Ahora nos ocuparemos del estudio de la transición de electrones hasta el estado fundamental de un centro profundo donador.

En el capítulo anterior expusimos las líneas básicas de los estudios teóricos realizados hasta la fecha sobre la captura de portadores por parte de impurezas atractivas por el modelo de captura en dos etapas. Vimos que para poder obtener expresiones analíticas de la sección eficaz de captura susceptibles de interpretación fueron necesarias admitir dos simplificaciones:

i) La captura definitiva hasta el estado fundamental sólo se admitía desde los estados excitados. No se contempla la contribución de la posible captura directa desde la banda, que puede ser importante cuando el portador posee una energía alta (debido a la temperatura o a un campo externo aplicado) y sean poco probables las incursiones por las regiones próximas al fondo de la banda.

ii) Además, dentro de la simplificación anterior, sólo se preveía la captura desde el último estado excitado accesible por transición monofonón. Este estado lo denominamos en el capítulo anterior como E_1 .

En este trabajo, hemos salvado ambas aproximaciones, planteándonos este proceso con todos sus posibles aspectos.

Teniendo en cuenta la perturbación creada por el centro coulombiano, existirán una serie de estados excitados próximos al fondo de la banda que podremos considerar como un continuo y tratarlos según lo expuesto en la simulación del mecanismo de cascada. Por tanto, admitiremos que el portador puede moverse por esos estados excitados de la impureza cambiando su energía por medio de dispersiones con las energías de los fonones de la red. Debemos recordar también que las probabilidades de dispersión por fonones y los valores de sus energías quedaban perturbadas por la existencia de las impurezas atractivas ionizadas N_T^+ y que se calculaban según el promediado espacial descrito en el análisis de la captura por cascada.

De todas formas nos encontramos con una dificultad teórica: donde situar el último nivel de energía por debajo de la banda de conducción accesible por el proceso de cascada E_1 . La situación es similar a la de las impurezas poco profundas. Según algunos estudios [Pantelides, 1993], este valor podría variar entre los estados $2s(A_1)$ a $2p_{\pm}$, dependiendo de las posiciones energéticas del desplazamiento multivalle de los estados $2s$ que corresponden a una energía entre 18 meV y 6.4 meV [Janzen et al., 1984]. Sin embargo si se estudian los espectros de absorción de donadores profundos, se puede observar que el estado $2p_0$ es el último lo suficientemente cerca a sus inmediatos superiores para admitirlo como paso final del proceso de cascada. Precisamente estos detallados estudios han colocado este estado en torno a 11.5 meV por debajo de la banda de conducción. Por esta razón, como en el proceso de cascada, se ha escogido ese valor como energía límite del cuasi-continuo de estados excitados dentro de nuestra simulación, aunque se permite la transición multifonón al estado fundamental desde cualquiera de esos estados.

Además de disponer de estos estados sobre los que puede evolucionar un portador (propios del mecanismo de cascada) se añade la captura por el mecanismo multifonón, que puede producirse desde la banda o desde esos estados excitados. Para introducir este

mecanismo se parte de la expresión general de la probabilidad de captura de un portador con energía E_o mediante emisión multifonón. Debido a que los estados excitados de los centros en GaAs ocupan una banda muy estrecha de energía comparada con $K_B T$, vamos a analizar únicamente las impurezas en silicio. Para este caso se dedujo en el capítulo anterior la siguiente expresión:

$$W(E_o) = \frac{36\pi^2 \omega (\nu_T a^*)^3}{V(p-1)!} \frac{C_o S^p e^{-S}}{[1 + (k\nu_T a^*)^{2.5}]^{0.7}} [0.26 + (p-1)0.18] (n+1)^p e^{-2nS} \quad (35)$$

donde recordemos que V corresponde al volumen asociado al estado en la banda. Como vamos a admitir la posibilidad de captura por emisión multifonón tanto desde los estados excitados (único caso teóricamente estudiado hasta ahora) como directamente desde la banda, hay que tener en cuenta que el estado inicial será diferente para ambos tipos de transiciones. Se debe sustituir el volumen V de la expresión (35) por el volumen asociado a cada estado inicial. Así, para un portador con energía $E_o > -E_o^f$, con $E_o^f = e^2 (N_T^+)^{1/3} / 4\pi\epsilon$, estamos en el caso estudiado en el apartado anterior de centros no atractivos, y reemplazaremos V por $V_I = 1/N_T^+$ en (35).

Para la transición desde los estados excitados más profundos ($-E^1 < E_o < -E_o^f$), el volumen que se introdujo para modelarlos, V_{ex} , fue inferior a V_I , debido a la dependencia inversa entre el radio de la órbita ligada y la energía dada por el potencial de Coulomb. Nosotros hemos tomado como volumen el correspondiente a la órbita coulombiana, reduciéndolo por el factor ν_T para cuantificar el grado de localización del centro. Por tanto, en este caso,

$$V \approx V_{ex} = \left[\nu_T \frac{e^2}{4\pi\epsilon |E_o|} \right]^3, \quad -E^1 < E_o < -E_o^f \quad (36)$$

Teniendo en cuenta (36) tenemos una probabilidad de captura desde los estados excitados con energías

$$-E^1 < E_o < -E_o^f \quad (37)$$

de

$$W_{si}(E_o) = \frac{2304\pi^5 \omega (\epsilon a^* |E_o|)^3 C_o S^p e^{-S}}{e^6 (p-1)!} [0.26 + 0.18(p-1)] (n+1)^p e^{-2nS} \quad (38)$$

En las expresiones (35) y (38) a la hora de calcular el factor de Sommerfeld, C_o , se ha tomado el origen de energías en $-E^1$. Nótese que en dichas expresiones el único parámetro libre es el factor de Huang-Rhys, S , que podremos extraer de la posterior comparación con los datos experimentales.

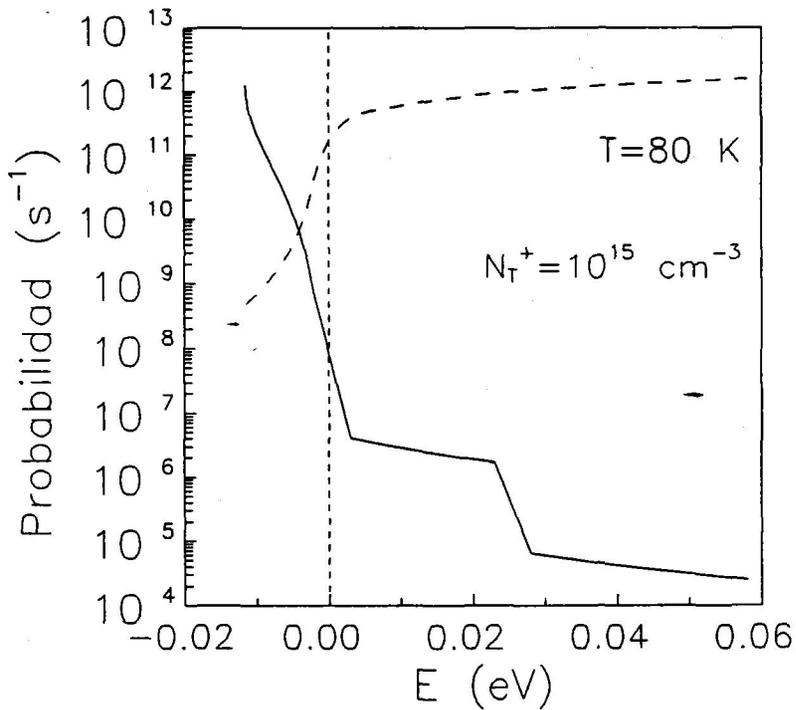


Figura 32.- Probabilidad de captura por emisión multifonón en línea continua y resto de probabilidades de dispersión por fonones (acústicos y ópticos) en línea discontinua en función de la energía. El cálculo se ha realizado para un centro atractivo situado a 0.3 eV por debajo del fondo de la banda de conducción y en concentración ionizada de 10^{15} cm^{-3} a una temperatura de 80 K. En el gráfico se señala mediante una línea discontinua el límite entre la banda de conducción ($E > 0$) y el continuo de estados excitados de la impureza ($-E^1 < E < 0$).

En la figura 32 se han representado la probabilidad de emisión multifonón en función de la energía del electrón (en trazo continuo) junto con el resto de probabilidades de dispersión por fonones (en trazo discontinuo). El cálculo se ha realizado para un centro atractivo situado a 0.3 eV del fondo de la banda de conducción, con un factor $S=0.15$, y una concentración de impurezas ionizadas $N_T^+ = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, a una temperatura de 80 K. Se puede observar el fuerte crecimiento que experimenta la probabilidad multifonón en la región de estados excitados. Este crecimiento proviene de los términos C_0 y el valor absoluto de la energía contemplados explícitamente en la expresión (38) de la probabilidad, que indican respectivamente, el confinamiento de la función de onda libre a bajas energías y el de la órbita del estado ligado por el potencial coulombiano.

Si la temperatura es elevada, el electrón se encuentra en la región de más alta energía donde la probabilidad de ser capturado es menor. De esta figura se puede deducir, por tanto, un fuerte decrecimiento de la sección eficaz resultante al aumentar la temperatura.

Al igual que en los dos mecanismos anteriores la sección eficaz de captura se evalúa a partir del tiempo de captura y la velocidad media promediados a todos los electrones simulados:

$$\sigma = \frac{1}{N_T^+ \langle v \rangle \tau_c} \quad (39)$$

El comportamiento numérico de la sección eficaz de captura con las distintas variables de un semiconductor con centros es similar al encontrado en el caso del mecanismo multifonón. Por ejemplo, se ha encontrado experimentalmente que σ es independiente de la concentración de impurezas ionizadas, lo que concuerda con nuestro resultados teóricos.

En el siguiente apartado comprobaremos la validez de nuestro modelo de captura mediante la comparación de nuestros resultados teóricos de σ con los datos experimentales disponibles en la literatura. De dicha comparación se puede extraer, entre otras cosas, un valor para el factor S que indique el acoplamiento del centro y la red. Antes de hacer esto podemos valorar la suposición del trabajo realizada por Gibbs y colaboradores [Gibbs et al., 1977] de que la captura multifonón se realiza desde el mínimo del cuasi-continuo de estados ligados.

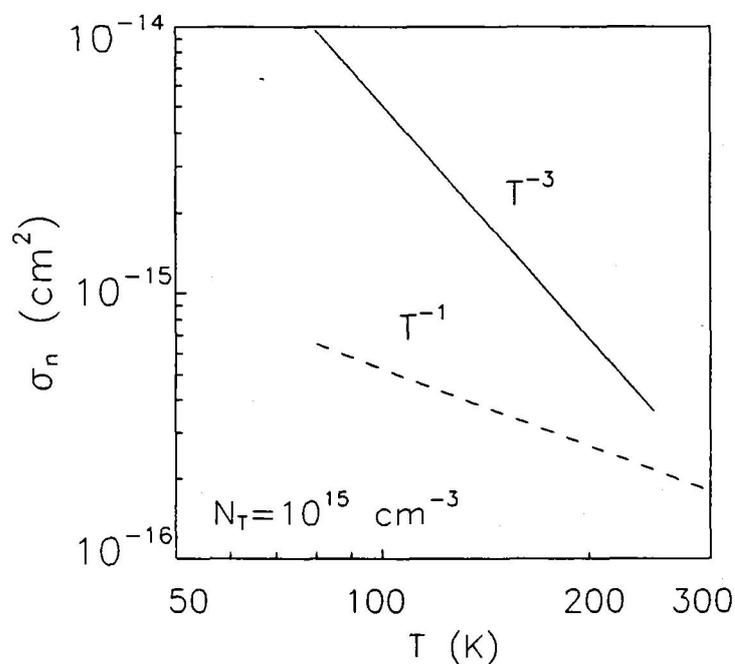


Figura 33.- Secciones eficaces de captura simuladas por el modelo de dos etapas. La curva continua corresponde a emisión multifonón desde toda la región negativa y positiva de energías, mientras que la discontinua sólo desde los últimos 1.5 meV.

Para comprobar la hipótesis de Gibbs, hemos simulado el proceso de captura con estas condiciones. Se ha obtenido una dependencia térmica para σ mucho menos pronunciada que la medida experimentalmente. Sin utilizar dicha hipótesis, admitiendo

saltos desde cualquier estado inicial (desde la banda o desde los estados excitados) sí se reproducen las medidas experimentales. En la figura 33 se comparan los resultados de estas dos hipótesis. En el apartado siguiente se particularizará para diferentes casos experimentales y se observará que la nuestra se ajusta con estos resultados.

II.6.2. Comparación con los datos experimentales.

Para la captura de electrones por parte de impurezas atractivas profundas, y dada la disponibilidad de datos experimentales a más altas temperaturas que en el caso de poco profundas, se simuló el modelo de captura en dos etapas.

Nuestro procedimiento se aplicó a impurezas profundas donde se ha probado la existencia de estados excitados próximos a la banda debido al campo coulombiano atractivo que producen. Este es el caso del nivel donador del oro y de los átomos del grupo VI (grupo del azufre) o anfígenos. El nivel profundo del Au^+ presenta estados excitados del tipo masa efectiva cerca de la banda de conducción [Armelles et al., 1985] [Kleverman et al., 1987] cuando se trata de capturar electrones. En cuanto a los otros defectos (S, Se y Te), los espectros de las secciones eficaces de foto-ionización de electrones demuestran claramente la existencia de estados excitados: unos referidos a la serie de Rydberg [Janzen et al., 1984], y otros originados por la naturaleza multivalle de la banda de conducción.

Los anfígenos poseen dos electrones extra en su última capa con lo que pueden convertirse en doble donadores. El potencial de ligadura de esos dos electrones de estas impurezas han sido comparados con los electrones del átomo de helio. Los doble donadores han sido estudiados extensamente [Grimmeiss et al., 1980a,b] [Janzen et al.,

1984] [Pantelides, 1993]. El estado fundamental de los anfígenos está a mucha mayor distancia que el de los átomos del grupo V (impurezas poco profundas), por lo tanto crean niveles profundos de energía.

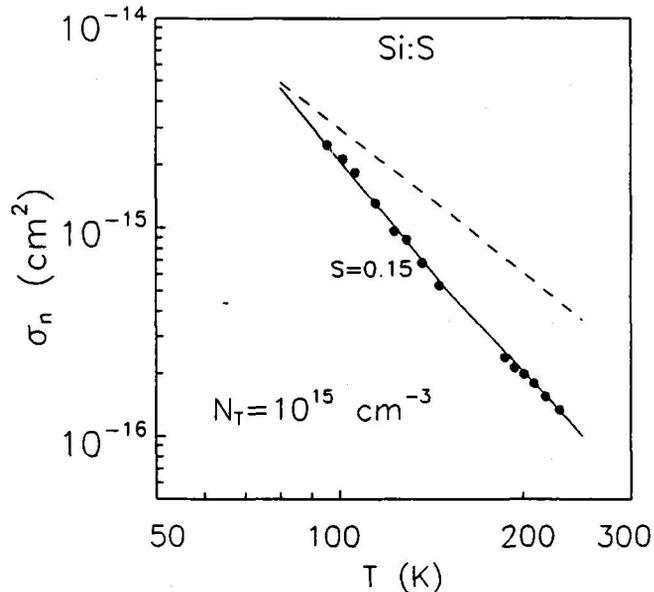


Figura 34.- Comportamiento térmico de las secciones eficaces de captura térmica de electrones del nivel donador del azufre en Si. Las líneas muestran las simulaciones por Monte Carlo, considerando el modelo de dos etapas, pero prohibiendo las transiciones ópticas desde la región negativa de energías (línea discontinua). Los símbolos representan los datos experimentales [Grimmeiss et al., 1980b].

En este estudio nos vamos a centrar en la captura por parte de los estados monoionizados del azufre y el selenio. Hasta ahora, la evidencia experimental [Grimmeiss et al., 1980a,b] parecía apoyar el modelo de captura en dos etapas [Gibbs et al., 1977]. Estos defectos tienen unas energías en sus estados fundamentales de 0.302 eV y 0.286 eV respectivamente [Grimmeiss et al., 1980a,b]. En las figuras 34 y 35 se comparan las secciones eficaces de captura obtenidas por Monte Carlo con las medidas experimentales para S y Se ionizados en silicio respectivamente. Para ajustar se ha variado el valor de

S , parámetro del que no se disponen datos previos, obteniendo en ambos casos valores de este parámetro. En concreto, para el azufre ionizado se obtiene un valor de $S=0.15$ y para el selenio $S=0.17$. Se ha comprobado que las transiciones por fonones ópticos son parte importante en el mecanismo de cascada, ya que, si se eliminan las transiciones ópticas (curva con trazo discontinuo en la figura 34) no se reproduce la dependencia en temperatura de la sección eficaz de captura. Aunque variemos el parámetro S no se modifica la pendiente de esta curva, y lo único que se consigue es desplazar la curva paralelamente.

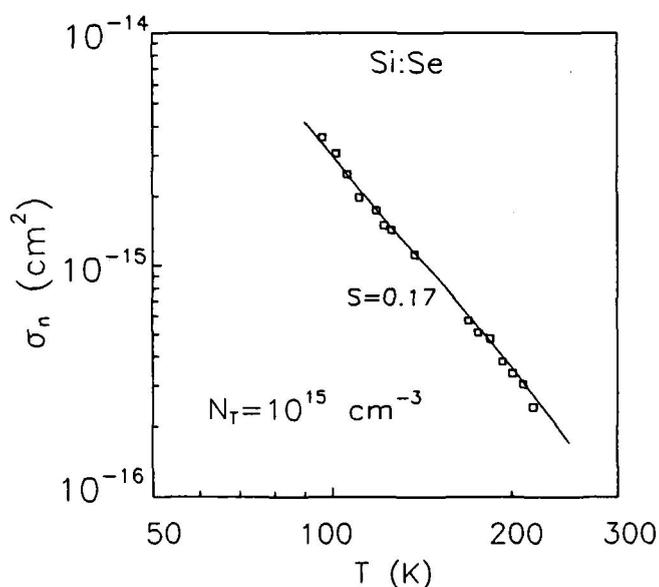


Figura 35.- Secciones eficaces de captura de electrones del nivel donador del Se en Si. Las simulaciones corresponden a la línea continua, mientras que los símbolos representan los datos experimentales [Grimmeiss et al., 1980a].

El buen acuerdo entre los datos experimentales y los resultados numéricos confirman que el modelo de captura que hemos implementado numéricamente constituye una buena imagen de lo que sucede durante el proceso de captura, mostrando la importancia de esos estados excitados en dicho fenómeno. Asimismo, se justifican las

hipótesis realizadas sobre la expresión de la probabilidad de emisión multifonón, lo que permite obtener una idea de conjunto de este fenómeno una vez estudiado ya el proceso de cascada.

Vistos los valores del factor de Huang-Rhys para S^+ y Se^+ , se demuestra la semejanza de su comportamiento en la red, aunque el Se posea una capa completa llena más que el azufre. En este caso se repiten los comportamientos similares para elementos de la misma columna de la tabla periódica, como ocurre con las impurezas poco profundas, P^+ , As^+ y Sb^+ .

Se ha estudiado también la sección eficaz de captura térmica de electrones del nivel donador del oro ionizado positivamente. Este centro, que presenta una distancia energética respecto del fondo de la banda de conducción de 0.8 eV, se han simulado con el mismo modelo de captura en dos etapas utilizado en los casos de S y Se en silicio.

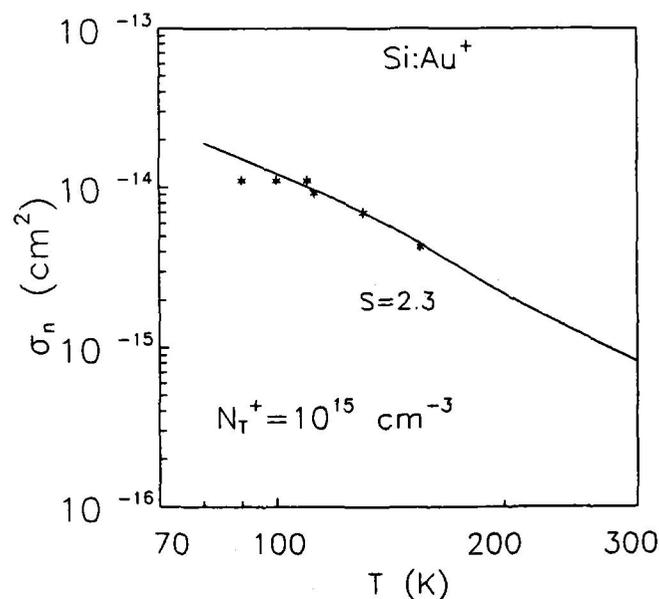


Figura 36.- Secciones eficaces de captura de electrones del nivel donador del oro en Si. La curva muestra nuestro resultado numérico y los símbolos las medidas experimentales [Brotherton y Bradley, 1982].

En la figura 36 se muestra el ajuste de los datos experimentales con nuestros resultados numéricos obtenidos por el método de Monte Carlo. En esta figura se observa como se reproduce la dependencia térmica de los datos experimentales, excepto en una región en torno a 100 K que aparece independiente de la temperatura. Esta diferencia se podría explicar teniendo en cuenta las reservas que pone el autor a sus propias medidas experimentales [Brotherton y Bradley, 1982].

Una vez realizados los ajustes podemos obtener más información sobre la captura por centros atractivos. Así, nos hemos preguntado cuál es la proporción de capturas desde los estados excitados y cómo varía esta proporción con la temperatura. A priori parece claro que conforme la temperatura aumenta el número de capturas desde los estados excitados disminuye debido al alejamiento paulatino del electrón del fondo de la banda de conducción. Para ello representamos en la figura 37 el porcentaje de capturas desde los estados excitados, C_{ex} , en función de la temperatura para el caso del azufre en silicio.

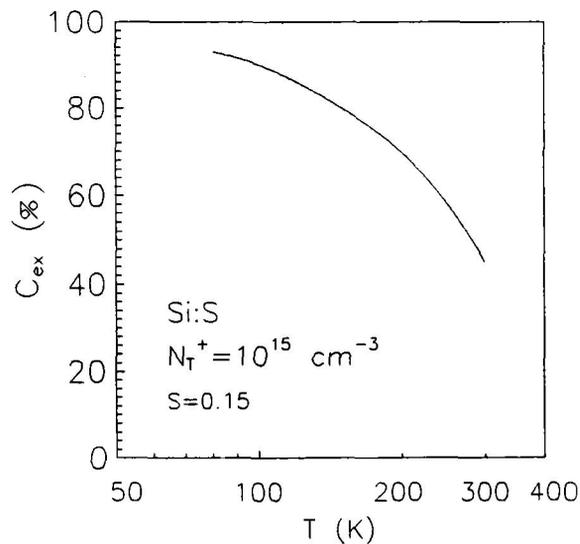


Figura 37.- Porcentaje de transiciones vía emisión multifonón al estado fundamental realizadas desde los estados excitados en función de la temperatura obtenido por simulación. Los parámetros introducidos en la simulación corresponden a los calculados para el centro donador del azufre en silicio.

Igualmente se representa en la figura 38 la energía media, $\langle E_{\text{cap}} \rangle$, desde la que se realiza la transición definitiva multifonón en función de la temperatura para el mismo centro. De esta figura podemos concluir que, como en el caso de cascada, los estados excitados de menor energía de ionización son los que más participan en el proceso de captura. Este hecho apoya la hipótesis de admitir un cuasi-continuo para los estados excitados del centro, ya que el electrón realmente tiene mayor probabilidad de moverse en estados con energía de ionización baja donde mejor se cumple esa condición de cuasi-continuo.

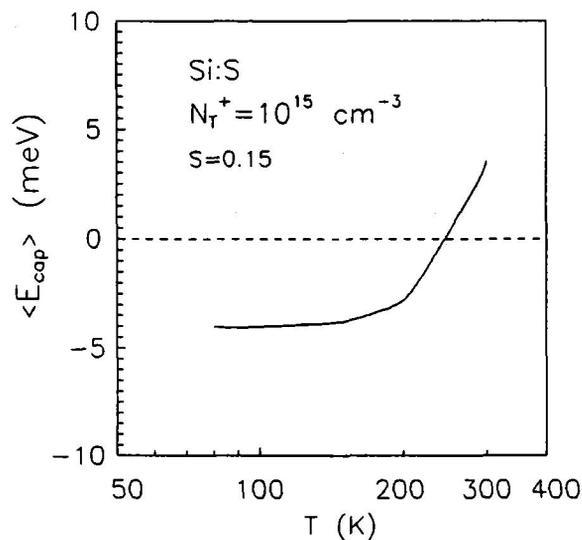


Figura 38.- Energía media de los electrones en el momento de sufrir la captura en función de la temperatura calculada mediante nuestro procedimiento por Monte Carlo. Los parámetros de simulación son los mismos que en la figura 8.

Las tendencias mostradas en la figura 37 y 38 se han repetido para los otros dos centros donadores estudiados, es decir para el selenio y para el oro en silicio. Por tanto, podemos admitir que en condiciones de temperatura ambiente el peso de las transiciones directas desde la banda de conducción no es despreciable (de la figura 37 se extrae un 55 % de peso de estas últimas). También se observa un acusado crecimiento del peso de las

transiciones desde la banda a temperaturas en torno a 250 K. Hemos comprobado que, todos estos comportamientos obtenidos por simulación se mantienen independientes de la concentración de impurezas en el rango de interés.

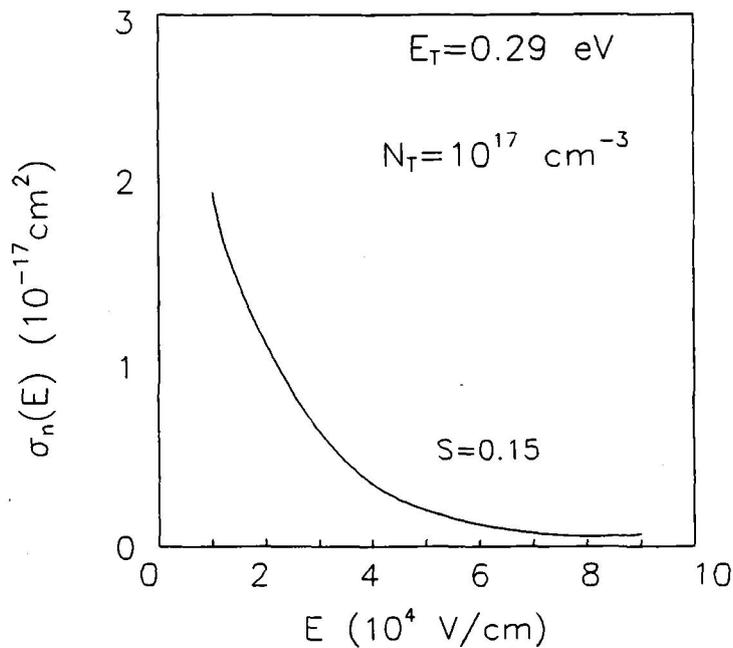


Figura 39.- Secciones eficaces de captura en función del campo eléctrico a 80 K para el centro donador del S en Si en concentración $N_T^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

El caso de captura de electrones por parte de centros atractivos en presencia de campo eléctrico resulta más complejo ya que, para campos altos, comienza a ser despreciable la captura vía estados excitados y prevalece la captura directa desde la banda mediante el mecanismo multifonón, transición directa que en el caso de campo nulo tenía poca importancia. Este cambio en el peso de las transiciones directas se podía observar ya en las figuras 37 y 38, donde comprobábamos respectivamente, el porcentaje de transiciones desde los estados excitados y la energía media del electrón antes de la captura

en función de la temperatura. En las pocas medidas experimentales [Rosier y Sah, 1971] y estudios analíticos [Landsberg y Dhariwal, 1989] de captura en estas condiciones se manifiesta una fuerte desaceleración del decrecimiento del coeficiente de captura para altos campos.

Con nuestro procedimiento hemos simulado la transición directa desde la banda al centro para impurezas atractivas, esta situación es la que ocurre para campos eléctricos altos, reproduciéndose dicha desaceleración en el descenso del coeficiente de captura con nuestros resultados teóricos. Los resultados numéricos se muestran en la figura 39, donde hemos utilizado $S=0.15$ y $E_T=0.286$ eV a una temperatura de 82 K.

II.7. RELACIÓN ENTRE EL FACTOR DE HUANG-RHYS (S) Y LA PROFUNDIDAD ENERGÉTICA DEL NIVEL (E_T).

Una vez calculados los factores de Huang-Rhys para un número importante de defectos en Si y en arseniuro de galio, en este epígrafe nos planteamos obtener relaciones simples entre el acoplamiento del defecto a la red, a través del factor de Huang-Rhys, y la profundidad energética del nivel asociado a dicho defecto. La importancia de conseguir tales relaciones estriba en dos puntos fundamentales.

Por un lado, la dificultad de obtener mediante métodos teóricos y experimentales el factor de Huang-Rhys imposibilita en muchos casos conocer cómo es la interacción entre la red y una impureza, de la función de onda del estado ligado, así como de las

interacciones entre los portadores de las bandas y los estados ligados asociados a dichos niveles energéticos. Si podemos establecer la relación entre su profundidad en la banda prohibida (parámetro fácilmente mensurable) y el estado de carga del centro y dicho factor, se facilita mucho el conocimiento de dicha interacción. En concreto, una relación general $S(E_T)$ sería muy valiosa para aportar información sobre centros distribuidos en la banda prohibida, como por ejemplo, los estados interfaciales Si-SiO₂ cuyo estudio es de gran importancia en los transistores MOS.

Por otro lado, como veremos más adelante, al aplicar dicha relación a los casos prácticos se pueden agrupar defectos dependiendo de la forma de interacción con la red. En resumen, estas relaciones nos proporcionarán información muy importante para incluir los efectos de la captura en simuladores de dispositivos.

Teóricamente se puede obtener la relación entre S y E_T a través de la propia definición del factor. Si consideramos una función de onda para el estado ligado, $T(E_T)$, dependiente de la profundidad del nivel tenemos [Ridley, 1978b]:

$$S = \int_0^{q_D} \frac{|\langle T(E_T) | U_q | T(E_T) \rangle|^2 4\pi q^2 dq}{2(\hbar\omega)^2 (8\pi^3/V)} \quad (40)$$

donde U_q es el potencial de acoplamiento electrón-fonón, $\hbar\omega$ es la energía del fonón implicado, q el vector de onda del fonón y

$$q_D = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a_0} \quad (41)$$

donde a_0 es $4^{-1/3}$ veces la constante de la red. Por tanto, el factor S depende de E_T a través de la función de onda, $T(E_T)$. Físicamente, el factor de Huang-Rhys da idea por una parte del confinamiento del estado ligado, a través de la función de onda T , y por otra del acoplamiento electrón-fonón por el potencial U_q . Además, como ya se ha mencionado,

la cantidad $S\hbar\omega$ o energía de desplazamiento de Franck-Condon indica la energía que recibe la red circundante al centro para reajustarse al producirse una captura.

Evaluar exactamente la expresión (40) para calcular S no resulta práctico debido a la cantidad de parámetros desconocidos que contiene, lo que llevaría a valores de S muy diferentes que producirían grandes variaciones en la probabilidad de captura dependiendo de los modelos que se utilicen para cada uno de esos parámetros. Sin embargo, esta ecuación sí puede dar idea, mediante modelos simples para $T(E_T)$ y algunas aproximaciones al integrar, de la forma de la dependencia con la profundidad del centro profundo. Sobre este tema hay numerosos trabajos en la bibliografía. Los principales resultados que podemos extraer de ellos son los siguientes:

i) Stoneham, utilizando el modelo de defecto cuántico para $T(E_T)$, obtuvo una relación aproximada para centros neutros en GaAs [Stoneham, 1979]:

$$S \approx S_0 \frac{E_T/R_H^*}{[1/6(5+E_T/R_H^*)]^{1/2}} \quad (42)$$

con S_0 una constante dependiente del material.

ii) Para centros neutros en el GaAs Ridley [Ridley, 1993] suponiendo una función de onda tipo bola de billar obtuvo que $S=S_0'(E_T/R_H^*)^{1/2}$, mientras que para centros neutros en silicio con ese mismo modelo calculó una relación $S=S_0''(E_T/R_H^*)^{3/2}$, donde S_0' y S_0'' son factores independientes de E_T . Para centros cargados en Si y GaAs, los valores de S son menores que en los neutros para un mismo E_T , pero la pendiente de la curva $S(E_T)$ es más pronunciada que en el caso de centros neutros.

iii) Si las secciones eficaces de captura se comportan como $\sigma(E_T)=\sigma(0)\exp(-\alpha E_T)$, la relación entre el número de fonones emitidos, p y el factor S es [Lowther, 1980b]:

$$\alpha = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\ln\left(\frac{S}{p}\right) - 1 \right] \quad (43)$$

que supone una relación aproximadamente lineal entre las dos magnitudes.

iv) En un trabajo reciente [Swiatla y Bartczak, 1994], utilizando un pozo esférico como modelo del potencial creado por el centro para calcular las funciones de onda, se ha obtenido un crecimiento más pronunciado de S con E_T con la interacción polar que con la no polar. Este resultado contradice el obtenido por Ridley arriba expuesto.

En todos estos trabajos se observa que S aumenta con E_T tanto en centros en silicio como en arseniuro de galio, sin embargo, no todos coinciden en la forma de crecimiento ni en los valores. Vamos a presentar ahora la evolución del factor S con E_T obtenida de acuerdo con el método expuesto en este trabajo. Nos ocuparemos tanto de los defectos en Si como en arseniuro de galio.

II.7.1. Relación S/E_T para defectos en Si.

En estos defectos se ha utilizado, como ya se ha mencionado, el fonón LO no polar de energía 63 meV. En la Tabla III, se muestran los valores del factor de Huang-Rhys, S , calculados por nuestro método a partir de datos de la sección eficaz de captura para los centros neutros y cargados en Si. Las dispersiones en S se deben a las dispersiones en las medidas de σ_n obtenidas por diversos autores.

A la hora de calcular $S(E_T)$ vamos a dividir los defectos en neutros y atractivos. En primer lugar tendríamos los niveles aceptadores neutros del centro A, platino, paladio, rodio, titanio y oro, que como impurezas muy cercanas en la tabla periódica, podemos

afirmar que poseen una interacción con la red similar como indican numerosos trabajos [Woodbury y Ludwig, 1962] [Lowther, 1980a,b] [Brotherton y Lowther, 1980] [Alves y Leite, 1984] [Van Oosten et al., 1989]. Por otro lado los valores de S para los centros donadores monoionizados del azufre, selenio y oro. De la tabla se observa que a igualdad de profundidad S es menor para centros atractivos, a excepción del oro, Au^+ . Este resultado concuerda con el trabajo anterior de Ridley [Ridley, 1993].

Tabla III: Factores de Huang-Rhys para las impurezas neutras y cargadas atractivas estudiadas en el Si.

Defecto	E_T (eV)	S
Centro A	0.180	0.25
Pt	0.231	0.35-0.45
Ti ₁	0.238	0.45
Pd	0.290	0.50-0.55
Rh	0.310	0.50
Ti ₂	0.510	0.95
Au	0.550	0.95-1.10
Se ⁺	0.286	0.17
S ⁺	0.275-0.302	0.15
Au ⁺	0.800	2.3

En la figura 40 se muestran los ajustes para los centros neutros en silicio. Como

resultado de dicho ajuste, se han obtenido las siguientes relaciones entre el factor S y la profundidad energética del nivel, E_T , de acuerdo con las relaciones funcionales que más se han repetido en la bibliografía:

- ajuste lineal: $S=2E_T-0.08$
- ajuste potencial: $S=2.07E_T^{1.17}$

En el caso de los centros cargados tenemos otra relación entre S y E_T distinta a la anterior, obviamente derivada de su estado de carga distinto:

- Ajuste potencial: $S=4.07E_T^{2.6}$

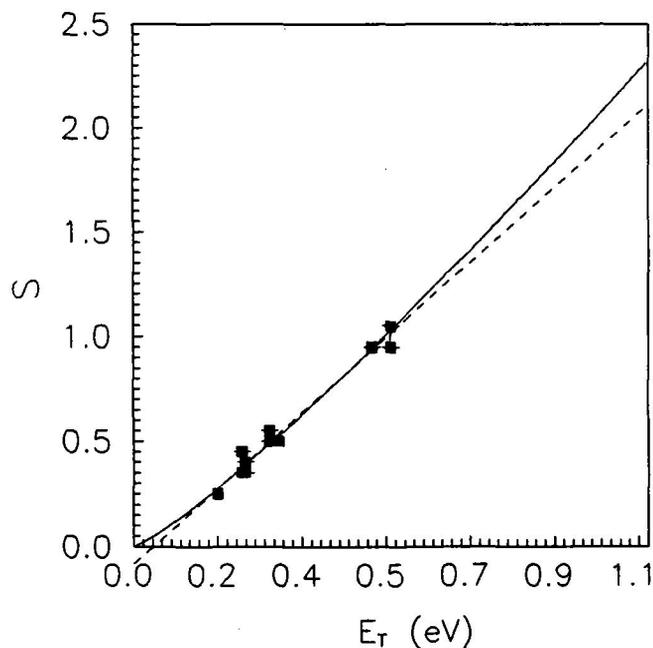


Figura 40.- Factor de Huang-Rhys S, en función de la profundidad del centro neutro en Si calculados mediante simulación por Monte Carlo. La línea discontinua corresponde al ajuste lineal y la continua al ajuste potencial.

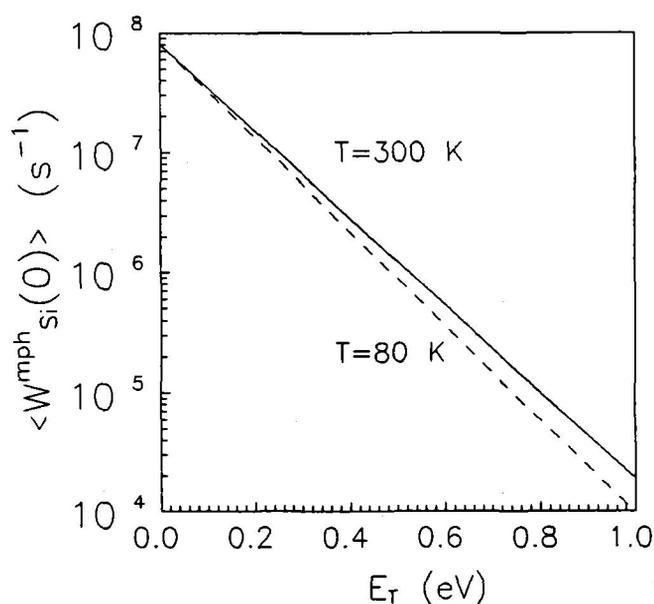


Figura 41.- Probabilidades de captura multifonón en función de la profundidad energética del nivel para temperaturas de 300 K (línea continua) y 80 K (línea discontinua) de centros neutros en Si. La concentración de impurezas ha sido $N_T=10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Obtenidas las relaciones $S(E_T)$, también hemos analizado la dependencia entre la probabilidad de captura y la profundidad del nivel. Se han calculado las probabilidades promediadas espacialmente de captura por emisión multifonón con una concentración de impurezas de 10^{14} cm^{-3} en función de la profundidad del nivel para centros neutros (fig. 41) y para centros cargados profundos (fig. 42). En esas figuras se puede observar el comportamiento diferente de esta magnitud dependiendo del estado de carga del centro. Mientras que para centros neutros la probabilidad, y por tanto la sección eficaz de captura decrece fuertemente al alejarse de la banda de conducción, en las impurezas cargadas, el efecto es el contrario.

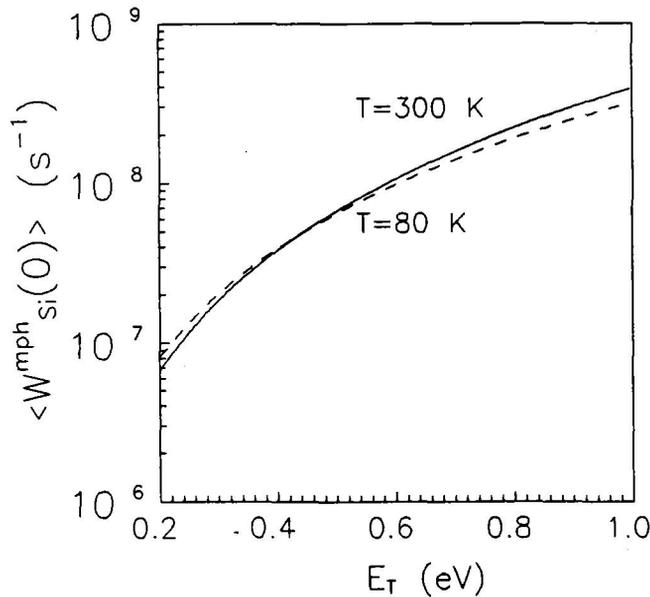


Figura 42.- Probabilidades de captura multifonón en función de la profundidad energética del nivel para temperaturas de 300 K (línea continua) y 80 K (línea discontinua) de centros atractivos profundos en Si. La concentración de impurezas ha sido $N_T=10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

En estas dependencias de la probabilidad de captura hay dos tendencias contrarias superpuestas. Por un lado al crecer la distancia del nivel a la banda de conducción, el número de fonones, p , necesario para que se produzca la transición aumenta, con lo que la probabilidad tiende a disminuir. Por otro lado también al incrementarse E_T el confinamiento del estado ligado es mayor, es decir el factor S , lo que implica un crecimiento de la probabilidad. En los centros neutros, tal y como muestra la figura 41, domina la tendencia de p con lo que disminuye la probabilidad con la profundidad del nivel, mientras que en los centros cargados domina la del crecimiento del factor S . La diferencia radica en que el crecimiento de S con E_T es más rápido en este último caso, como hemos mostrado. Este mayor crecimiento parece indicar que el confinamiento de los estados cargados crece con mayor rapidez que en los neutros al incrementarse la profundidad del nivel.

En conclusión, se han obtenido relaciones diferentes entre el factor S y la profundidad del nivel para cada estado de carga de centros. Para los centros neutros se manifiesta una disminución la sección eficaz de captura conforme el nivel es más profundo, mientras que para los centros cargados el comportamiento es inverso, es decir, un crecimiento de la probabilidad, y por tanto de la sección eficaz de captura de electrones, al aumentar la distancia al fondo de la banda de conducción.

II.7.2. Relación S/E_T para los defectos en GaAs.

Para la simulación de la captura de electrones por parte de los defectos en GaAs, se ha utilizado el fonón polar de energía 35 meV. En la tabla siguiente se muestran los resultados obtenidos para diversos centros.

Tabla IV: Factores de Huang-Rhys para distintos centros en GaAs.

Defecto	E_T (eV)	S
E3	0.310	0.9
EL3	0.730	2.3
Cr	0.750	2.8
EL2	0.825-1.0	4.4-6.0
Fe	0.91	3.8

En este caso es mayor la dispersión en la relación entre S y E_T como puede

apreciarse en la figura 43. La función que relaciona S con E_T obtenida por el ajuste por mínimos cuadrados de los datos de la tabla IV no pasa por todos los puntos de dicha tabla como en el caso del silicio. Esto se puede deber tanto a la falta de acuerdo existente en los valores de la profundidad energética del centro, como a la exactitud de las medidas experimentales de σ_n [Henry y Lang, 1977]. De cualquier modo, en la figura 43 se muestra dichos ajustes con resultado:

- Ajuste lineal: $S = 6.5E_T - 1.5$
- Ajuste potencial: $S = 4.75E_T^{1.4}$

De las relaciones obtenidas tanto para el Si como para el GaAs se confirman las tendencias de S con E_T propuestas en otros trabajos. Incluso, se ha obtenido un mayor crecimiento de S en defectos en GaAs que en Si como ha apuntado un trabajo reciente [Swiatla y Bartczak, 1994], lo que parece indicar que el modelo de pozo esférico es apropiado para aproximar la perturbación creada por los centros en GaAs, aunque sobre este punto es necesario estudios más profundos.

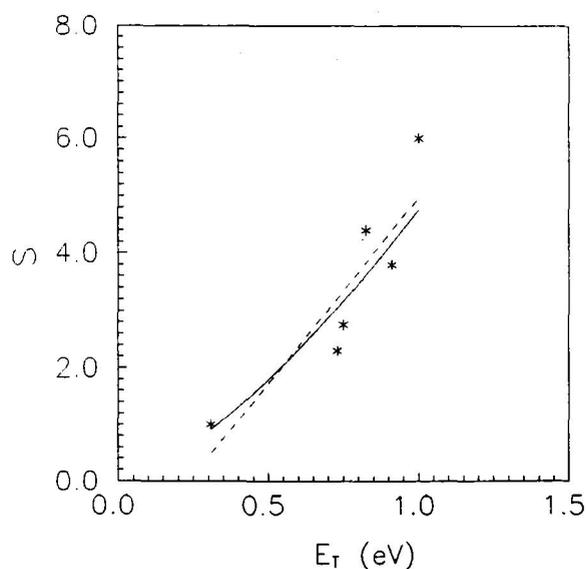


Figura 43.- Ajuste por mínimos cuadrados del factor S en función de la profundidad del nivel para centros en GaAs. La línea continua muestra el ajuste potencial y la discontinua el lineal.

La obtención de estas relaciones simples entre un parámetro fundamental en la caracterización del proceso de captura (el factor de Huang-Rhys, S) y la profundidad energética del nivel asociado a la impureza resultan de utilidad tanto en las implicaciones teóricas que esto conlleva acerca del acoplamiento electrón-fonón y sobre la función de onda del estado ligado, como desde el punto de vista de la modelización. La inclusión del fenómeno de captura vía emisión multifonón a través de su probabilidad resultará más sencilla puesto que los factores S de todos esos centros en Si y GaAs quedan razonablemente bien determinados por su profundidad energética.

CAPÍTULO III:

TÉCNICAS CAPACITIVAS DE MEDIDA DIRECTA DE LA SECCIÓN EFICAZ DE CAPTURA TÉRMICA.

III.1 INTRODUCCIÓN.

Como hemos visto, para la verificación de nuestro método numérico ha sido necesaria la utilización de datos experimentales de secciones eficaces de captura térmica. Hemos observado, durante la comparación de nuestros resultados numéricos con medidas de diferentes autores, que estas presentan una gran dispersión, pudiendo quedar indeterminadas ciertas propiedades del proceso de captura.

Como un punto importante de este trabajo nos propusimos realizar una revisión de las principales técnicas experimentales y de las aproximaciones realizadas en la obtención de la sección eficaz de captura térmica. Estas aproximaciones se encuentran tanto en las expresiones analíticas utilizadas para obtener los valores numéricos de esta magnitud como en la no idealidad de gran parte de las técnicas experimentales tradicionalmente usadas para su medida. Las expresiones analíticas referidas se derivan

de dos desarrollos teóricos distintos. Por un lado el de la evolución temporal de los factores de ocupación de los centros profundos y, por otro, el de la relación de estos factores con una magnitud medible en el laboratorio. Se ha elegido la capacidad en alta frecuencia y pequeña señal como la magnitud que va a reflejar la captura de portadores por parte de impurezas. Por otro lado, la estructura semiconductor donde se medirá esta capacidad será una unión pn.

Obviamente, para una interpretación correcta de los resultados experimentales es necesario conocer con detalle la cinética que gobierna los procesos de emisión y captura de portadores desde los niveles profundos situados en la banda prohibida de un semiconductor y su aplicación en una unión pn. Para ello hemos calculado, con la estadística de Shockley, Read y Hall (S-R-H) [Shockley y Read,1952], [Hall,1952], la evolución de sus factores de ocupación, detallando en cada paso las aproximaciones realizadas, para distintos tipos de centros: bipolares (de carácter aceptador o donador) y tripolares. En cada uno de ellos se ha particularizado para distintas condiciones de polarización (estacionarias y transitorias) y tipos de uniones pn. Dicho análisis nos ha permitido relacionar los centros que presentan dos niveles en la banda prohibida, uno de carácter donador y otro aceptador, con un centro tripolar que presente esos mismos niveles. Es interesante analizar este asunto ya que esta situación es común para impurezas metálicas en Si, tema que, como se ha visto, ha sido tratado ampliamente en este trabajo. Como mostraremos, las ecuaciones que rigen la evolución temporal de carga en ambos centros son diferentes, pero dadas las condiciones experimentales en que usualmente se miden los parámetros asociados a unos y otros es muy difícil discernir si estamos ante un centro del primer grupo o del segundo.

Para completar la revisión teórica del tema, hemos realizado un estudio de la evolución de la capacidad en alta frecuencia en condiciones de captura, como magnitud que nos permite medir la evolución de los factores de ocupación de centros. El análisis

se ha concretado para el caso muy común de una unión p⁺n con un centro bipolar aceptador, obteniendo un resultado que, aunque con fuertes aproximaciones, ha sido extensamente utilizado para interpretar las medidas experimentales de transitorios de dicha magnitud.

Por último, se han revisado detalladamente las técnicas experimentales que utilizan los cambios en la capacidad de una unión pn o barrera Schottky como medida de los cambios en el estado de carga de los niveles profundos en la región de carga espacial asociada a la unión [Sah et al., 1970]. En los métodos de transitorios de capacidad, [Henry et al., 1972], [Lang, 1974], [Barbolla et al., 1976], aquellos niveles profundos en la región de carga espacial son repetitivamente llenados o vaciados por pulsos de tensión, y se miden los transitorios de capacidad debido a la emisión o captura térmica de portadores.

La variación de capacidad debida a la variación de población en un defecto o impureza profunda concreta es directamente proporcional a la concentración de dicho defecto o impureza multiplicada por un factor de ocupación. Dicho factor, entre 0 y 1, mide la fracción de centros llenos durante el pulso aplicado a la muestra. Midiendo el factor de ocupación en función de la duración del pulso aplicado o en función del número de pulsos iguales aplicados, obtenemos el coeficiente de captura del portador, c , para un nivel particular. La sección eficaz de captura, σ , se obtiene de ese coeficiente mediante la expresión:

$$\sigma = \frac{c}{v_{th}} \quad (1)$$

siendo v_{th} la velocidad térmica de los portadores.

Para una muestra con uno o dos niveles profundos (como demostraremos en este trabajo) se pueden medir los diferentes coeficientes de captura observando directamente los transitorios de capacidad como función del número de pulsos aplicados o de su

duración.

La variación de la población de los centros, con el sistema de pulsos empleado, tiene lugar principalmente en la zona de carga espacial durante la emisión y en la zona neutra durante la captura. Debido a la existencia de campos eléctricos en el interior de la zona de carga espacial, éstos pueden influir sensiblemente en los valores de los coeficientes de emisión. Los coeficientes de captura que obtenemos son, sin embargo, característicos del nivel con campo eléctrico nulo.

Dependiendo de la región de temperaturas que deseemos estudiar estos métodos se dividen en dinámicos y estáticos. A temperaturas donde los coeficientes de emisión no son despreciables se utilizan los métodos dinámicos. En estos métodos los niveles profundos se llenan y vacían repetitivamente mediante pulsos de tensión, y se miden transitorios de capacidad debido a la emisión térmica de los portadores atrapados. Se pueden estudiar tales transitorios a una temperatura fija, o , mediante un barrido de temperaturas por el método de espectroscopía de transitorios de centros profundos, DLTS [Lang, 1974].

En resumen, la forma de desarrollar este capítulo consiste en primer lugar en calcular la evolución de los factores de ocupación de los centros bipolares de forma general, realizando aproximaciones dependiendo del tipo de conductividad que tenga el semiconductor para llegar a expresiones analíticas sencillas. A continuación se particularizarán esas expresiones para el caso de una unión p^+n abrupta, y dentro de ella se estudiará la ocupación bajo pulsos de mayoritarios. Este mismo esquema se seguirá para el centro tripolar, con uniones p^+n y n^+p abruptas, con lo que se concluirán las semejanzas y diferencias de ambos modelos de centros. A continuación se calculará analíticamente la capacidad en alta frecuencia de una unión p^+n con centros profundos polarizada en inverso. En la última parte de este capítulo analizaremos las distintas

técnicas capacitivas más usadas para la medida directa de la sección eficaz de captura térmica con el fin de detectar sus deficiencias e inconvenientes, para concluir con la necesidad de desarrollar un procedimiento de obtención de estas magnitudes asociadas a los niveles profundos que salve todas esas deficiencias.

Como herramientas de trabajo admitiremos las ecuaciones de Shockley-Read-Hall, definiendo los coeficientes de captura y emisión de la forma habitual. Por las características de algunos centros importantes en semiconductores como el silicio consideraremos dos tipos de niveles: uno de carácter aceptador localizado la mitad superior de la banda prohibida, y otro donador la mitad inferior. Asimismo consideraremos que estos coeficientes de captura y emisión tendrán los mismos valores que en el equilibrio termodinámico cuando:

- 1º.- El espectro de fonones sea el mismo que en el equilibrio termodinámico, en cuyo caso las probabilidades de transición son las de equilibrio.
- 2º.- La distribución electrónica es del tipo Maxwell-Boltzmann a la temperatura de la red, es decir, el semiconductor es no degenerado.

III.2. EVOLUCIÓN TEMPORAL DEL ESTADO DE CARGA DE CENTROS.

III.2.1. Centros bipolares.

Centros bipolares son aquellos que presentan dos estados de carga. Si se presenta en estado neutro cuando está vacío y negativo cuando atrapa un electrón se dice que tiene carácter aceptador. El estado energético asociado al centro de carácter aceptador se

denomina nivel aceptador (A), y para cuestiones de notación, utilizaremos el subíndice A para diferenciar todos los parámetros asociados a este nivel de otro tipo de niveles. Por otro lado, si el centro se presenta tanto en estado neutro (0), cuando está vacío, como positivo (+), cuando está ocupado por un hueco, el centro se denominará donador, y el estado energético asociado, nivel donador (D). Análogamente usaremos el subíndice D para los parámetros asociados a este tipo de niveles.

III.2.1.1. Centro aceptador.

Estudiamos la evolución de la población de electrones atrapados en el centro bipolar aceptador de la figura 1. Donde N_{TA} representa la concentración de centros profundos, E_{TA} el nivel energético creado en el interior de la banda prohibida, c_{nA} y e_{nA} los coeficientes de captura y emisión de electrones desde el centro respectivamente y c_{pA} y e_{pA} los mismos coeficientes para huecos.

De acuerdo con la cinética de S-R-H, la población de electrones en este tipo de centros, $n_{TA}(t)$, evolucionará temporalmente según la ecuación diferencial:

$$\frac{\partial n_{TA}(t)}{\partial t} = c_{nA}n(t)[N_{TA} - n_{TA}(t)] + e_{pA}[N_{TA} - n_{TA}(t)] - e_{nA}n_{TA}(t) - c_{pA}p(t)n_{TA}(t) \quad (2)$$

donde $n(t)$ y $p(t)$ son las concentraciones de electrones en la banda de conducción y de huecos en la banda de valencia respectivamente. La resolución de esta ecuación para $n(t)$ y $p(t)$ cualesquiera no es en absoluto trivial. Sin embargo, para el caso en que la concentración de centros es mucho menor que la de impurezas poco profundas, se cumple que para un semiconductor tipo N

$$n(t) \approx N_D^+ = n \quad (3)$$

mientras que para uno tipo P

$$p(t) \approx N_A^- = p \quad (4)$$

donde N_D^+ y N_A^- son las concentraciones de impurezas poco profundas ionizadas donadoras y aceptadoras respectivamente.

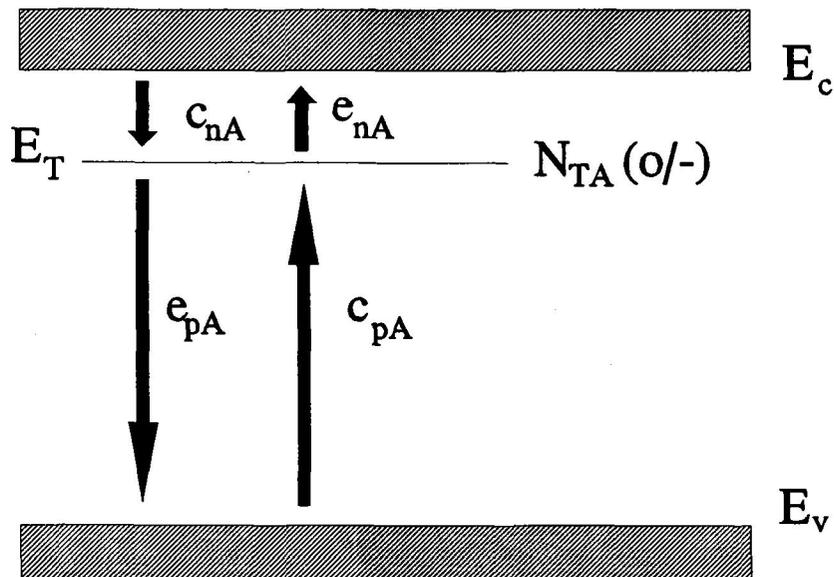


Figura 1.- Transiciones banda-centro para un centro bipolar aceptador, mostrando los coeficientes de captura y emisión correspondientes.

En condiciones estacionarias la concentración de electrones atrapados en este tipo de centro será:

$$n_{TA}(\infty) = \frac{nc_{nA} + e_{pA}}{nc_{nA} + e_{pA} + e_{nA} + pc_{pA}} \quad (5)$$

En un dispositivo electrónico como la unión pn las concentraciones de electrones y huecos varían dependiendo de las distintas regiones de la unión y de la polarización

aplicada. Así, para una unión polarizada en inverso, se puede aproximar $n_{TA}(\infty)$ según la relación siguiente:

- Zona neutra n:

$$f_{TA}(\infty) \equiv \frac{n_{TA}(\infty)}{N_{TA}} = \frac{nc_{nA}}{nc_{nA} + e_{nA}} \approx 1 \quad (6)$$

- Zona neutra p:

$$f_{TA}(\infty) = \frac{e_{pA}}{e_{pA} + e_{nA} + pc_{pA}} \approx 0 \quad (7)$$

- Zona de carga espacial:

$$f_{TA}(\infty) = \frac{e_{pA}}{e_{pA} + e_{nA}} \approx 0 \quad (8)$$

ya que suponemos $e_{pA} \ll e_{nA}$.

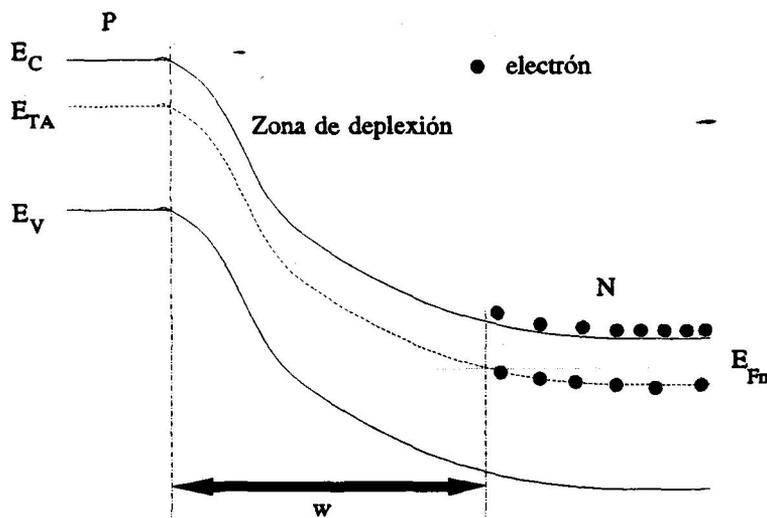


Figura 2.- Diagrama de bandas de una unión pn polarizada en inverso con un centro bipolar aceptador E_{TA} situado en la mitad superior de la banda prohibida. E_{Fn} es el pseudonivel de electrones y w es la anchura de la zona de carga espacial en la región N.

Hay dos formas de modificar la población de este nivel: aumentando o disminuyendo la tensión de polarización aplicada. Si se aumenta la tensión inversa se produce un incremento del ancho de la región de carga espacial. Tras la aplicación de este cambio de polarización los electrones y huecos libres de la antigua zona de carga espacial se mueven hacia las nuevas zonas neutras en un transitorio rápido. De forma más lenta lo harán los electrones atrapados en los centros que quedan dentro de la nueva zona de vaciamiento hasta alcanzar el nuevo estado estacionario con las mismas características mencionadas en las expresiones 6, 7 y 8.

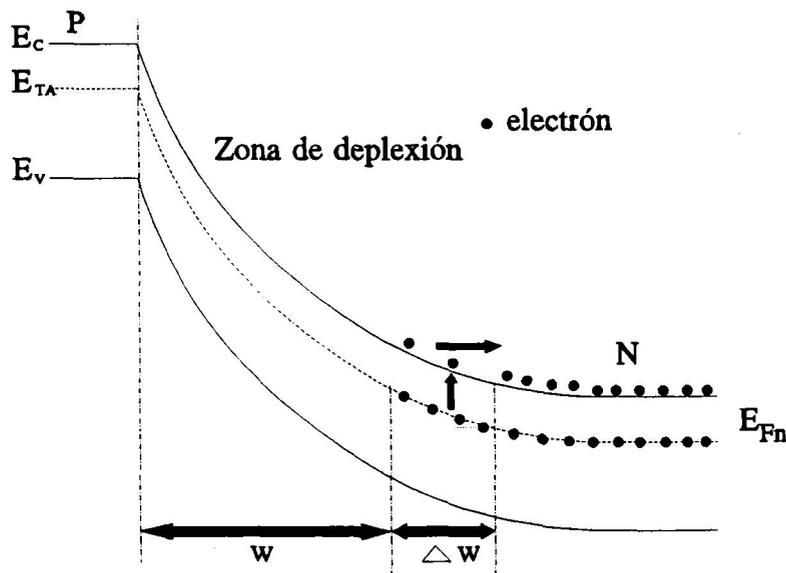


Figura 3.- Diagrama de bandas de la unión pn con una polarización inversa mayor que en la Fig. 2. Δw es el incremento de la zona de depleción donde se emiten portadores hacia la zona neutra tanto desde la banda (transitorio rápido) como desde el centro (transitorio lento o propiamente de emisión del nivel).

La evolución de esta carga será de forma aproximada:

$$n_{TA}(t) = N_{TA} \frac{c_{nA}n}{c_{nA}n + e_{nA}} + \left[n_{TA}(0) - N_{TA} \frac{c_{nA}n}{c_{nA}n + e_{nA}} \right] e^{-(c_{nA}n + e_{nA})t} \approx n_{TA}(0) e^{-e_{nA}t} \quad (9)$$

En cambio, si se disminuye la tensión de polarización a otra tensión menor en valor absoluto pero aún en inversa, se produce un estrechamiento de la zona de carga espacial, y de nuevo, los electrones y huecos libres se extienden por toda la nueva zona neutra en un transitorio rápido. Los centros situados en el extremo de la zona de carga espacial responderán de acuerdo con la expresión aproximada:

$$n_{TA}(t) = N_{TA} \frac{c_{nA}n}{c_{nA}n + e_{nA}} + \left[n_{TA}(0) - N_{TA} \frac{c_{nA}n}{c_{nA}n + e_{nA}} \right] e^{-(c_{nA}n + e_{nA})t} \approx N_{TA} + [n_{TA}(0) - N_{TA}] e^{-nc_{nA}t} \quad (10)$$

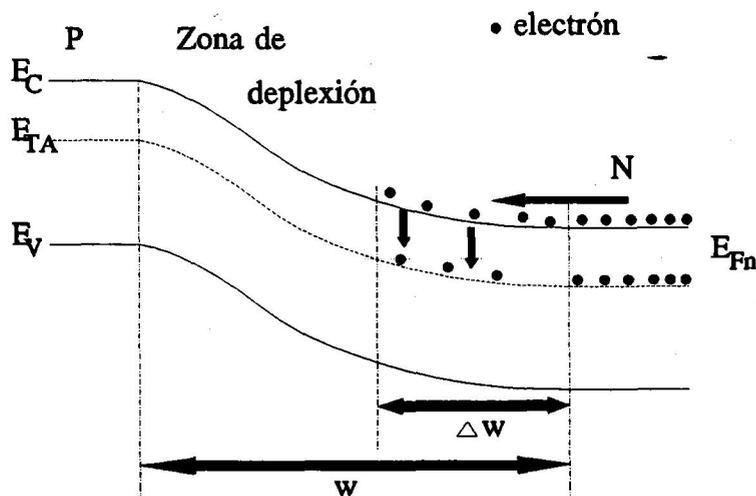


Figura 4.- Diagrama de bandas de la unión pn con una polarización inversa inferior que en la Fig. 2. Δw representa la reducción de la región de carga espacial, donde tiene lugar la captura de electrones por parte del centro.

La única forma de que este centro esté lleno de electrones en la zona P es polarizando la unión en directo. En este caso la concentración de electrones ya no es despreciable en esa región, por lo que en condiciones estacionarias la población de electrones atrapados en el nivel sería:

$$n_{TA}(\infty) = \frac{nc_{nA}}{nc_{nA} + e_{nA} + pc_{pA}} \quad (11)$$

Si se modifica la polarización de una unión entre inversa y directa se dice que se aplican pulsos de minoritarios debido a que son estos portadores (electrones en la zona P) los que interactúan principalmente con los niveles profundos. Por el contenido de este trabajo no nos centraremos en este punto.

III.2.1.2. Centro donador.

De manera totalmente análoga al estudio de la cinética del centro de carácter aceptador se realiza para un centro donador situado en la mitad inferior de la banda prohibida. La única diferencia estriba que donde antes se hablaba de población de electrones del centro ahora se tiene la población de huecos $p_{TD}(t)$ y que hay que intercambiar concentración de electrones por concentración de huecos. Como se indicó anteriormente los coeficientes de emisión y captura vienen notados por el subíndice D. Así, la evolución de la población de huecos del centro viene expresada por:

$$\frac{\partial p_{TD}(t)}{\partial t} = c_{pD}p[N_{TD} - p_{TD}(t)] + e_{nD}[N_{TD} - p_{TD}(t)] - e_{pD}p_{TD}(t) - c_{nD}np_{TD}(t) \quad (12)$$

donde n y p están sujetos a la aproximación dada por las ecuaciones (3) y (4).

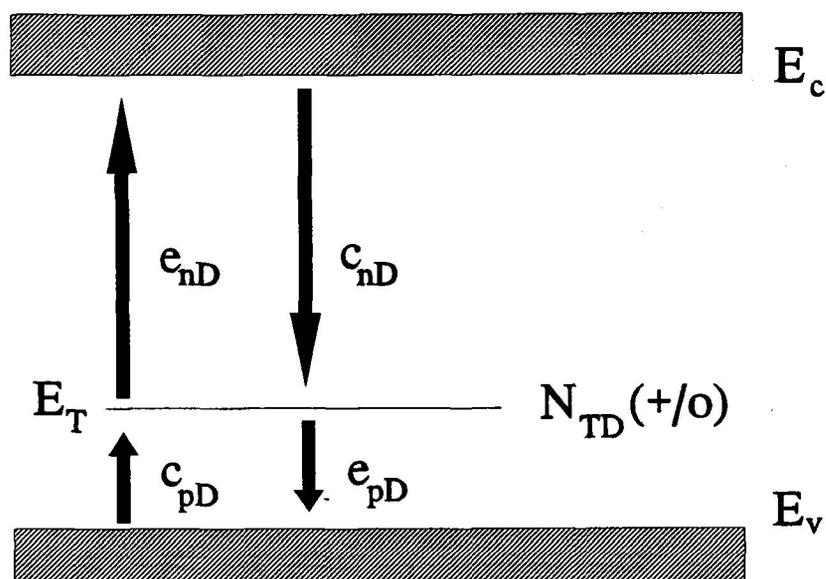


Figura 5.- Transiciones banda-centro para un centro bipolar donador señalando los coeficientes de emisión y captura correspondientes.

III.2.1.3. Evolución de la población de los centros en una unión p^+n con dos niveles.

Hemos mencionado que una de las estructuras más frecuentemente utilizadas a la hora de analizar centros profundos es la unión p^+n (ó n^+p) abrupta sometida a pulsos de mayoritarios. También es frecuente encontrarse con más de un nivel profundo en el interior de la banda prohibida. Dado el trabajo de laboratorio posterior que se va a realizar, vamos a estudiar el comportamiento transitorio de un unión p^+n bajo pulsos de mayoritarios con dos centros bipolares uno aceptador y otro donador con las características antes descritas que modificarán sus poblaciones de electrones y huecos de acuerdo con la polarización aplicada. Esta situación es común para impurezas metálicas (Pt, Ti, Au, etc) difundidas en diodos de silicio [Pals,1974], [Morante et al.,1982c].

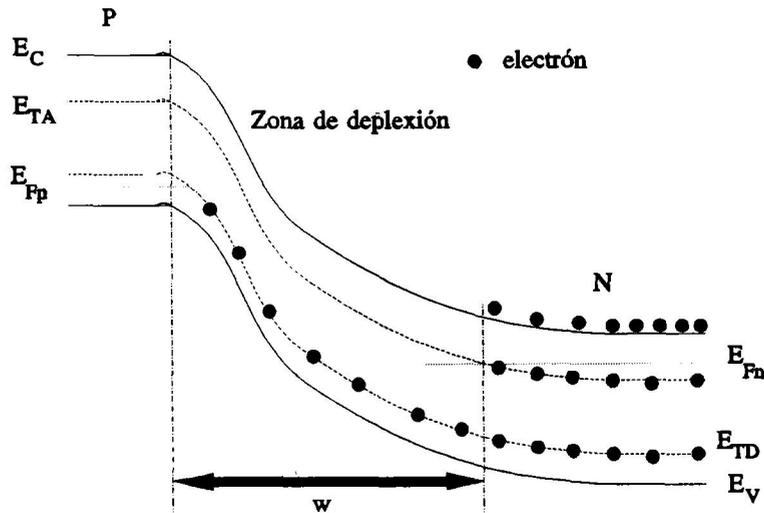


Figura 6.- Diagrama de bandas de una unión p+n abrupta polarizada en inverso con dos niveles profundos (E_{TA} y E_{TD}). Se muestran los pseudoniveles de fermi de electrones en la zona N, E_{FN} y de huecos en la zona P, E_{FP} y la región de esa zona con los centros ocupados por electrones.

Las aproximaciones que con más frecuencia se han utilizado y son comunes a muchos trabajos, [Pals, 1974], [Barbolla et al,1976], [Brotherton y Bradley,1982] son:

- 1.- Concentraciones de electrones y huecos libres constantes en el tiempo, es decir concentración de centros profundos despreciables respecto a las de dopantes básicos.
- 2.- Vaciamiento en la región de carga espacial.
- 3.- Unión abrupta. Las variaciones significativas de la región de carga espacial ocurren en la zona menos dopada de la unión, en este caso la región N.
- 4.- La evolución debido a cambios en la anchura de la región de deplexión, sin tener en cuenta los efectos de bordes.

Sea V_R la polarización inversa de la unión ($V_R < 0$). En $t=0$ disminuimos bruscamente esa polarización inversa a otra tensión no positiva $V_R + U$, durante un tiempo τ , y a continuación se restablece la polarización inversa inicial. Este cortocircuito de la

unión permite que durante ese tiempo τ penetren portadores mayoritarios en una zona que inicialmente era de vaciamiento, con lo que al estar los centros vacíos tenderán a capturar portadores, electrones en la zona N en este caso. Al restablecer la polarización inicial esos electrones atrapados serán emitidos para restaurar el equilibrio que corresponde a esa polarización.

Como se aprecia en la figura 6, el nivel donador permanece lleno de electrones en la región de interés y su población no se verá afectada por la reducción de la tensión de polarización. Por tanto, $p_{TD}(t) \approx 0$ durante todo el transitorio, y dentro de estas aproximaciones, no podemos obtener información de ninguno de sus coeficientes de captura y emisión. En cuanto al nivel aceptador la variación de población se puede expresar según las ecuaciones (9) y (10).

A la vista de estas ecuaciones podemos obtener los valores de los coeficientes de emisión y captura de electrones del centro, sin más que relacionar alguna magnitud medible con esta población de electrones. De la ecuación (9) se puede estudiar la cinética de vaciado del centro extrayendo el coeficiente de emisión de electrones y de la ecuación 10 se calcula fácilmente el coeficiente de captura estudiando la cinética de llenado del nivel.

El análisis para una unión n^+p con estos niveles profundos es totalmente análogo, considerando ahora que la interacción de mayor peso es con la banda de valencia en el lado P con el nivel de carácter donador.

A continuación realizamos el mismo estudio para un centro tripolar calculando las soluciones a las ecuaciones que describen la cinética de los niveles profundos asociados y particularizando para varios casos. Podremos, por tanto, ver las semejanzas y diferencias entre los centros bipolares y tripolares.

III.2.2. Centro tripolar.

Una impureza en una red semiconductor se dice que tiene carácter tripolar cuando se puede presentar en tres estados de carga. En este estudio nos ceñiremos a los centros que pueden presentarse neutros (0), cargados positivamente (+) y cargados negativamente (-). Es un hecho experimental que estos centros introducen dos niveles profundos de energía. Uno de ellos es de carácter aceptador y asumiremos que se encuentra en la mitad superior de la banda prohibida. En este nivel las impurezas pueden estar neutras (0), cuando están vacías de electrones, o negativas (-), cuando ha atrapado un electrón. El segundo nivel profundo, que estará en la mitad inferior de la banda prohibida, presenta carácter donador. Aquí las impurezas estarán o neutras o positivas según se encuentran vacías o hayan capturado un hueco.

Sea N_T la concentración total de impurezas en el semiconductor. Como sea dicho estas se pueden presentar en tres estados de carga, es decir:

$$N_T = N_T^0 + N_T^+ + N_T^- \quad (13)$$

donde los superíndices indican dicho estado de carga. En términos de factores de ocupación, que es la magnitud que vamos a manejar, obtenemos dividiendo la ecuación (13) entre N_T :

$$f_T^0 + f_T^+ + f_T^- = 1 \quad (14)$$

Por tanto, para estudiar la evolución temporal de los estados de carga de un centro tripolar basta con calcular dos de los tres factores de ocupación. Nosotros, para establecer analogías con los centros bipolares, calcularemos el factor de ocupación de electrones, f_T^- , y el factor de ocupación de huecos, f_T^+ . Continuando con la notación del apartado anterior, en la figura 7 se detallan todas las transiciones banda-centro que vamos a

considerar entre los niveles del centro tripolar y las bandas.

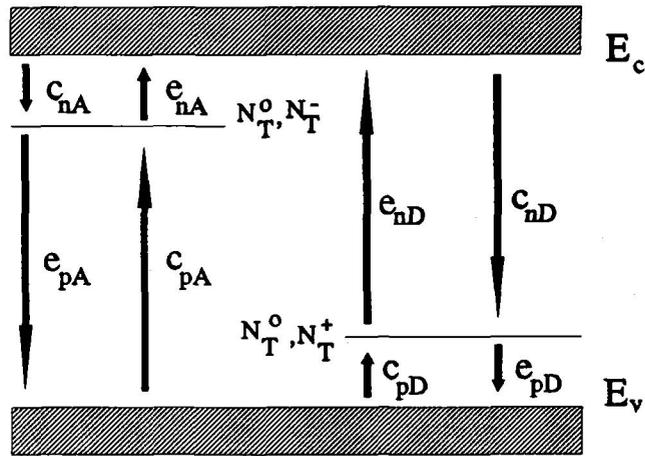


Figura 7.- Transiciones banda-centro entre los dos niveles profundos (uno aceptador en la mitad superior de la banda prohibida y el otro donador en la mitad inferior) de un centro tripolar.

La variación del factor de ocupación de electrones será debida a:

- 1.- Captura de un electrón de la banda de conducción por un centro neutro.
- 2.- Emisión de un hueco del centro en estado neutro.
- 3.- Captura de un hueco de la banda de valencia en estado negativo.
- 4.- Emisión de un electrón desde el centro en estado negativo.

Por tanto la ecuación diferencial que rige esta evolución será:

$$\frac{\partial f_T}{\partial t} = c_{nA} n f_T^0 + e_{pA} f_T^0 - c_{pA} p f_T - e_{nA} f_T \quad (15)$$

Análogamente la variación en la población de huecos del centro vendrá dada por las siguientes transiciones:

- 1.- Captura de un hueco de la banda de valencia por el centro neutro.

2.- Emisión hacia la banda de conducción de un electrón del centro en estado neutro.

3.- Captura de un electrón de la banda de conducción en estado positivo.

4.- Emisión de un hueco desde el centro en estado positivo hacia la banda de valencia.

Resultando la ecuación diferencial para la evolución del factor de ocupación de huecos:

$$\frac{\partial f_T^*}{\partial t} = c_{pD} p f_T^0 + e_{nD} f_T^0 - c_{nD} n f_T^* - e_{pD} f_T^* \quad (16)$$

En el Apéndice C se detalla la resolución del trio de ecuaciones (14), (15) y (16). Las soluciones que cumplen la condición (C.17) son:

$$f_T^-(t) = \alpha \tau_A + [f_T^-(0) - \alpha \tau_A] e^{-\frac{t}{\tau_A}} \quad (17)$$

$$f_T^+(t) = \beta \tau_D + [f_T^+(0) - \beta \tau_D] e^{-\frac{t}{\tau_D}} \quad (18)$$

siendo:

$$\begin{aligned} \alpha &= c_{nA} n + e_{pA} \\ \tau_A &= (c_{nA} n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA} p)^{-1} \\ \beta &= c_{pD} p + e_{nD} \\ \tau_D &= (c_{pD} p + e_{nD} + e_{pD} + c_{nD} n)^{-1} \end{aligned} \quad (19)$$

Como se menciona en el Apéndice C, las ecuaciones (17) y (18) son aplicables al estudio de transitorios en una unión sometida a pulsos de mayoritarios. Para minoritarios no son válidas, existiendo acoplamiento de las constantes de tiempo de ambos niveles. A

la vista de las ecuaciones (17), (18) y (19) tanto las evoluciones de los factores de ocupación de portadores del nivel aceptador como del nivel donador del centro tripolar es idéntica a la del centro bipolar correspondiente.

Particularizando para una unión p^+n bajo pulsos de mayoritarios, suponemos, como es habitual, que la variación significativa de la región de carga espacial es en el lado N. Allí podemos tomar $p=0$. Por tanto, β es prácticamente nulo y es válida la condición (C.17). En una unión n^+p , ahora la población de electrones de los centros apenas se modifica en la zona de interés, la región P, y además $\alpha \approx 0$. Cuando se inyectan minoritarios las ecuaciones (17) y (18) no son válidas ya que no se pueden separar los exponentes de las exponenciales en coeficientes del nivel donador y del nivel aceptador, sino, como se indica en el Apéndice C se mezclan los coeficientes de ambos niveles. En este caso sí se podría detectar la existencia de un tipo de centro y otro.

Resumiendo, en medidas experimentales con técnicas que utilicen sólo pulsos de mayoritarios para modificar las poblaciones de los centros profundos no es posible discernir entre un centro tripolar y dos centros bipolares, uno aceptador y otro donador con las características de este estudio. En consecuencia, como las técnicas que vamos analizar son de pulsos de mayoritarios, dado nuestro propio trabajo experimental posterior, la cinética de las impurezas que presenten dos niveles profundos con las características señaladas se estudiarán como si se tratara de la evolución de dos niveles bipolares independientes.

III.3. CAPACIDAD EN ALTA FRECUENCIA DE UNA UNIÓN p⁺n.

Una de las magnitudes que nos permite calcular la evolución temporal de los factores de ocupación de niveles profundos es la capacidad en alta frecuencia y pequeña señal una unión pn. Como vamos a analizar y desarrollar técnicas experimentales capacitivas, veamos la dependencia de la capacidad en alta frecuencia y pequeña señal de una unión pn con el factor de ocupación de los centros. Aunque este análisis es conocido, detallaremos los pasos intermedios ya que pretendemos estudiar las aproximaciones que se han venido utilizando en este tratamiento

Consideremos una unión p⁺n abrupta con un nivel profundo aceptador E_T en la mitad superior de la banda prohibida, polarizada en inverso, como la de la figura 5. La concentración de impurezas poco profundas es N_D y la de centros N_T, analizando el caso en que N_T < N_D.

La capacidad en alta frecuencia, es decir aquella tomada a una frecuencia que no permite que los centros profundos sigan su variación ($\omega \gg e_{nA}^{-1}$), se define como:

$$C = \frac{\epsilon A}{w} \quad (20)$$

donde ϵ es la permitividad eléctrica del semiconductor, A es la sección de la muestra y w el ancho de la región de carga espacial. En este caso simple vamos a aproximar w por el ancho de la región de carga espacial en el lado N. Si por algún mecanismo se permite la captura o emisión de electrones por parte de los centros en el interior de la zona de carga espacial se modifica la carga almacenada en esta región y como primera consecuencia habrá una variación de la anchura de la zona de carga espacial. Hemos visto antes que esta modificación de la población de los centros se puede conseguir aplicando pulsos de tensión positivos o negativos bien sea para capturar o emitir portadores.

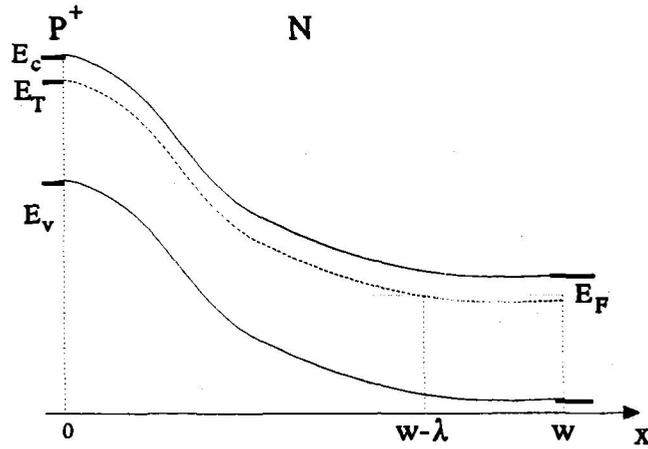


Figura 8.- Esquema de la zona de carga espacial de una unión p⁺n, indicando su anchura, w, y la zona de borde, [w-λ,w].

Consideremos nuestra unión polarizada en inverso, $V_R < 0$, y que como consecuencia de estos pulsos de amplitud U superpuestos a ella aparece una modificación de la carga atrapada en los centros en la región $[w-\Delta w, w]$, a la vez que de la propia anchura w. Calculemos como varía w en función del tiempo para una situación de captura o emisión de electrones, despreciando las regiones de bordes, $\lambda \ll w$. Para relacionar el valor de la carga en los centros en ese instante con la anchura w se debe resolver la ecuación de Poisson en la zona de vaciamiento:

$$\nabla^2 \phi(x,t) = \frac{\rho(x,t)}{\epsilon} \quad (21)$$

siendo $\phi(x,t)$ el potencial eléctrico y $\rho(x,t)$ la densidad de carga en la unión. Teniendo en cuenta la aproximación de vaciamiento y la aproximación de bordes abruptos (válida para amplitudes de pulsos U grandes y polarización V_R también grandes), podemos expresar la densidad de carga en el lado N como:

$$\rho(x,t) = \begin{cases} qN_D & 0 < x < w-\Delta w \\ q[N_D - n_T(t)] & w-\Delta w < x < w \\ 0 & x > w \end{cases} \quad (22)$$

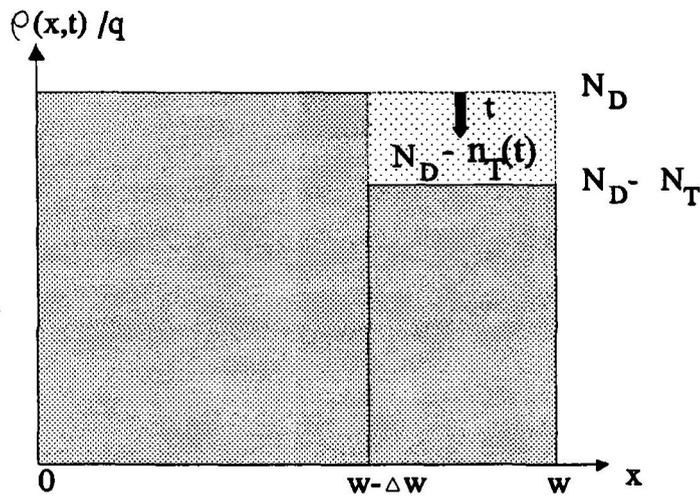


Figura 9.- Carga positiva en la región de carga espacial de una unión P⁺N en condiciones transitorias de captura en la región entre $w-\Delta w$ y w por una reducción de la tensión inversa de polarización. Las regiones de bordes se han despreciado.

Combinando (21) y (22) se obtiene:

$$V_{bi} - V_R = \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^w x \rho(x) dx \quad (23)$$

con V_{bi} el potencial barrera de la unión y V_R la polarización en inverso. Al resolver las integrales con concentraciones de impurezas constantes resulta:

$$V_{bi} - V_R = q[N_D - n_T(t)] \frac{w^2}{2} + qn_T(t) \frac{(w-\Delta w)^2}{2} \quad (24)$$

recordando que si $N_T \ll N_D$ se reduce:

$$V_{bi} - V_R = q[N_D - n_T(t)] \frac{w^2}{2} \quad (25)$$

Por tanto,

$$w(t) = \left[\frac{2(V_{bi} - V_R)}{q(N_D - n_T(t))} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (26)$$

El cuadrado de la capacidad derivada de este desarrollo vendrá dada por:

$$C^2(t) = \frac{q\epsilon^2 A^2}{2(V_{bi} - V_R)} [N_D - n_T(t)] \quad (27)$$

Expresiones análogas a la ecuación (27) han venido usándose extensamente en el cálculo de los coeficientes de emisión y captura de los centros profundos en semiconductores [Lang, 1974], [Barbolla et al., 1976], [Morante et al., 1982c], [Kwon et al., 1987]. En el caso de muestras con concentración de impurezas profundas mucho menor que el de impurezas básicas, y despreciando los efectos de bordes, del logaritmo del transitorio de capacidad se pueden extraer los parámetros deseados sin más que hacer variar el factor de ocupación de una manera controlada, provocando situaciones experimentales que permitan aislar un coeficiente u otro para obtener su valor con la temperatura, campo eléctrico, etc. En el apartado anterior, donde se estudiaban detalladamente las poblaciones de portadores de los centros según las muestras y las condiciones experimentales, se analizó este tema. A pesar de la simplicidad de la expresión (27) de ella se han ido sacando algunas conclusiones.

Por ejemplo, esta expresión admitía la exponencialidad de los transitorios de capacidad donde el exponente venía gobernado por los coeficientes del centro. Pronto se

vio que esto no era generalizable [Lang,1974], [Mircea et al.,1977], [Zylbersztejn,1978], sino para casos muy concretos donde se cumplían estas aproximaciones. En el momento en el que la concentración del centro es del orden de la poco profunda o las tensiones para llenar o vaciar las trampas son pequeñas, nos apartamos del comportamiento exponencial. No corregirla puede dar como resultado valores falseados de los coeficientes buscados. De la expresión (27) se concluye que los transitorios de emisión, es decir, cuando $n_T(t)$ decrece con el tiempo, la capacidad aumenta. Sin embargo, se han encontrado diodos de potencia rápidos, donde las distribuciones tanto de impurezas básicas como profundas no se corresponden con las utilizadas como hipótesis de este desarrollo, ni permiten el uso de estas aproximaciones. Así, como resultado más característico, se ha hallado experimentalmente y comprobado teóricamente [Jiménez-Tejada et al.,1992a] que los transitorios de capacidad no sólo dejan de ser exponenciales sino que pierden el carácter creciente característico de la expresión (27).

III.4. TÉCNICAS DE MEDIDA DIRECTA DE LA SECCIÓN EFICAZ DE CAPTURA TÉRMICA.

Concluamos esta revisión de los tratamientos analíticos de la evolución temporal de los factores de ocupación de niveles profundos, comentando brevemente dos de las técnicas capacitivas experimentales más ampliamente utilizadas en la caracterización de uniones pn con centros y empleadas para la medida de σ : DLTS [Lang,1974] y el método de cortocircuito de la unión [Barbolla et al.,1976]. Analizaremos sus condiciones de validez y las aproximaciones usadas. Dada la tecnología actual y las nuevas aplicaciones de los dispositivos nos encontramos con estructuras que muchas veces no se corresponden con modelo clásicos, sino que estos modelos deben ser ampliados con el siguiente problema de su mayor complejidad. Esto nos llevó al desarrollo de un método nuevo de

cálculo de la sección eficaz de captura en cualquier tipo de uniones pn, que se mostrará en el capítulo siguiente, en el que se incorporan fielmente tanto las condiciones experimentales como las características de la muestra a analizar.

III.4.1. Técnica de espectroscopía de transitorios de centros profundos (DLTS).

Veamos ahora la primera de estas dos técnicas de la que podemos extraer información sobre la cinética de captura de los centros profundos. Analizaremos los inconvenientes que presenta a la hora de enfrentarnos a muestras reales. De las diferentes magnitudes medibles en una unión, capacidad, tensión, intensidad, nos vamos a centrar en DLTS de capacidad en este estudio [Lang, 1974]. Esta técnica consiste básicamente en aplicar pulsos de tensión positivos a una unión polarizada en inverso; dependiendo de la amplitud se puede introducir a la unión en directa o seguir en inversa durante dicho pulso. La duración del pulso es menor al tiempo de llenado completo del nivel profundo. Al disminuir la duración del pulso aplicado también disminuye la altura de la señal de DLTS, ya que dicha altura está relacionada con la concentración efectiva de centros que hayan capturado portadores. Esta concentración efectiva del nivel se puede aproximar según hemos visto, en el caso de captura de electrones y para concentraciones de centros menores del 10% de las de dopante básico:

$$n_T(t) = N_T(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau}}) \quad (28)$$

con

$$\tau = \frac{1}{c_n n + e_n} \quad (29)$$

siendo Δt la duración del pulso aplicado y N_T la concentración de impurezas profundas.

El valor de τ se puede obtener a partir de la pendiente de la gráfica:

$$F(\Delta t) = \ln\left(\frac{N_T - n_T}{N_T}\right) \quad (30)$$

para distintos anchuras de los pulsos aplicados.

Esta técnica experimental tal como la acabamos de presentar ha sido mejorada para tener en cuenta algunos efectos, como por ejemplo, control automático sobre las condiciones de medida [Weiss y Kassing,1988]; medida bajo inyección de minoritarios [Fourches,1991]; desordenes en los dopados [Hardalov et al.,1992]; y análisis de muestras con niveles muy próximas entre sí [Wang y Wu,1992]. Sin embargo sigue presentando algunos inconvenientes que paso a enumerar:

1.- De la ecuación (29) apreciamos que es necesario el conocimiento del coeficiente de emisión correspondiente para obtener el valor del coeficiente de captura. Sin embargo, como se ha mencionado antes, la emisión observada es en una zona con presencia de campo eléctrico. La posible dependencia del coeficiente de emisión con dicho campo puede ser un inconveniente a la hora de obtener resultados precisos.

2.- Como ya se ha puesto de manifiesto, en la zona de carga espacial de una unión pn existen dos regiones distintas. Por un lado está aquella más cercana a la unión metalúrgica, donde se cumple la hipótesis de vaciamiento, y una región de borde donde la concentración de portadores no es despreciable. A la hora de la captura estas dos regiones presentarán comportamientos diferentes. Al aplicar el pulso positivo de tensión, estas regiones se llenarán con constantes de tiempo diferentes con la consiguiente dificultad a la hora de obtener resultados a partir de las expresiones analíticas.

Como ha sido propuesto por varios autores, la manera de reducir la importancia de este último problema consiste en la aplicación de pulsos de mucha amplitud y usando polarizaciones inversas altas; de esta forma la región de borde es despreciable frente a

la región donde se produce la captura. De esta manera la aportación de la zona de borde es despreciable en el cambio de capacidad total.

3.- La imprecisión en el conocimiento del perfil de impurezas profundas es uno de los problemas más difíciles de solventar a la hora de aplicar todos los métodos capacitivos hasta ahora desarrollados para medir la sección eficaz de captura térmica. En las técnicas usadas hasta ahora, donde se tratan las medidas con expresiones analíticas en las que aparece explícitamente este parámetro, es una fuente de error importante. Las variaciones espaciales de dicha concentración pueden ser importantes ya que, según hemos visto, las técnicas experimentales deben barrer zonas amplias de la muestra. Según algunos autores este error se cifra en torno al 30 por ciento.

A la vista de todos estos inconvenientes, el método DLTS, no parece presentar la precisión requerida para poder obtener unos valores fiables de la sección eficaz de captura térmica, sobre todo si se pretenden comparar con resultados teóricos.

A continuación vamos a estudiar una técnica experimental de medida directa de los coeficientes de captura que se desarrolló paralelamente a la DLTS. El montaje experimental necesario para su puesta en funcionamiento es más simple que en el caso anterior. Esta técnica la vamos a denominar técnica de cortocircuito de la unión. En ella, en vez de estudiar los transitorios de capacidad frente a la duración del pulso aplicado, se aplican pulsos idénticos un número de veces hasta el llenado total del centro.

III.4.2. Técnica experimental de cortocircuito de la unión.

Esta técnica experimental ha sido ampliamente utilizada en el estudio de centros

profundos desde que fue desarrollada por Henry et al. [Henry et al.,1972] . A pesar de que ha sido extensamente descrita y discutida en muchos trabajos, pasamos a detallarla debido a que nuestro propósito es tener en cuenta todos los detalles experimentales de esta técnica para su incorporación en un análisis numérico. Esto sería imposible realizarlo de forma analítica como veremos. Esta técnica tiene dos modalidades, a tensión constante [Pals,1974] y a capacidad constante [Barbolla et al.,1976]. Nosotros hemos realizado el trabajo para tensión constante, es decir, obteniendo transitorios de capacidad durante la captura de portadores por centros profundos.

Estudemos el caso de captura de electrones por un centro aceptador situado en la mitad superior de la banda prohibida. Supongamos una unión p^+n abrupta polarizada en inverso a una tensión V_R ($V_R < 0$) y a una temperatura lo bastante alta para que los centros alcancen en un tiempo corto su población estacionaria. A continuación, la unión se enfría hasta la temperatura donde se va a medir el coeficiente de captura. Dicha temperatura, será tal que la emisión desde el centro de interés sea despreciable durante el tiempo total de la experiencia. En estas condiciones se aplica a la unión una secuencia de pulsos positivos de amplitud U (figura 10). U será menor que el valor absoluto de la polarización inicial, de manera que no se polariza la unión en directo. Estos pulsos, de duración τ_p , provocarán la reducción brusca de la tensión de polarización de V_R a $V_R + U$, y de la zona de carga espacial de w a $w - \Delta w$, siendo w el ancho de la región de carga espacial de la unión.

Al cabo de un número suficiente de pulsos, teóricamente infinitos, la densidad de portadores capturados en la región comprendida entre w y $w - \Delta w$ habrá alcanzado su valor estacionario.

Con objeto de poder despreciar la captura en la región de borde de la región de carga espacial, U debe ser lo suficiente para que se cumpla:

$$w > \lambda \quad (31)$$

donde λ viene definida en la figura 5.

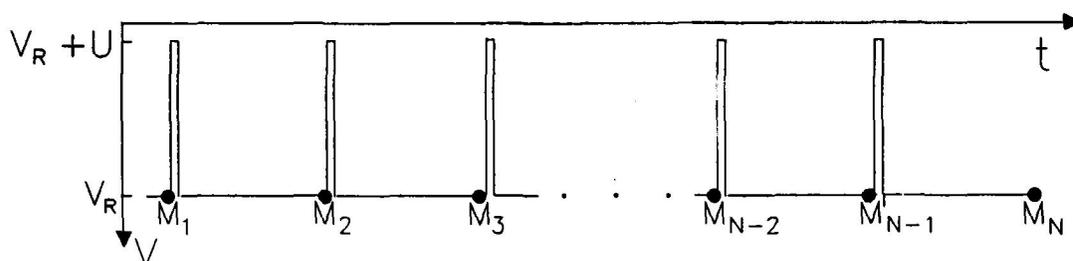


Figura 10.- Secuencia de N pulsos de polarización para la captura aplicada a la unión P+N en la técnica experimental del cortocircuito de la unión para calcular la sección eficaz de captura de centros profundos.

La capacidad de la unión medida después de la aplicación del n-ésimo pulso viene dada, según la ecuación (27):

$$C^2(t) = \frac{q\epsilon^2 A^2}{2|V_{bi} + V_R|} (N_D - n_T(t)) \quad (32)$$

con $t = n\tau_p$. Hay que recordar que la ecuación (32) es válida si $N_T \ll N_D$.

Por otro lado tenemos que, si los efectos de la emisión son despreciables, en la región de captura la ecuación diferencial de Shockley, Read y Hall queda:

$$\frac{dn_T(t)}{dt} = c_n (N_D - n_T(t))(N_T - n_T(t)) \quad (33)$$

siendo c_n el coeficiente de captura de electrones. La solución de esta ecuación diferencial

es dentro de la aproximaciones indicadas anteriormente:

$$\frac{N_T - n_T(t)}{N_D - n_T(t)} = \frac{N_T - n_T(0)}{N_D - n_T(0)} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (34)$$

siendo la constante de tiempo de la exponencial:

$$\tau = \frac{1}{c_n(N_D - N_T)} \quad (35)$$

La combinación de las ecuaciones (32) y (34) nos proporciona una relación entre la capacidad y el coeficiente de captura:

$$\frac{C^2(t) - C^2(\infty)}{C^2(t)} = \frac{C^2(0) - C^2(\infty)}{C^2(0)} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (36)$$

La constante de tiempo τ , por tanto, se obtiene de la pendiente de la curva:

$$F(t) = \ln \frac{C^2(t) - C^2(\infty)}{C^2(t)} \quad (37)$$

Para obtener la sección eficaz de captura, σ_n , se calcula:

$$\sigma_n = \frac{1}{\tau(N_D - N_T)v_{th}^n} \quad (38)$$

siendo v_{th}^n la velocidad térmica en equilibrio de los electrones en la banda de conducción. La diferencia $N_D - N_T$ se obtiene por cualquiera de los métodos conocidos [Jiménez et al., 1992b].

Al igual que la técnica DLTS, analicemos algunas de las limitaciones y problemas que presenta este procedimiento experimental, apoyado por expresiones analíticas del tipo

reseñado.

1.- En los transitorios experimentales obtenidos por este método, es necesario que la captura la efectúe un sólo centro, a fin de medir el coeficiente del nivel deseado. En las uniones con dos o más centros, los resultados son fiables en aquellas regiones de temperaturas donde un coeficiente domina sobre los demás.

2.- Las impurezas metálicas más utilizadas en dispositivos (Pt, Au, Ti, etc.) presentan al menos dos niveles profundos en el silicio. Habitualmente, un nivel bipolar aceptador y otro donador. Por esta razón, con este método, son necesarias dos uniones muy asimétricas (p^+n y n^+p) o dos barreras Schottky, para que la captura sea medida en la región menos dopada, y así caracterizar un nivel u otro. Lo ideal sería ser capaces de medir la captura en ambos niveles profundos sobre una misma muestra, para que no influyan posibles diferencias tecnológicas entre unas muestras u otras.

3.- Asimismo, es necesario aplicar tensiones inversas de polarización elevadas, y superponer pulsos positivos de bastante amplitud, para que los efectos de bordes no afecten significativamente al resultado. Esta necesidad de barrer zonas amplias de la unión, que capturan a la vez, hace que un posible gradiente en las concentraciones de dopantes básicos y profundos, influya de forma sensible en los transitorios de capacidad medidos, y por tanto, en el valor final de la sección eficaz de captura térmica. Hay que notar que imprecisiones en los valores de estas concentraciones, que se utilizan explícitamente en las expresiones analíticas, pueden provocar un error importante.

4.- Cuando los tiempos de relajación son muy pequeños, los pulsos positivos aplicados deben ser de muy corta duración (del orden de pocas decenas de nanosegundos) para poder medir transitorios con el número suficiente de puntos. La obtención práctica de estos pulsos tan estrechos es difícil, y lo que suelen proporcionar los equipos

experimentales son pulsos donde los tiempos de subida y bajada son ya comparables a los de la zona plana. Es lógico pensar que en los flancos de los pulsos también ocurre captura, efecto que es imposible reflejar con las técnicas experimentales realizadas hasta la fecha. Además, como demostraremos más adelante, no basta con realizar un promedio de esos tiempos, considerando un pulso abrupto con la zona plana más ancha, para obtener un resultado preciso. Esta imprecisión en el valor de τ_p no permite utilizar las expresiones analíticas arriba indicadas.

5.- En esta técnica, normalmente se ha supuesto que los procesos de emisión son despreciables durante la medida (si ocurre esto diremos que trabajamos a temperaturas bajas). Para estimar la posible emisión se ha comparado la inversa del coeficiente de emisión del nivel bajo estudio frente al tiempo total de obtención de un transitorio. Sin embargo, como demostraremos, aún con concentraciones de impurezas profundas menores del 20 por ciento de las poco profundas, y a temperaturas bajas, la emisión que se presenta es importante. Este fenómeno puede distorsionar enormemente el valor de la sección eficaz de captura térmica.

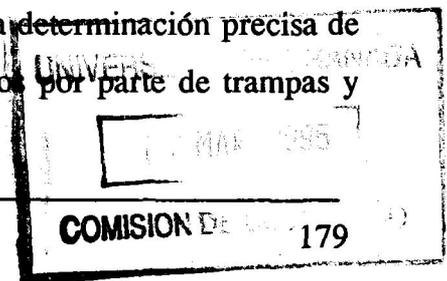
CAPÍTULO IV:

TÉCNICA COMBINADA NUMÉRICO-EXPERIMENTAL DE CALCULO DIRECTO DE LA SECCIÓN EFICAZ DE CAPTURA TÉRMICA.

IV.1. INTRODUCCIÓN.

A la vista de las limitaciones y aproximaciones que suponen las técnicas usuales para la obtención experimental de la sección eficaz de captura térmica, se hace necesario el desarrollo de un procedimiento mucho más preciso y que recoja todos los fenómenos que tienen lugar durante el proceso de medida. Este método debe recoger y salvar todas las limitaciones de los anteriores y realizar un cálculo con el menor número de aproximaciones posible para poder reproducir fielmente las características del proceso de captura de portadores por impurezas en el material semiconductor.

En este capítulo, proponemos un método que permite la determinación precisa de la sección eficaz de captura térmica de portadores mayoritarios por parte de trampas y



la concentración de éstas en uniones pn asimétricas y diodos Schottky [Palma et al., 1992, 1993]. Estos tipos de uniones ya han sido previamente examinadas mediante análisis numérico, incluyendo efectos como la captura en la cola de Debye, la emisión térmica de los portadores a temperaturas superiores a la "congelación" de las trampas y la alta concentración de impurezas, pero siempre bajo hipótesis de unión abrupta [Pons, 1984], [Meijer et al., 1984], [Thurber y Lowney, 1987]. Sin embargo, las uniones pn fabricadas por implantación iónica o difusión no pueden ser tratadas como abruptas debido a la gradualidad de los perfiles de las impurezas poco profundas. Además, en los casos en los que la concentración de impurezas profundas sea comparable a la de básicas se altera la distribución de portadores libre en el borde de la región de carga espacial, por lo que los modelos basados en la captura en la cola de Debye no son aplicables. Todos estos fenómenos deben ser tratados con precisión, siendo este el propósito de este capítulo.

Otra fuente común de error en los procedimientos experimentales proviene de la omisión de algunos detalles que son importantes para obtener valores precisos de la sección eficaz de captura. En particular, en la técnica del cortocircuito de la unión, no se tienen en cuenta los tiempos de subida y bajada de los pulsos de polarización aplicados a la unión, magnitudes que son especialmente importantes cuando los tiempos de relajación de captura son muy cortos.

Nuestro procedimiento evita todos esos inconvenientes mediante el uso de una técnica combinada numérico-experimental. La simulación del comportamiento eléctrico de uniones durante su respuesta transitoria, sin aproximaciones e incorporando todos los detalles experimentales al algoritmo numérico, garantiza un valor preciso de la sección eficaz de captura de los centros profundos. Este método es aplicable a todo tipo de uniones pn, pero es especialmente útil para uniones con un perfil de impurezas poco profundas gradual y cuando hay más de un nivel profundo en la unión. En este caso, nuestro procedimiento calcula simultáneamente las secciones eficaces de captura de

portadores mayoritarios de todos los centros profundos, así como su concentración.

Nuestro método inicialmente consiste en medir transitorios experimentales de capacidad durante la captura con una técnica análoga a la referida en el capítulo anterior como de cortocircuito de la unión. Durante la fase experimental hemos anotado todos los detalles experimentales: forma de los pulsos aplicados y tiempo de respuesta de los aparatos. Posteriormente, se ha simulado numéricamente el comportamiento eléctrico de la unión con centros profundos en esas condiciones transitorias. Dicha simulación nos permite reproducir fielmente cada transitorio obtenido en el laboratorio. Los parámetros libres en la simulación son la concentración de centros profundos y los coeficientes de captura de los centros presentes en la muestra. El ajuste entre los transitorios simulados numéricamente y los obtenidos experimentalmente, mediante la variación de los parámetros libres, nos proporcionan con gran precisión los valores de dichos parámetros.

En resumen, nuestra técnica combinada consiste en reproducir el proceso experimental en el computador, y el posterior ajuste con los datos experimentales para obtener la concentración de centros y los coeficientes de captura.

Para llevar a cabo esta tarea, es conveniente resumir en primer lugar el estudio realizado por nuestro grupo de investigación acerca del comportamiento eléctrico de una unión pn con centros profundos [Jiménez-Tejada et al.,1992a]. En este punto se analizarán los pasos fundamentales para calcular numéricamente las magnitudes eléctricas que caracterizan la unión y los centros profundos tanto en condiciones estacionarias como transitorias. Este cálculo se realiza mediante la resolución simultánea de la ecuación de Poisson y de la ecuación de Shockley, Read y Hall.

A continuación, se detallará del algoritmo implementado en la simulación que reproduce fielmente todas las condiciones experimentales en que fueron obtenidos los

transitorios experimentales de capacidad. Como núcleo básico de este algoritmo se halla la resolución numérica del comportamiento transitorio de la unión con centros profundos.

Los resultados obtenidos por nuestro método los compararemos con los obtenidos mediante las técnicas tradicionales, estimando los errores cometidos por estas últimas a causa de la utilización de expresiones analíticas aproximadas y suponer los pulsos de polarización ideales. A continuación, realizaremos un estudio teórico detallado de los transitorios de captura para uniones fuertemente dopadas, interpretando los efectos anómalos obtenidos y que después se confirmarán en los transitorios experimentales medidos con muestras del mismo tipo. Por último, para completar el desarrollo de nuestro procedimiento, estudiaremos la sensibilidad a la sección eficaz de captura y a la concentración de centros profundos.

IV.2. SIMULACIÓN NUMÉRICA.

IV.2.1 Resolución numérica del comportamiento eléctrico de una unión pn con centros profundos.

La ecuación unidimensional de Poisson, en la forma que aparece en los dispositivos semiconductores no degenerados, no tiene una solución analítica directa cuando la concentración de impurezas dopantes no es uniforme. La solución numérica y las aproximaciones analíticas han sido considerada por algunos autores en casos particulares [Fortini y Munoglu,1986], [Khan,1987], [Yoshii et al.,1987], [Pimbley,1988], [Jindal y Panayotatos,1988], [Silard y Duta,1991]. En este trabajo se va a utilizar el método descrito por Jiménez-Tejada y colaboradores aplicable a una unión

con centros profundos de carácter general [Jiménez-Tejada et al., 1992a].

Las bases de nuestro procedimiento numérico radican en la resolución simultánea de las ecuaciones de Poisson y de Shockley, Read y Hall, para obtener el potencial $\Phi(x,t)$ y los factores de ocupación de los centros profundos [López-Villanueva et al., 1990]. Supongamos una unión pn con un perfil gradual de dopantes poco profundos con una densidad $N(x) = N_D(x) - N_A(x)$, y dos centros profundos: uno aceptador con concentración $N_{T1}(x)$ y otro donador en concentración $N_{T2}(x)$. Con estas condiciones, y admitiendo que a la unión se le ha aplicado un escalón de tensión entre valores negativos V' y V , la evolución temporal del sistema debe ser descrita por la combinación de la ecuación de Poisson y las expresiones dependientes del tiempo para la densidad neta de carga:

$$\frac{d^2\phi(x,t)}{dx^2} = -\frac{\rho(x,t)}{\epsilon_s} \quad (1)$$

siendo la densidad de carga, $\rho(x,t)$:

$$\rho(x,t) = q \{p(x,t) - n(x,t) + N(x) - N_{T1}(x)f_{T1}(x,t) + N_{T2}(x)[1 - f_{T2}(x,t)]\} \quad (2)$$

donde $p(x,t)$ y $n(x,t)$ son las distribuciones de huecos y electrones libres respectivamente, q es el valor absoluto de la carga del electrón, ϵ_s es la constante dieléctrica del silicio, c_p y c_n son los coeficientes de captura térmica de huecos y electrones, e_p y e_n son los coeficientes de emisión respectivos y donde f_{T1} y f_{T2} son los factores de ocupación de los dos niveles profundos que evolucionan en el tiempo de la forma:

$$\frac{\partial f_{T1}(x,t)}{\partial t} = -(c_n n + c_p p + e_n + e_p) f_{T1}(x,t) + (c_n n + e_p), \quad (3)$$

La ecuación 1 se puede resolver para las zonas P y N utilizando un procedimiento iterativo de Cowell-Newton con un retículo variable que se redefine de forma automática

después de cada iteración, introduciendo nuevos puntos del retículo allí donde se producen variaciones importantes del potencial. Este método resulta ser convergente, aunque la presencia de centros profundos hace que este proceso sea más lento, ya que los factores de ocupación son modificados después de cada iteración. Como condiciones de contorno se imponen la continuidad del campo y del potencial en la unión metalúrgica y:

$$\phi(-w_p) = -\frac{E_i}{q} - V \quad \text{y} \quad \phi(w_n) = -\frac{E_i}{q} \quad (4)$$

Por simplicidad se ha tomado como origen de energías el pseudonivel de Fermi de electrones en la región N. E_i es la energía del nivel de Fermi intrínseco. w_n y w_p representan las posiciones de los contactos en las zonas N y P, que se han tomado lo suficientemente lejos como para que las variaciones de potencial entorno de ellos sean despreciables.

Así pues, se tiene:

en la zona P:

$$n \ll p$$

$$p(x) = n_i e^{-\frac{q(\phi-V)}{k_B T}} \quad (5)$$

$$f_T = 1 - \frac{c_p p(x) + e_n}{c_p p(x) + e_p + e_n}$$

en la zona N:

$$p \ll n$$

$$n(x) = n_i e^{\frac{q\phi}{k_B T}} \quad (6)$$

$$f_T = \frac{c_n n(x) + e_p}{c_n n(x) + e_p + e_n}$$

donde n_i es la concentración intrínseca de portadores.

En consecuencia podemos expresar la ecuación de Poisson sólo en función del potencial:

$$\phi'' = \frac{d^2\phi}{dx^2} = f(\phi) \quad (7)$$

Una vez conocido el perfil teórico de la curva de potencial en la unión, $\Phi(x)$, para cada tensión aplicada, podemos deducir de él cualquier magnitud que nos interese, como las concentraciones de portadores, los factores de ocupación de los centros, el campo eléctrico presente en la unión y en particular la distribución de la densidad de carga, que se utiliza para evaluar la carga almacenada en una región de la unión:

$$Q = - \int_0^{w_n} \rho(x,t) dx \quad (8)$$

donde $\rho(x,t)$ se obtiene de la ecuación (2).

Conocida la carga almacenada, podemos calcular la capacidad en alta frecuencia de la unión, magnitud que utilizaremos para ser comparada con los resultados experimentales:

$$C = \frac{dQ}{dV} \quad (9)$$

Al efectuar las medidas de capacidad en alta frecuencia, la variación de potencial aplicado a la unión se manifestará en variaciones de las concentraciones de portadores libres, pero no en el factor de ocupación de los centros profundos. Si designamos por $\Phi + \delta\Phi$, a la distribución de potencial, cuando hay una señal $V + \delta V$ aplicada, las

concentraciones de electrones y huecos quedarán:

$$n(x) = n_i e^{\frac{q(\phi + \delta\phi)}{K_B T}} \quad (10)$$

$$p(x) = n_i e^{\frac{q(V + \delta V)}{K_B T}} e^{-\frac{q(\phi + \delta\phi)}{K_B T}}$$

definiendo $\beta = q/K_B T$, y suponiendo incrementos despreciables frente al propio valor de la señal (pequeña señal):

$$n(x) = n_i e^{\beta\phi} (1 + \beta \delta\phi) \quad (11)$$

$$p(x) = n_i e^{\beta(V-\phi)} (1 - \beta \delta\phi) (1 + \beta \delta V)$$

despreciando términos de segundo orden se pueden escribir estas concentraciones:

$$n(x) = n_i e^{\beta\phi} (1 + \beta \delta\phi) \quad (12)$$

$$p(x) = n_i e^{\beta(V-\phi)} [1 - \beta(\delta V - \delta\phi)]$$

al estar bajo condiciones de alta frecuencia la población de los centros no varía, con lo que la ecuación de Poisson queda:

$$\frac{d^2\phi_0}{dx^2} + \frac{d^2\delta\phi}{dx^2} = -\frac{\rho_0}{\epsilon_s} - \frac{q}{\epsilon_s} \beta [p_0(\delta V - \delta\phi) - n_0\delta\phi] \quad (13)$$

Si defino:

$$y \equiv \frac{\delta\phi}{\delta V} \quad (14)$$

se puede escribir de la ecuación (13):

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_s} \beta [-(p_0+n_0)y+p_0] \quad (15)$$

con las condiciones de contorno $y(w_n)=0$, $y(w_p)=1$.

La carga almacenada en cada una de las regiones bajo condiciones dinámicas vale:

$$Q+\delta Q = \int_0^{w_n} (\rho_0+\delta \rho) dx \quad (16)$$

por tanto, la capacidad en alta frecuencia y pequeña señal vale:

$$C = \frac{dQ}{dV} = \int_0^{w_n} \beta q [p_0(1-y)-n_0y] dx \quad (17)$$

que, para la zona N se reduce:

$$C = -\int_0^{w_n} \beta q n_0 y dx. \quad (18)$$

IV.2.2. Algoritmo de simulación numérica de los transitorios isotermos de capacidad experimentales durante la captura.

Las condiciones experimentales en que son medidos los transitorios de capacidad isotermos durante la captura son recogidas en la figura 1. En la parte (a) de dicha figura se esquematiza la sucesión de pulsos aplicados necesarios para obtener un transitorio de captura, indicando el instante, M_1 , en el que se mide la capacidad. En su apartado (b) se refleja la forma exacta de un pulso de polarización aplicado a la unión . Con dicho pulso

se reduce la zona de carga espacial permitiendo la captura de portadores por parte de los centros situados en esa región. En el caso de pulsos de corta duración (pocas decenas de nanosegundos), los tiempos de subida, t_r y de bajada, t_f , son comparables a los de la zona plana, t_{fl} . Obviamente, la capacidad no se mide justo después de la aplicación del pulso, ya que los equipos de detección no pueden medirla en intervalos tan cortos de tiempo. Precisamente para tener en cuenta ese tiempo de respuesta de los aparatos se simula la emisión durante el tiempo de medida, t_m . Una vez que se mide la capacidad se aplica un nuevo pulso de captura.

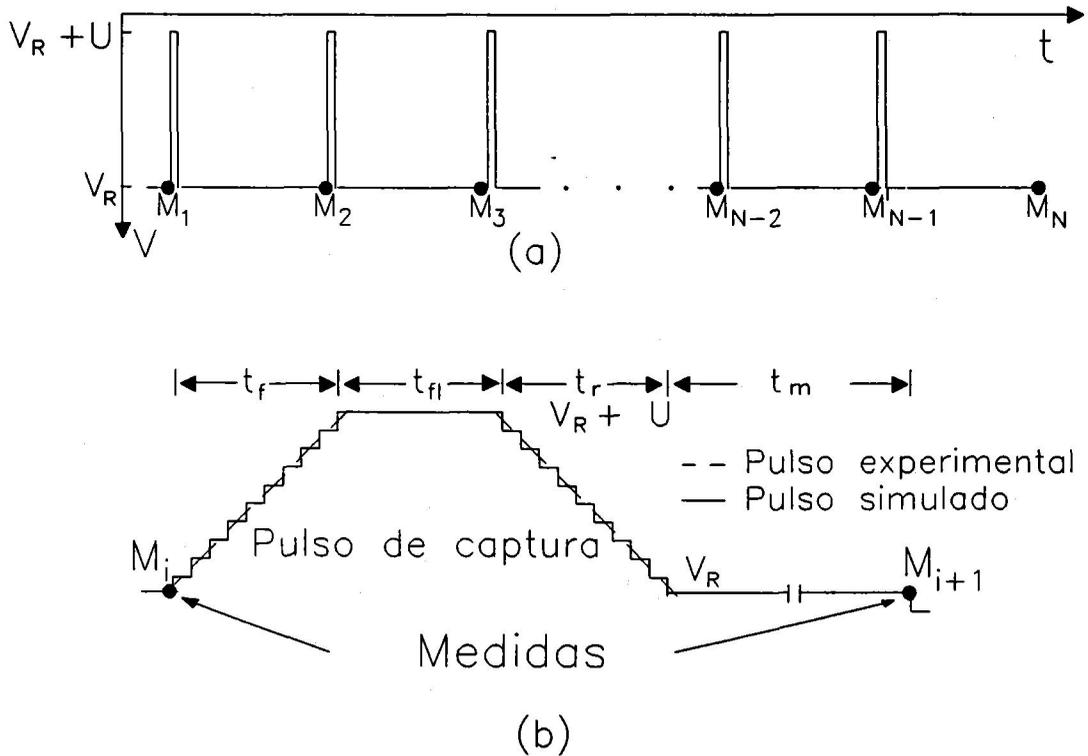


Figura 1.- (a) Secuencia de N pulsos de polarización para captura entre las tensiones inversas V_R y $V_R + U$. La capacidad se mide en los puntos M_i . (b) Forma de uno de esos pulsos de captura (trazo discontinuo) y su aproximación numérica (trazo continuo).

La simulación del proceso experimental consiste en aplicar el análisis numérico desarrollado en el apartado anterior en cada instante de la secuencia de pulsos mostrada en la figura 1(a). En primer lugar se calculan las magnitudes eléctricas estacionarias de la unión a la tensión inversa de polarización, V_R , y a la temperatura de la experiencia. A continuación, y mediante la discretización del pulso de polarización, como muestra la figura 1(b), se van calculando esas mismas magnitudes en cada uno de esos intervalos, hasta completar el pulso. En la simulación se introducen los mismos tiempos característicos del pulso aplicado a la unión en la parte experimental. Terminado el pulso se sigue calculando la evolución de las distintas magnitudes eléctricas, para tener en cuenta la posible emisión durante el período t_m . Una vez alcanzado el instante M_i se evalúa la capacidad en alta frecuencia de acuerdo con la ecuación 18 justo en el mismo punto en el que se tomó la medida experimental. Repitiendo este proceso para tantos pulsos como se le aplicaron a la muestra obtenemos nuestro transitorio numérico de capacidad a temperatura constante.

Para una mejor comprensión de este procedimiento numérico, debemos prestar atención a las magnitudes claves para la simulación de las condiciones transitorias de la unión. Estas magnitudes son los factores de ocupación de los niveles profundos. Por tanto, es esencial reflejar fielmente la evolución temporal de dichos factores, que numéricamente vienen dados, en la región N de la unión:

$$f_T(x,t) = \frac{c_n n(x,t)}{c_n n(x,t) + e_n} \left[f_T(x,t - \Delta t) - \frac{c_n n(x,t)}{c_n n(x,t) + e_n} \right] \times e^{-(c_n n(x,t) + e_n) \Delta t} \quad (19)$$

donde Δt es el intervalo de tiempo tomado en la discretización de la ecuación diferencial (3).

Como se observa en la ecuación 19, f_T depende de su valor en un instante Δt

anterior y de la concentración de electrones libres n en el instante t . Tomando Δt lo suficientemente corto, se pueden utilizar los valores de n en $t-\Delta t$ para su evaluación. Con esta condición y obtenido el valor de f_T , se lleva a la ecuación de Poisson para su resolución numérica. A partir de ella de nuevo se calculan n , p y Φ .

El criterio de elección de Δt depende de la zona del pulso simulada. Así, fue necesario imponer un retículo temporal mucho más fino al simular el pulso de captura, llegando incluso a subdividir cada intervalo en que se discretizaron los tiempos de subida y bajada con respecto al incremento de tiempo tomado cuando no hay pulso y se reproduce la emisión durante el tiempo de respuesta de los aparatos, t_m .

Esta simulación tiene como datos de entrada conocidos:

- los coeficientes de emisión de los centros,
- los perfiles de las impurezas poco profundas,
- la forma exacta de los pulsos de polarización ,
- las condiciones para la discretización temporal y
- las velocidades térmicas de equilibrio de electrones y huecos.

Para estas últimas magnitudes hemos utilizado los datos de Green [Green,1990], que proporcionan , en el silicio, una velocidad térmica para los electrones en función de la temperatura, v_{th}^n :

$$v_{th}^n = 2.06 \times 10^7 \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{cm}{s} \quad (20)$$

mientras que para los huecos, v_{th}^p :

$$v_{th}^p = 1.68 \times 10^7 \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{cm}{s} \quad (21)$$

En adelante, salvo que se indique lo contrario, usaremos estas expresiones para calcular

las velocidades térmicas.

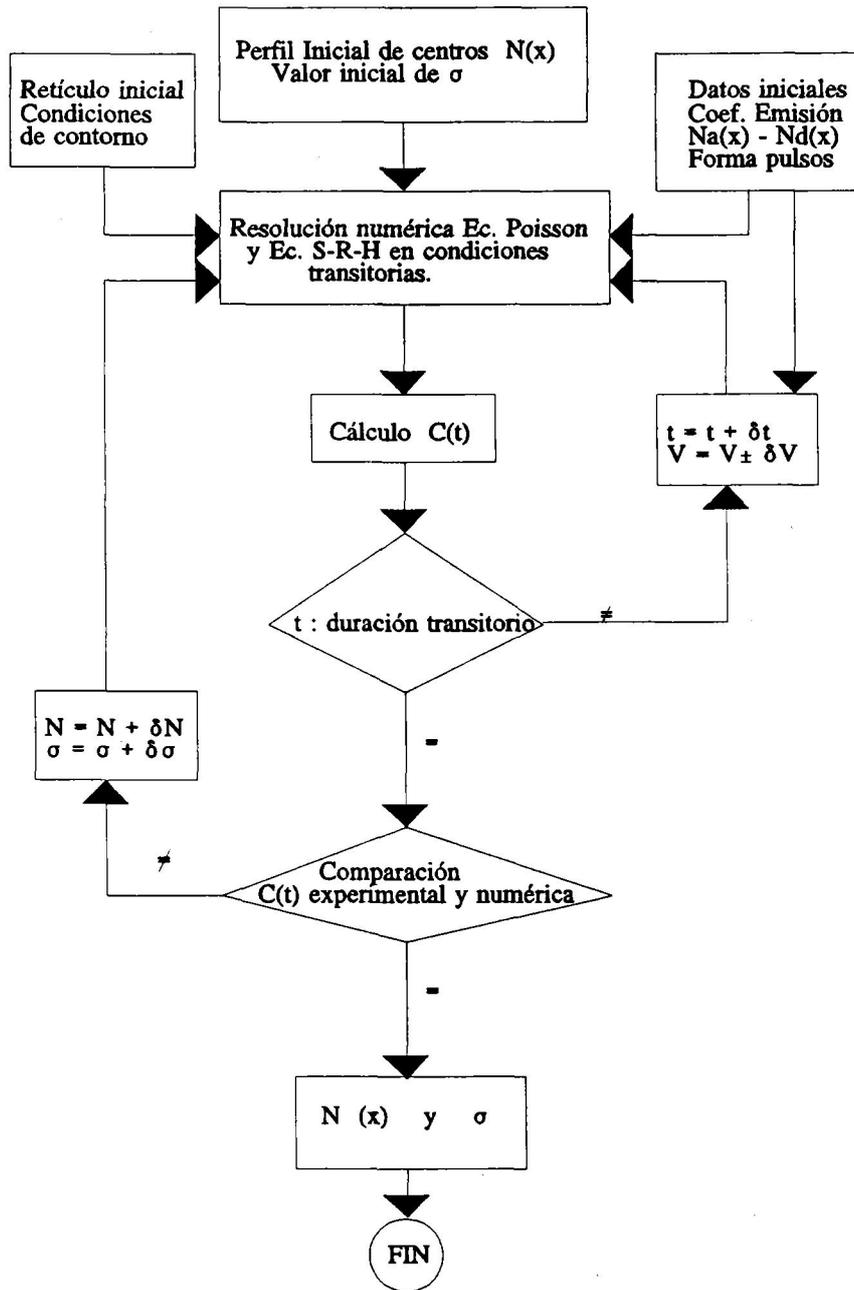


Figura 2.- Diagrama de flujo del algoritmo de cálculo de la sección eficaz de captura y de la concentración de centros en una unión pn con centros profundos.

Como parámetros libres que variarán para ajustar los transitorios numéricos con los obtenidos experimentalmente quedan:

- las secciones eficaces de captura térmica de los niveles profundos y
- las concentraciones de dichos centros.

En la figura 2 se muestra el diagrama de flujo del algoritmo utilizado en la simulación. Inicialmente se introducen unos valores de la concentración de centros y de la sección eficaz de captura así como el resto de parámetros tecnológicos y físicos de la muestra. Se calcula el transitorio de capacidad durante la captura simulando el tren de pulsos aplicado experimentalmente de la manera anteriormente detallada. A continuación, se compara este transitorio numérico con el medido en el laboratorio, repitiéndose el proceso, variando los valores de los parámetros de ajuste N_T y σ , si la diferencia entre los transitorios es mayor que una cierta tolerancia. El proceso de ajuste se realiza mediante mínimos cuadrados. Los valores exactos de esos parámetros serán aquellos que proporcionen el mejor ajuste entre los transitorios numéricos y experimentales.

IV.3. COMPARACIÓN CON LA TÉCNICA TRADICIONAL DE CORTOCIRCUITO DE LA UNIÓN.

Una vez presentado nuestro procedimiento combinado numérico-experimental el siguiente paso a dar es comprobar las ventajas que tiene sobre los métodos experimentales tradicionales utilizados hasta ahora.

En este apartado vamos a analizar las ventajas de nuestro método desde tres puntos de vista. En primer lugar compararemos los resultados obtenidos al aplicar el tratamiento analítico de la técnica experimental del cortocircuito en la unión, a transitorios obtenidos

numéricamente y con valores conocidos de concentraciones de centros y de las secciones eficaces de captura. En estos casos todas las condiciones experimentales se supondrán ideales con lo que nuestro objetivo será comprobar la cuantía del error cometido en los resultados al utilizar las expresiones analíticas aproximadas más comúnmente utilizadas. En un siguiente apartado, veremos como influye el hecho de suponer o no pulsos abruptos desde el punto de vista numérico y el consiguiente error al aplicar las técnicas tradicionales. Por último, analizaremos numéricamente la influencia de la concentración relativa de impurezas profundas/impurezas poco profundas y el perfil de éstas últimas en los transitorios de captura.

IV.3.1. Error por las expresiones analíticas aproximadas.

Analicemos el siguiente caso: una unión p^+n abrupta con un nivel aceptador situado a 0.22 eV del fondo de la banda de conducción cuya sección eficaz es conocida. La concentración de donadores poco profundos en la región N será de $6.67 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Con estas condiciones obtendremos numéricamente transitorios de capacidad aplicando una serie de pulsos como los detallados en la figura 1(a). Para cuantificar sólo el error introducido por las aproximaciones realizadas en las expresiones analíticas supondremos pulsos perfectamente abruptos, es decir, $t_r = t_f = 0 \text{ s}$. Igualmente, para que no interfiera el proceso de emisión, se considerará $t_m = 0 \text{ s}$.

A partir del transitorio simulado de forma numérica de la unión con una concentración de centros profundos N_T y una sección eficaz de captura de electrones conocidos, se pretende calcular el valor de dicha sección eficaz utilizando el tratamiento analítico tradicional de la técnica del cortocircuito. La comparación entre este y el valor inicialmente introducido en la simulación nos permitirá calcular el error introducido por esta técnica.

Dado un transitorio numérico de captura con $N + 1$ puntos, y donde consideraremos que la captura se ha completado casi por completo, representaremos gráficamente:

$$F(n\Delta t) = \ln \left[\frac{C^2(n\Delta t) - C^2(N\Delta t)}{C^2(n\Delta t)} \right] \quad (22)$$

con $n=0,1,2,\dots,N$ y siendo Δt la anchura del pulso de polarización aplicado. De la pendiente de esa gráfica extraemos la sección eficaz de captura de electrones para el nivel aceptador bajo estudio, según se describió en el capítulo anterior. Este valor de la sección eficaz de captura se comparará con el inicialmente introducido en la simulación. Todo este tratamiento se hará para transitorios con distintas concentraciones relativas de centros profundos y para varios valores de la sección eficaz de captura. Los pulsos aplicados serán entre -50 V y -40 V, tensiones elevadas para evitar también los efectos de bordes.

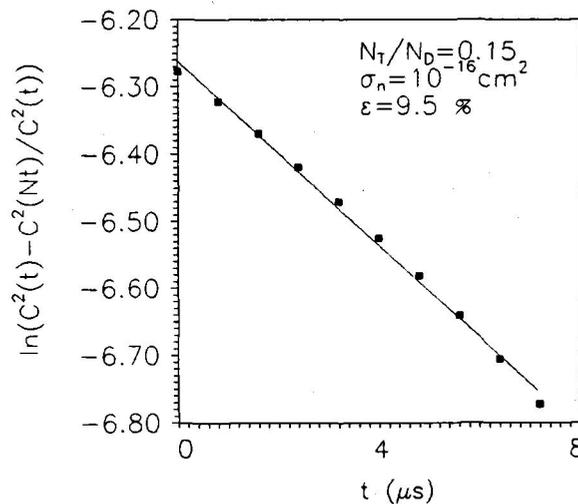


Figura 3.- Ajuste de la sección eficaz de captura según el método tradicional en un transitorio numérico con baja concentración de centros sometido a pulsos de 80 ns, indicando el error relativo cometido.

En las figuras 3, 4 y 5, se muestran los transitorios obtenidos por simulación junto con las curvas de ajuste según el tratamiento previamente indicado, para un valor de la

sección eficaz de captura de electrones para el nivel aceptador, $\sigma_{nA} = 10^{-16} \text{ cm}^2$, para concentraciones relativas de impurezas profundas $N_T/N_D = 0.15, 0.5$ y 0.95 , respectivamente.

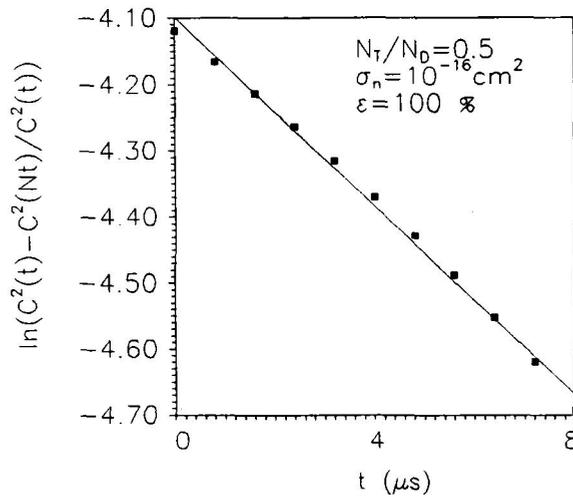


Figura 4.- Ajuste de la sección eficaz de captura según el método tradicional en un transitorio numérico para una unión más dopada.

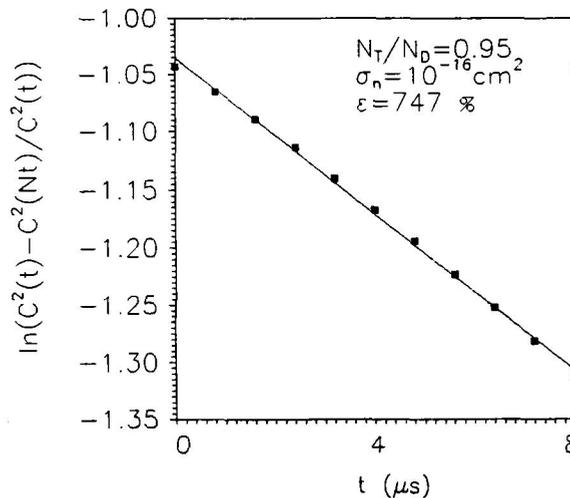


Figura 5.- Ajuste de la sección eficaz de captura según el método tradicional en un transitorio numérico para una muestra casi compensada.

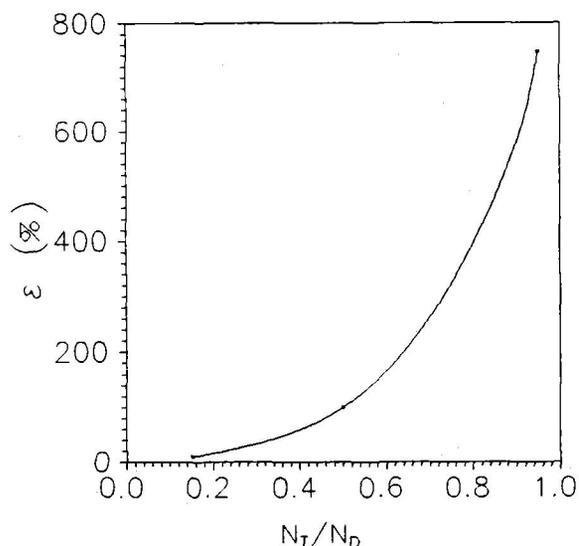


Figura 6.- Error relativo en la obtención de la sección eficaz de captura térmica por el método tradicional en función de la concentración relativa de centros.

En la figura 6, se representa el error relativo cometido al aplicar el tratamiento analítico tradicional frente a la concentración relativa de impurezas profundas. Como se puede observar, los resultados empeoran notablemente al aumentar la concentración relativa de centros. Con lo que este método, como ya se preveía, no permite obtener valores fiables las secciones eficaces de captura con muestras con concentración relativa de centros mayor de 0.2.

Análogamente, en las figuras 3, 7 y 8 se muestran los ajustes manteniendo fijo N_T/N_D a 0.15 y variando la sección eficaz de electrones : $\sigma_{nA} = 10^{-16}$, 10^{-15} y 10^{-14} cm², respectivamente.

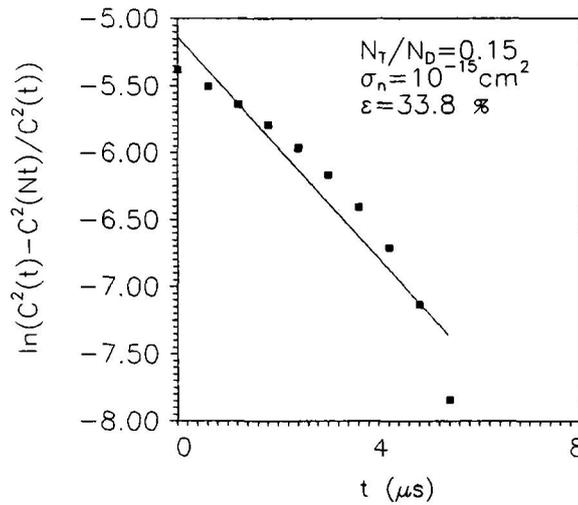


Figura 7.- Ajuste de la sección eficaz de captura térmica por el método tradicional en transitorios numéricos con baja concentración de centros y $\sigma_n = 10^{-15} \text{ cm}^2$, indicando el error relativo. Los pulsos simulados fueron de 60 ns.

En la figura 9 se recopila el error relativo frente al valor de la sección eficaz de captura. Podemos concluir a la vista de las figuras que frente a este parámetro el error cometido no es tan grande, aunque imposibilita la obtención precisa de resultados, sobre todo para centros con captura rápida.

En las figuras se ha ido acortando la duración del pulso conforme aumentábamos el valor de la sección eficaz, para simular las condiciones óptimas de medida experimental, sin embargo el llenado de los centros con mayor σ ha sido mucho más rápido. Este hecho explica el crecimiento del error con σ mostrado en la figura 9. Teniendo en cuenta que al producirse el llenado el factor de ocupación crece, con lo que la condición $f_T N_T \ll N_D$ es aplicable al inicio del transitorio, para los transitorios rápidos el comportamiento de la capacidad se aleja antes de la relación ideal dada por la ecuación 32 del capítulo anterior. En la figura 9 se ha calculado el error ajustando todo el transitorio. La forma usual de evitarlo en cierta medida es calcular σ con los primeros puntos de los transitorios.

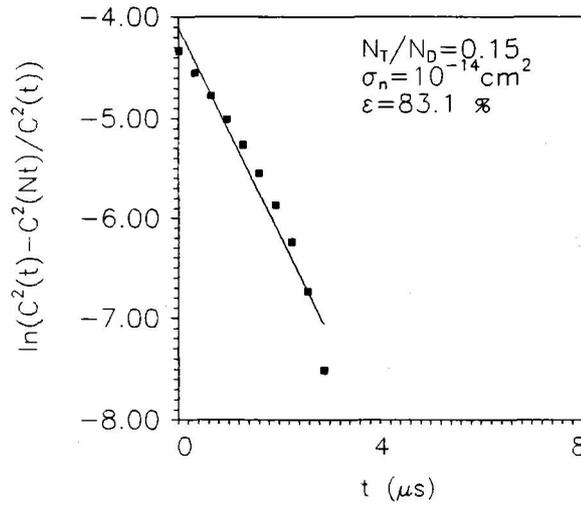


Figura 8.- Ajuste de la sección eficaz de captura térmica por el método tradicional en transitorios numéricos con baja concentración de centros y $\sigma_n = 10^{-14} \text{ cm}^2$, indicando el error relativo. Los pulsos simulados fueron de 32 ns.

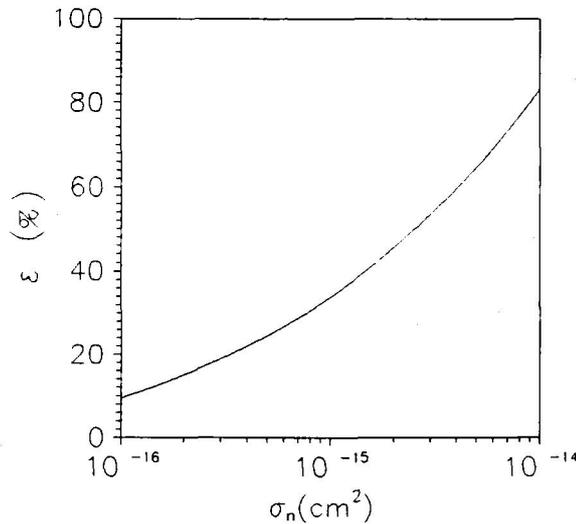


Figura 9.- Error relativo cometido en la obtención de la sección eficaz de captura en función del valor de la propia magnitud.

Como conclusión podemos decir que para cometer errores pequeños es interesante utilizar muestras poco dopadas, sin embargo, el problema de medir transitorios de capacidad con muestras muy poco dopadas es la poca amplitud de los transitorios lo que

proporciona poca sensibilidad al valor de la sección eficaz de captura. Además si la sección eficaz de captura es grande, la captura es rápida, y se hacen necesarios pulsos de polarización muy estrechos para obtener un transitorio del que obtener información.

IV.3.2. Error al despreciar la forma del pulso de captura.

Otro aspecto importante a tener en cuenta a la hora de obtener resultados precisos es la forma exacta del pulso de polarización aplicado a la unión. Como se ha mencionado, en ciertas circunstancias, los tiempos de subida y bajada pueden llegar a ser comparables con los de la zona plana. Hasta ahora, no hay mención sobre este tema en trabajos que hayan usado estas técnicas experimentales. Además en todo el desarrollo analítico que trata los datos experimentales no hay forma de introducir estas condiciones de medida, con lo que se han supuesto todos los pulsos perfectamente abruptos.

Para, de alguna forma, medir el error que se puede introducir al despreciar los tiempos de subida y bajada con pulsos estrechos, se han simulado transitorios de capacidad con pulsos abruptos y con pulsos con tiempos de subida y bajada apreciables. Las características de la simulación (muestra analizada) son como en el apartado anterior.

Dado un pulso con unos tiempos de subida y bajada distintos de cero se ha obtenido su aproximación abrupta o ideal ampliando la zona plana en una cantidad igual a la media de la suma de los tiempos de subida y bajada. Este promedio se muestra en la figura 10.

El proceso de estimación del error por esta causa es el siguiente: se obtiene numéricamente un transitorio de capacidad introduciendo un valor conocido de σ ,

simulando un pulso con tiempos de subida y bajada distintos de cero. A continuación, se simulan transitorios introduciendo el pulso aproximado de la forma relatada en el párrafo anterior. Se deja σ como parámetro que permitirá el ajuste de este transitorio con el obtenido anteriormente, es decir con el pulso no ideal. El error se obtiene comparando el valor de σ que permite el mejor ajuste con el transitorio calculado sin aproximaciones. Realizado esto para varias formas de pulsos se obtuvo que el error cometido no es despreciable, como se indica en la figura 11. Además, en todos los casos simulados, se observó que los valores de las secciones eficaces de captura obtenidos a partir de los pulsos aproximados era siempre menor que el que le correspondía en la simulación con el pulso real. Esta tendencia de subestimar σ por no introducir los tiempos de bajada y subida permitirá explicar, en el capítulo posterior, algunas desviaciones de resultados experimentales presentes en la literatura.

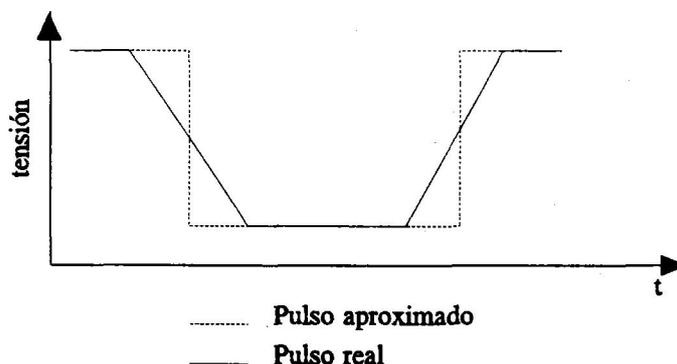


Figura 10.- Aproximación promediada de los pulsos reales de polarización simulados en nuestro procedimiento numérico.

En la figura 11 se representa el error relativo en la sección eficaz en función de la relación entre la suma de los tiempos de subida y bajada y el tiempo de la zona plana, $(t_r + t_f)/t_n$. Como se aprecia el error relativo crece rápidamente en cuanto los pulsos dejan

de ser abruptos.

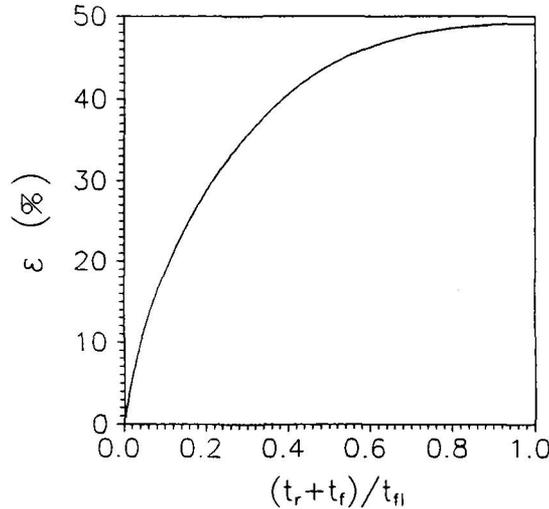


Figura 11.- Error relativo cometido en la sección eficaz de captura al suponer pulsos abruptos simulando la captura en una muestra poco dopada y con $t_p = 80$ ns.

IV.3.3. Influencia de la concentración relativa de impurezas profundas/básicas.

Ya hemos mencionado la existencia de dificultades experimentales para obtener valores precisos de las secciones eficaces de captura térmica y la concentración de centros en las regiones de la unión donde se produce la captura. A estos inconvenientes intrínsecos de las técnicas de medida tradicionales se suman los surgidos de los parámetros tecnológicos de la muestra bajo estudio, y más concretamente de la relación entre la concentración de impurezas poco profundas y la de centros profundos a lo largo de la muestra. Debido a las fuertes aproximaciones realizadas sobre esta concentración relativa en el tratamiento analítico de los resultados experimentales una pequeña desviación de los límites impuestos desvirtúa gravemente el resultado final obtenido.

En los dos apartados anteriores se han analizado errores analíticos o experimentales que aparecen en una unión p^+n abrupta donde la concentración relativa de ambos tipos de impurezas es constante a lo largo de la unión. Sin embargo existe un tipo de unión muy común, sobre todo cuando la impurificación básica se ha realizado por difusión o implantación iónica, en las cuales aproximar este perfil por uno abrupto puede llevar también a errores. Se han analizado previamente uniones pn graduales con centros profundos durante transitorios de emisión y se han encontrado grandes anomalías [Jiménez-Tejada et al.,1992a]. Es objetivo de este apartado analizar este mismo tipo de uniones sometidas a un tren de pulsos de captura como el de la figura 1 y analizar las anomalías que de hecho también se obtienen.

Para ver la influencia que en el cálculo de σ tienen la concentración de centros y el perfil de la unión, en este apartado vamos a estudiar numéricamente el comportamiento eléctrico de una unión no abrupta p^+n de silicio impurificada con centros profundos, sometida a las condiciones experimentales de la captura por el método de cortocircuito. El perfil gradual se representa por una función exponencial, $N(1 - e^{-x/\lambda})$, donde N y λ dependen de la región en que se encuentren. En la región N es $N = 6.67 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $\lambda = 10 \text{ } \mu\text{m}$. En la región P , $N = 2.07 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $\lambda = 3.1 \text{ } \mu\text{m}$. El área de la unión es 0.02 cm^2 . La unión presenta dos niveles profundos: uno aceptador, E_{T1} , localizado a 0.22 eV por debajo del mínimo de la banda de conducción, y otro donador, E_{T2} , situado a 0.34 eV por encima del máximo de la banda de valencia. Ambos niveles con concentración $N_T(x)$.

Vamos a examinar los efectos de la concentración de centros en una unión gradual en los transitorios de capacidad correspondientes a la captura de mayoritarios. Para llevarlo a cabo, se han simulado dos uniones con perfiles de dopantes básicos iguales pero con diferentes concentraciones de impurezas profundas, como se muestra en los recuadros de las figuras 13(b) y 14(b). Fueron simulados pulsos de captura entre -2 V y -0.2 V a

una temperatura de 90 K. En el primer caso la concentración uniforme de centros fue de $N_T=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, mientras que en el segundo caso, más dopado, $N_T=5.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Este caso es de especial interés porque será el estudiado experimentalmente en el capítulo siguiente.

IV.3.3.1 Condiciones estáticas.

Es necesario, previamente, analizar el comportamiento eléctrico de estas muestras para esas dos tensiones de polarización en condiciones estáticas. En la figura 12, se muestran la distribución de carga neta, el campo eléctrico, las concentraciones de mayoritarios y los factores de ocupación de los niveles profundos se muestran para la muestra más dopada a -2 y -0.2 V. Se pueden observar algunos fenómenos interesantes en esta figura que la diferencian de una muestra poco dopada:

- a) Una componente de campo eléctrico (puntos M N), lejos de la unión metalúrgica, que aparece donde se igualan las concentraciones de centros y dopante básico.

- b) Una inversión de carga en la misma región, separada de la zona de carga espacial por una región con carga neta nula (puntos O M), pero con una concentración de electrones no despreciable. Esta región juega un papel fundamental en la interpretación de los transitorios de capacidad asociados al proceso de captura de portadores procedentes de la banda, como se demostrará seguidamente.

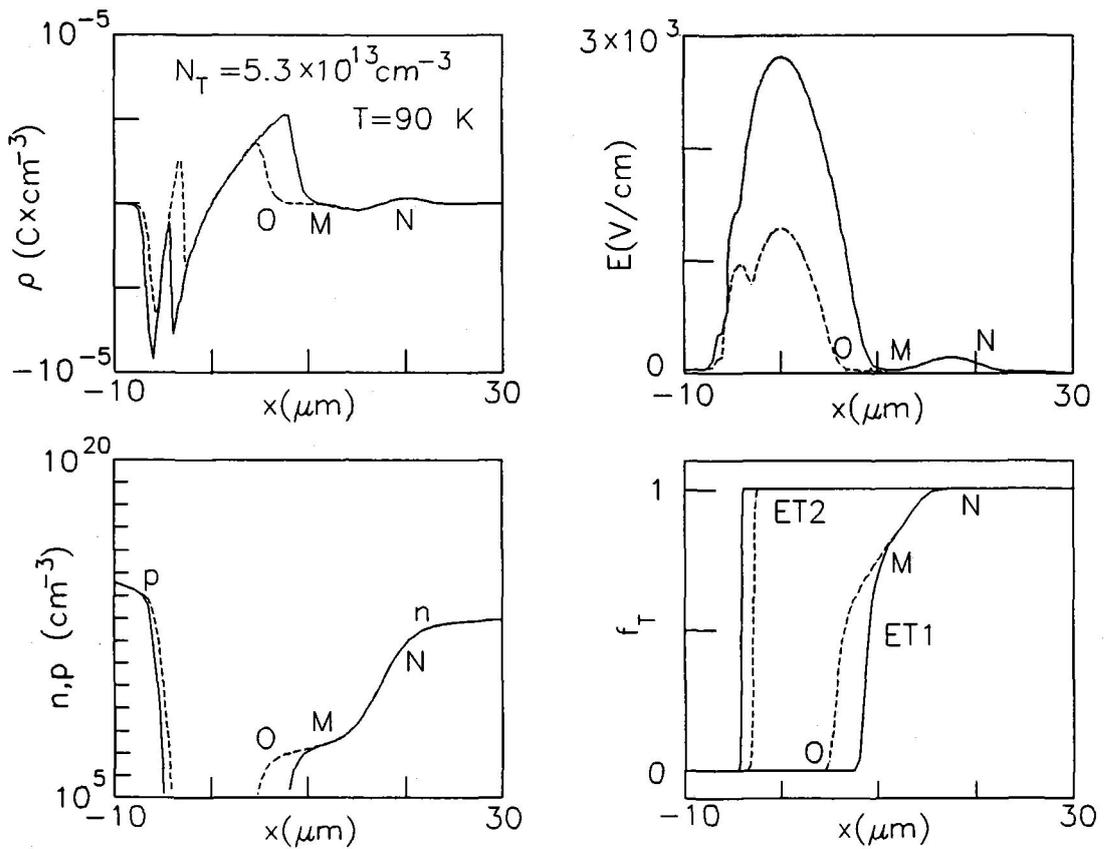


Figura 12.- Distribuciones de la densidad de carga neta, ρ ; campo eléctrico, E ; electrones y huecos, n y p ; y los factores de ocupación, f_T , en la unión a -2 V (trazo continuo) y -0.2 V (trazo discontinuo) a 90 K . La concentración de impurezas profundas $N_T = 5.3 \times 10^{13}\text{ cm}^{-3}$.

Un estudio más detallado del comportamiento estático de este tipo de uniones ha sido desarrollado Jiménez-Tejada y López-Villanueva [Jiménez-Tejada et al.,1992a], [López-Villanueva et al.,1990]. Hemos omitido la representación gráfica de las magnitudes eléctricas de la unión poco dopada porque se describen perfectamente por los modelos clásicos de uniones pn.

II.5.3. Condiciones transitorias.

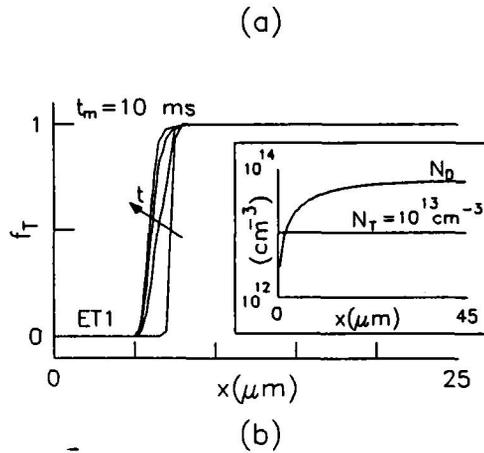
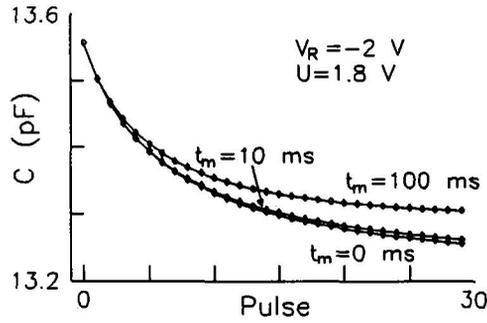


Figura 13.- (a) Transitorios de capacidad numéricos para diferentes tiempos de medida t_m para la unión menos dopada a 90 K. (b) Evolución del factor de ocupación de electrones del nivel aceptador durante uno de esos transitorios. El recuadro muestra las concentraciones de impurezas poco profundas, N_D , y profundas, N_T .

Las diferencias en el comportamiento estático de este tipo de uniones también se reflejan en los transitorios de captura calculados mediante la aplicación de la secuencia de pulsos mostrados en la figura 1. Las figuras 13(a) y 14(a) muestran los transitorios de capacidad para las uniones poco y fuertemente dopadas respectivamente, a una temperatura de 90 K. Las simulaciones se han realizado para distintos tiempos de respuesta de los aparatos (t_m , tiempo desde que cesa el pulso hasta que se toma la

medida).

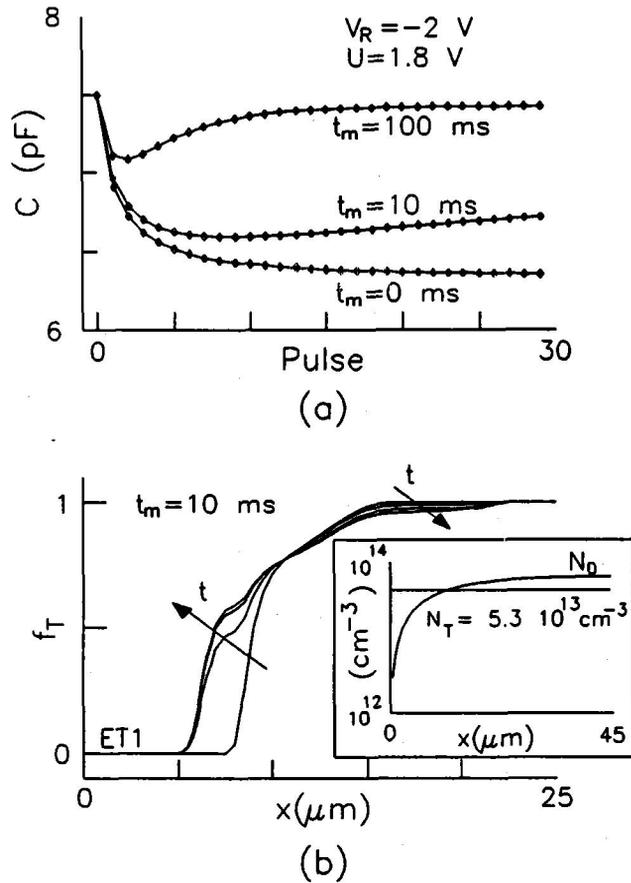


Figura 14.- (a) Transitorios de capacidad numéricos para diferentes tiempos de medida t_m para la unión más dopada a 90 K. (b) Evolución del factor de ocupación de electrones del nivel aceptador durante uno de esos transitorios. El recuadro muestra las concentraciones de impurezas poco profundas, N_D , y profundas, N_T .

El efecto de dicho intervalo de tiempo, t_m , puede observarse en estos ejemplos. Dependiendo del valor de t_m , la emisión puede ser o no importante después de cada uno de los pulsos de polarización de la secuencia aplicada. En la muestra poco dopada (figura 13(a)) la emisión es despreciable para $t_m < 10$ ms, mientras que cuando este período es

comparable a la inversa del coeficiente de emisión, e_n^{-1} (5.6 s a 90 K), la emisión empieza a ser importante debido a que se le da tiempo a reemitir.

En la muestra muy dopada el efecto del tiempo t_m es mucho más acusado, cuando, de acuerdo con la teoría clásica el comportamiento debía ser similar al de la unión menos dopada. Por tanto, el argumento de la reemisión no es válido para estudiar las muestras más fuertemente dopadas. Incluso para tiempos t_m mucho menores que e_n^{-1} ($t_m = 10$ ms), se pueden apreciar los efectos de una fuerte emisión. Tales efectos, llegan incluso a apantallar el fenómeno de captura, como se muestra al final de los transitorios de capacidad de la figura 14(a). Para tiempos de respuesta mayores ($t_m = 100$ ms), el fenómeno es aún más pronunciado: el transitorio de capacidad se asemeja más a uno de emisión que a uno de captura.

Para una interpretación rigurosa de estos transitorios de capacidad crecientes, se ha representado la evolución de los factores de ocupación del centro aceptador, E_{T1} , en la región n (figuras 13(b) y 14(b)). La influencia en el transitorio de la evolución de E_{T2} es despreciable debido al fuerte dopado básico de la región P. La magnitud f_{T1} ha sido calculada exactamente en el mismo instante el que se calculó la capacidad en la secuencia de pulsos (puntos M_i de la figura 1(a)). Hemos elegido el caso con $t_m = 10$ ms, representando el factor de ocupación en 4 de esos puntos.

En la unión menos dopada (fig. 13(b)), el factor de ocupación crece con el tiempo dentro de la región de carga espacial, mostrando el proceso de captura de electrones por parte de este centro. Como se ha visto, en la unión más dopada, la región de depleción no se limita a una región alrededor de la unión metalúrgica, sino que también se extiende a una zona más amplia que incluye la otra componente de campo eléctrico y la zona de inversión de carga previamente señaladas en la figura 12. En esa zona también se incluye una concentración no despreciable de portadores libres. Este perfil de concentración de

electrones no se puede modelar por la tradicional cola de Debye [Pons,1984], [Meijer et al.,1984], y, por tanto, la evolución del factor de ocupación de electrones del nivel aceptador debe ser analizada cuidadosamente (fig. 14(b)).

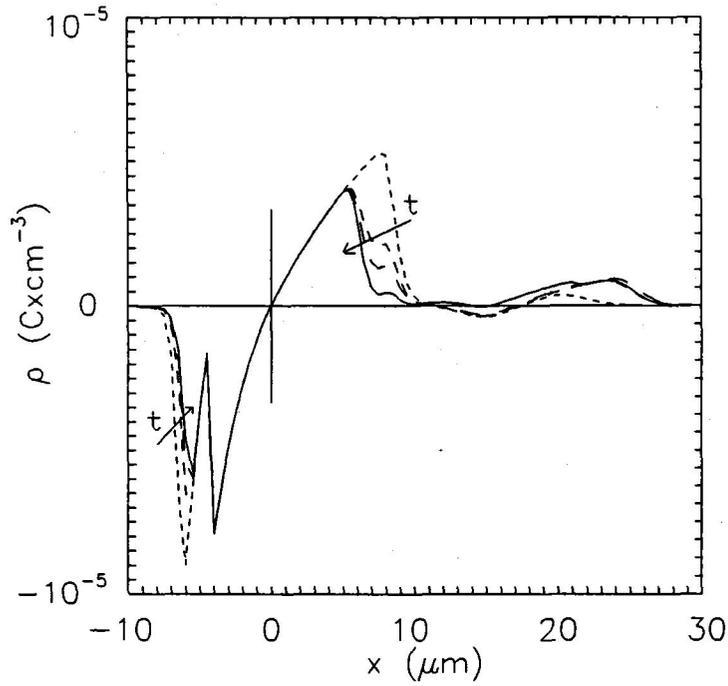


Figura 15.- Evolución de la densidad de carga neta en la unión más dopada durante el transitorio de la figura 3 con $t_m = 10$ ms. Las fechas señalan hacia el final del transitorio cuya densidad de carga se representa con trazo continuo.

En la zona n, esta evolución tiene la forma:

$$f_{TI}(x,t) = \frac{c_n n(x,t)}{c_n n(x,t) + e_n} \left[f_{TI}(x,t - \Delta t) - \frac{c_n n(x,t)}{c_n n(x,t) + e_n} \right] \times e^{-(c_n n(x,t) + e_n) \Delta t} \quad (23)$$

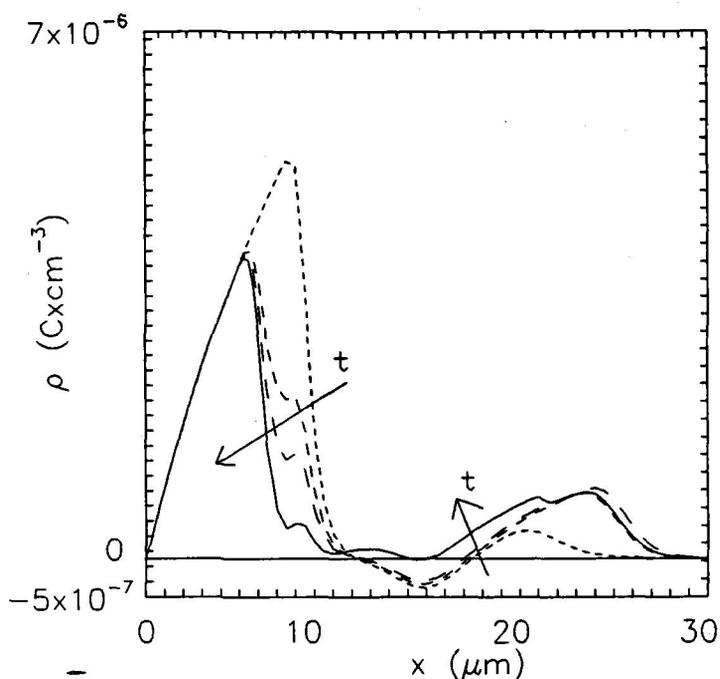


Figura 16.- Detalle de la figura 15 donde se destaca la zona n de la unión. Se puede observar en ella la emisión en la zona entre 10 y 25 μm de electrones que se encontraban ligados a las trampas al inicio del transitorio.

En la unión poco dopada, la concentración de electrones libres y el factor de ocupación son despreciables dentro de la región de carga espacial. Por tanto durante el tiempo t_m , la evolución resultante es la de una emisión habitual:

$$f_{Tl}(x,t) = \frac{1}{e_n} + \left[f_{Tl}(x,t-\Delta t) - \frac{1}{e_n} \right] \times e^{-e_n \Delta t} \quad (24)$$

En este caso, si $t_m \ll e_n^{-1}$, no se aprecia emisión. Sin embargo, en la muestra fuertemente dopada, y en la zona dentro de la región de deplexión donde la concentración de electrones en la banda es importante, el producto $c_n n(x,t)$ se hace comparable o mayor que e_n , y en consecuencia el exponente de la ecuación (23) se incrementa.

Por otro lado, el factor de ocupación en esta zona es próximo a la unidad, y así, la resta entre corchetes de esa ecuación es positiva, es decir,

$$f_{T1}(x,t-\Delta t) > \frac{c_n n(x,t)}{c_n n(x,t) + e_n} \quad (25)$$

Con estas dos condiciones, tenemos una emisión muy favorecida en esta región de la zona de carga espacial (fig. 14(b)).

En resumen, aparecen dos zonas diferentes dentro de la región de carga espacial. En una de ellas, donde domina el proceso de captura, está localizada en la misma posición que en la unión menos dopada. La otra está situada donde se ve favorecida la emisión, debido principalmente a la existencia de electrones libres dentro de la región de deplexión (por la gradualidad del perfil de impurezas básicas), y que está localizada entre la región anterior y el extremo de la región de deplexión. Se observa un decrecimiento o crecimiento en el transitorio de capacidad dependiendo de que fenómeno domine durante la relajación.

Aunque t_m , el tiempo necesario para que responda el dispositivo experimental, puede minimizarse, es esencial considerar los efectos de este fenómeno de emisión, el cual, como hemos mostrado, se observa a temperaturas suficientemente bajas para que se cumpla $t_m \ll \tau_n^{-1}$.

Como conclusión podemos explicar la forma de estos transitorios. En cualquier caso a medida que aumenta t_m aparece un proceso de emisión que es debida, por un lado, a los portadores capturados durante el pulso positivo de captura dentro de la región de deplexión (entre los puntos O y M de la figura 12), y por otro lado, es debida a portadores que no habían sido capturados durante dicho pulso pero que permanecían ligados a los centros precisamente en esa región de inversión de carga señalada anteriormente (entre los puntos M y N en la figura 12). A la vista de estos dos últimos

casos se comprende que sean portadores no previamente capturados (sino que permanecían ligados en condiciones estáticas) los responsables de esos tramos crecientes de los transitorios. Esto se puede observar claramente en las figuras 15 y 16 donde se muestra la evolución de la densidad de carga neta durante distintos instantes del proceso de captura, para la muestra más dopada y $t_m = 10$ ms. En la figura 16 se puede observar la captura de electrones, es decir disminución de la carga positiva, en la región entorno a los $8 \mu\text{m}$ de la unión. Estas nuevas condiciones durante el transitorio inducen nuevas formas del potencial en la región de carga espacial que provocan la emisión de los portadores inicialmente ligados en la zona entre 12 y $20 \mu\text{m}$ de la unión metalúrgica. Esta emisión estimulada por el nuevo potencial es la responsable de las anomalías mostradas en la figura 14.

IV.4. SENSIBILIDAD DE LA TÉCNICA COMBINADA NUMÉRICO-EXPERIMENTAL.

En los apartados anteriores se ha expuesto nuestro procedimiento para la obtención precisa tanto de la concentración de impurezas profundas como de la sección eficaz de captura a partir de transitorios experimentales de capacidad. A continuación, se han mostrado las ventajas del método al eliminar los errores más comunes introducidos por las técnicas tradicionales de obtención directa de este parámetro. El próximo paso a dar es mostrar cómo de sensible es nuestro procedimiento en el cálculo de éstos parámetros.

La sensibilidad de nuestro método estará íntimamente ligada a la sensibilidad que tienen los transitorios de capacidad ante una variación de σ y la concentración de centros N_T .

En este apartado, simularemos transitorios de capacidad durante la captura para distintos valores de la concentración de centros y la sección eficaz de captura, mostrando la dependencia de dichos transitorios con estos parámetros y comprobando la bondad de nuestro método en un amplio rango de valores de secciones eficaces de captura. Para estudiar la sensibilidad de nuestro método hemos obtenido transitorios de capacidad en el caso particular de una muestra con dos centros bipolares. La existencia de más de un nivel nos permitirá sacar conclusiones generales debido al amplio rango de secciones eficaces de captura que cubre.

Las simulaciones se han hecho introduciendo los datos de una unión p⁺n de silicio con un perfil gradual de dopantes poco profundos. Las características de la muestra simulada son las del apartado anterior tanto en lo relativo a la concentración de impurezas poco profundas como a los niveles profundos considerados.

IV.4.1. Sensibilidad a la concentración de impurezas profundas.

A continuación, se mostrarán transitorios de capacidad simulados para observar su dependencia con la concentración de centros profundos. En los métodos tradicionales la obtención de la concentración de impurezas profundas se realizaba por otros medios ajenos al de la captura. En nuestro caso, podemos calcular dicha concentración a la vez que la sección eficaz de captura. La ventaja que ofrece nuestro procedimiento es que elimina una de las causas más importantes de error en los valores de las secciones eficaces de captura obtenidos por los medios tradicionales, es decir, la propia imprecisión en los cálculos de dicha concentración, especialmente cuando se hace próxima a la impurezas básicas.

La sensibilidad a la concentración de impurezas profundas se muestra en la figura. Se simularon transitorios de capacidad a 85 K, la tensión inversa de polarización fue $V_R = -50$ V, con pulsos positivos de amplitud $U = 10$ V. Los tiempos característicos de los pulsos simulados fueron $t_m = 0.3$ s, $t_f = 30$ ns, $t_r = 40$ ns y $t_n = 60$ ns. La concentración de dopante profundo varió desde $N_T = 2.4 \times 10^{13}$ cm⁻³ a 3.0×10^{13} cm⁻³, con valores constantes de las secciones eficaces de captura de mayoritarios. La sección eficaz de captura de electrones del nivel aceptador se mantuvo a $\sigma_{nA} = 10^{-14}$ cm², mientras que la de huecos del nivel donador $\sigma_{pD} = 10^{-16}$ cm².

Como se puede observar en la figura 17, la gran variación en los transitorios de capacidad con cambios poco significativos (menores del 20 por ciento) de la concentración de impurezas profundas, nos permite admitir que con nuestro procedimiento se puede obtener dicho parámetro con gran precisión.

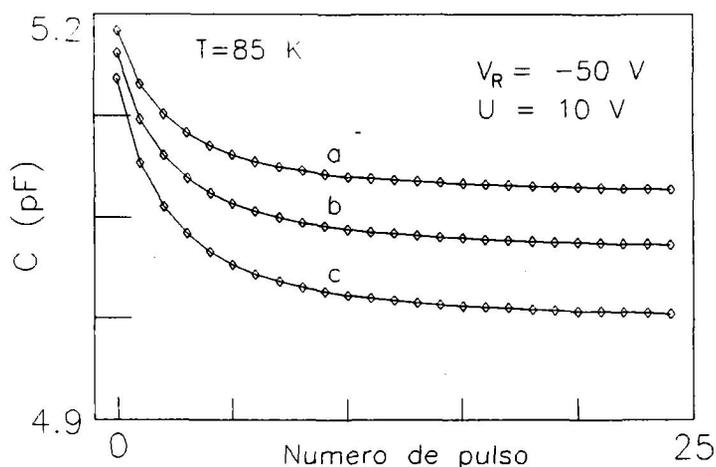


Figura 17.- Variación de los transitorios de capacidad numéricos con la concentración de impurezas profundas N_T a 85 K, manteniendo fijas los valores de las secciones eficaces de captura. Las diferentes curvas indican: (a) $N_T = 2.4 \times 10^{13}$ cm⁻³; (b) $N_T = 2.7 \times 10^{13}$ cm⁻³; (c) $N_T = 3.0 \times 10^{13}$ cm⁻³.

IV.4.2. Sensibilidad con la sección eficaz de captura térmica.

Procediendo de forma similar al apartado anterior, se estudió la respuesta de los transitorios de captura ante cambios en la sección eficaz de captura. En primer lugar, la figura 18 muestra la variación de los transitorios simulados con la sección eficaz de captura de electrones del nivel aceptador, σ_{nA} a 85 K. Las condiciones de polarización y forma de los pulsos aplicados son iguales al apartado anterior. Ahora se mantuvo fija la concentración de impurezas profundas $N_T=2.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. La gran variación de los transitorios con pequeños cambios de σ_{nA} denotan una alta sensibilidad a este parámetro, con lo que el valor que se obtenga sería muy preciso.

Finalmente, la variación de transitorios de capacidad numéricos con el parámetro σ_{pD} (sección eficaz de captura de huecos para el nivel donador) se muestra en la figura 19. Debido a que analizamos una muestra p^+n gradual, debemos acercarnos más a la unión metalúrgica para que se produzcan cambios significativos en el borde de la región de deplexión en la zona P. De esta manera la contribución de la captura de huecos por parte del nivel donador será mensurable con transitorios de capacidad. Por esta razón, ahora la polarización aplicada varía entre $V_R=10 \text{ V}$ y $V_R-U=0.5 \text{ V}$, manteniendo el resto de características como en el caso anterior. Se han fijado los valores de N_T y σ_{nA} . A pesar de que el proceso de captura tiene lugar en ambas regiones de la unión, y el hecho de que la captura en el lado N domina (debido a la diferencia de secciones eficaces de captura y las concentraciones relativas de impurezas en uno y otro lado), se detecta una variación apreciable de los transitorios de capacidad con σ_{pD} . En este caso la precisión con que se puede obtener esta magnitud ha descendido respecto al caso anterior. Esto es lógico por las dificultades que presenta el estudio de captura en la zona más dopada. Sin embargo, la sensibilidad es mucho mayor que en los métodos tradicionales de medida donde para estudiar estos dos centros completamente se requerían muestras p^+n y n^+p .

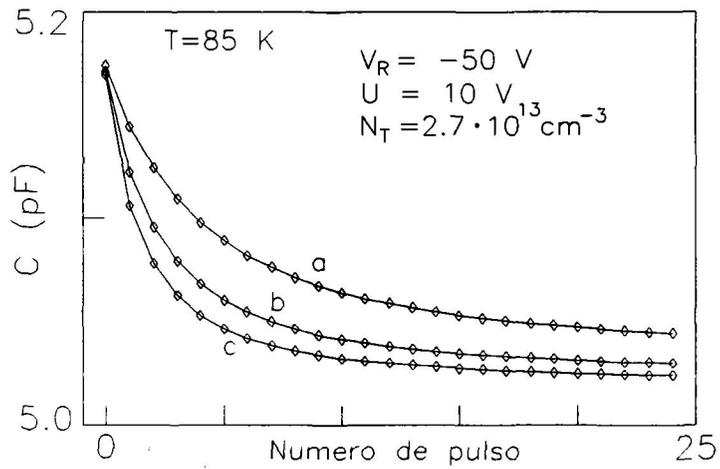


Figura 18.- Variación de los transitorios de capacidad numéricos con la sección eficaz de captura térmica de electrones del nivel aceptador, σ_{nA} , a 85 K, manteniendo constantes el resto de parámetros. Las distintas curvas indican: (a) $\sigma_{nA} = 5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$; (b) $\sigma_{nA} = 10^{-14} \text{ cm}^2$; y (c) $\sigma_{nA} = 1.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$.

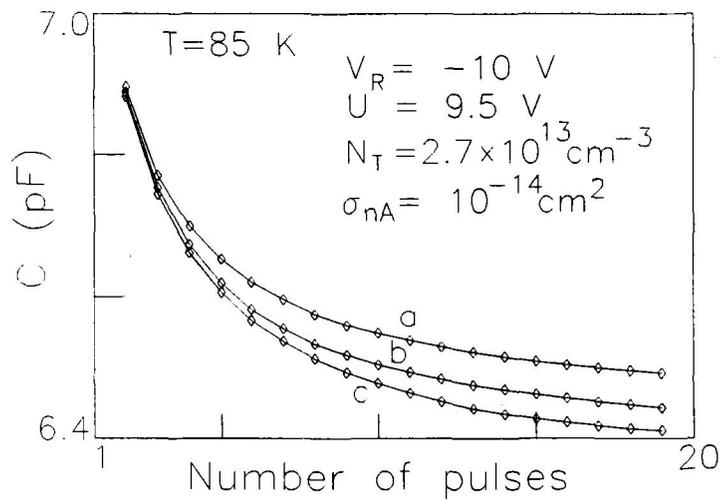


Figura 19.- Variación de los transitorios de capacidad numéricos con la sección eficaz de captura de huecos del centro donador, σ_{pD} , a 85 K. Las diferentes curvas indican: (a) $\sigma_{pD} = 10^{-16} \text{ cm}^2$; (b) $\sigma_{pD} = 5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$; y (c) $\sigma_{pD} = 10^{-15} \text{ cm}^2$.

CAPITULO V:

APLICACIÓN AL SISTEMA Si:Pt.

V.1. INTRODUCCIÓN.

En el capítulo anterior hemos desarrollado nuestro procedimiento combinado numérico-experimental para la medida directa de la sección eficaz de captura térmica de portadores mayoritarios por centros profundos en uniones pn. Asimismo, se ha mostrado la sensibilidad de dicho método tanto a dichas secciones eficaces como a la concentración de centros profundos, analizando las ventajas frente a las técnicas experimentales tradicionales. También se ha estudiado numéricamente las anomalías que presentan los transitorios de capacidad durante la captura en uniones no abruptas fuertemente dopadas.

En este capítulo vamos a mostrar cómo se utiliza este procedimiento para calcular las secciones eficaces de captura y la concentración de centros en un caso concreto y sobre muestras reales. El objetivo de este capítulo es calcular las secciones eficaces de

captura térmica de mayoritarios para los niveles profundos que presenta el platino en silicio. Calcularemos, además, los perfiles de dicha impureza a lo largo de la unión en tres tipos de muestras con concentraciones distintas.

Para realizar esto, primero se detallará el montaje y la técnica experimental usada para medir los transitorios isotermos de capacidad a tensión constante. A continuación, se explicarán las condiciones tecnológicas que han sufrido las muestras medidas en su fabricación, señalando los perfiles de impurezas básicas de las mismas. Por último se mostrarán los ajustes entre los transitorios de capacidad obtenidos experimentalmente y los calculados numéricamente, extrayendo los valores de la sección eficaz de captura de de portadores mayoritarios y la concentración de impurezas profundas.

V.2. MONTAJE Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.

La técnica experimental usada es la denominada de cortocircuito de la unión. Para llevarla a la práctica sobre nuestras muestras se montó el dispositivo experimental esquematizado en la figura 1.

A la vista de dicha figura, la muestra se introdujo en un criostato enfriado por nitrógeno líquido al que está acoplado una bomba para realizar el vacío. La temperatura del criostato se controló y midió con el controlador de temperatura OXFORD 3120 con una precisión de ± 0.1 K. Dicha temperatura se registra en el computador mediante una placa de adquisición de datos DASH 16/F METRABYTE. Como se observa en la figura 1, todo el montaje está controlado por computador. Este dirige la aplicación de los pulsos de polarización a través de la placa de adquisición. La salida de la placa dirige al generador de pulsos HP 8012 B.

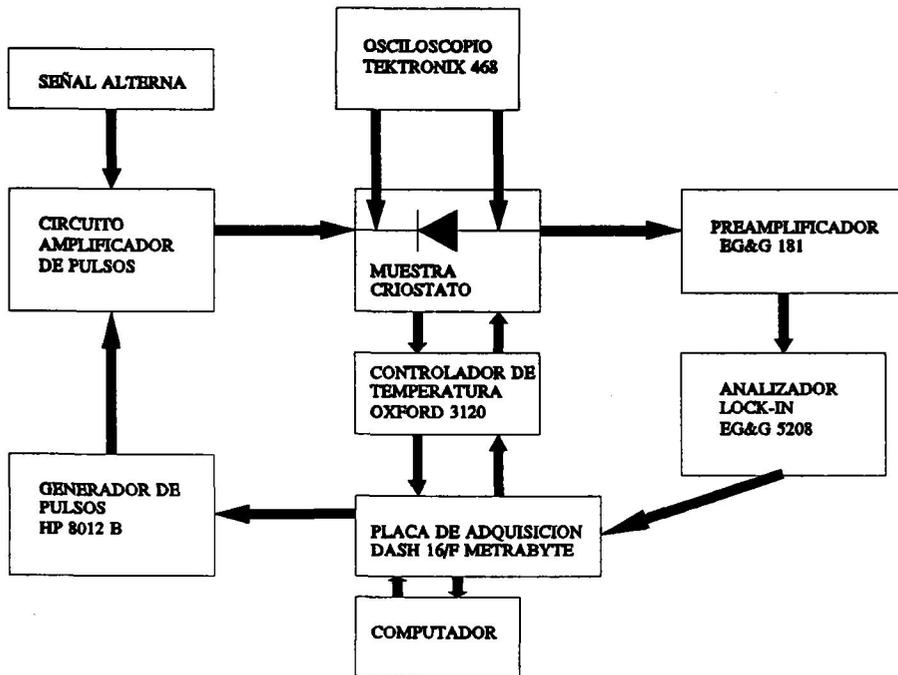


Figura 1.- Esquema del montaje experimental utilizado en la medida de los transitorios de capacidad isoterma durante la captura.

Debido a la poca tensión de offset y la baja amplitud de los pulsos de salida de este generador, se hizo necesaria la amplificación y desplazamiento en tensión de los pulsos. Esto lo realiza el circuito mostrado en la figura 2.

En este circuito amplificador la resistencia de 50Ω se colocó para obtener un buen acoplo de impedancias con la sonda de entrada al mismo. La capacidad de 27 pF mejora la respuesta en frecuencia del montaje permitiendo el paso de pulsos de muy corta duración.

Los pulsos obtenidos se aplican a la muestra, obteniendo su forma directamente en la pantalla de un osciloscopio TEKTRONIX 468 DIGITAL STORAGE mediante sondas compensadas TEKTRONIX de alta impedancia.

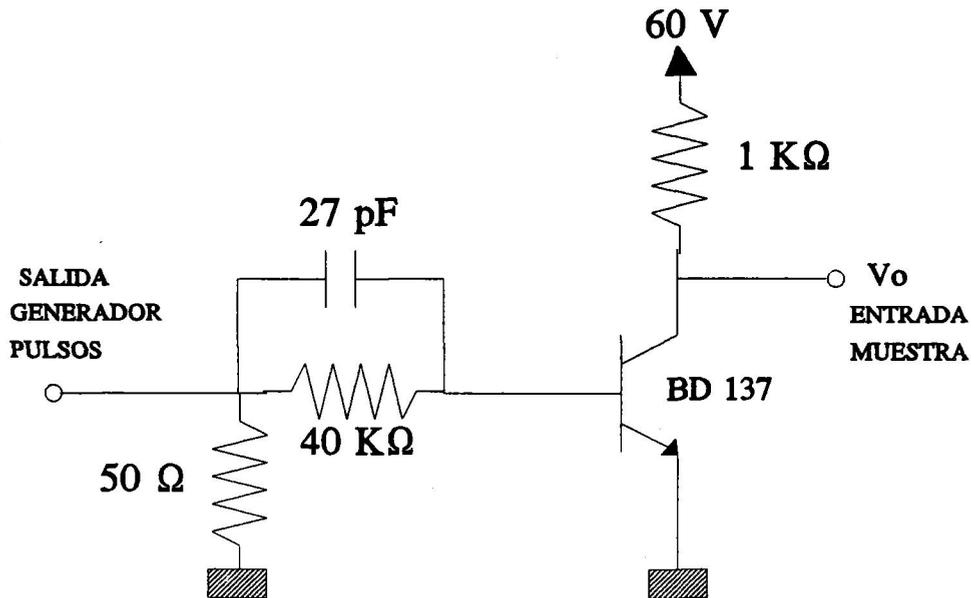


Figura 2.- Circuito amplificador de los pulsos de polarización aplicados a las muestras.

Las variaciones de corriente en la muestra se recogen en el preamplificador EG&G 181 (convertidor I/V) cuya tensión de salida va al analizador LOCK-IN EG&G 5208, utilizado como capacitómetro. La salida del LOCK-IN se registra en el computador debidamente corregida por el factor de escala calculado durante el calibrado del analizador.

Para el funcionamiento del LOCK-IN es necesario que a la señal a medir se le superponga una tensión alterna, con frecuencia igual a la de referencia del analizador. Mediante un sumador se añaden a los pulsos de tensión aplicados una pequeña tensión alterna de 15 mV r.m.s., para garantizar una medida en pequeña señal. La tensión de referencia introducida al LOCK-IN tiene una amplitud de 1V, lo que garantiza una buena sensibilidad del aparato. La frecuencia de la señal alterna utilizada es de 100 KHz, lo que

nos asegura una medida en condiciones de alta frecuencia ($\omega \gg e_n^{-1}(T)$). Para frecuencias mayores, el preamplificador introducía un polo que enmascaraba la medida.

La principal ventaja de este montaje experimental es que aplicamos los pulsos directamente a la muestra, así como que podemos medirlos directamente sobre ella para obtener su forma exacta e incorporarla a la simulación, para reproducir fielmente las condiciones experimentales en que se obtuvo cada transitorio.

Otro montaje alternativo podía incluir el capacitmetro BOONTON 72BD para la medida directa de la capacidad. Sin embargo no es adecuado debido al tiempo de respuesta del aparato y a la deformación que introducía en los pulsos de polarización al colocarlo en paralelo a la muestra.

V.3. PROCESO TECNOLÓGICO DE FABRICACIÓN DE LAS MUESTRAS.

Las muestras medidas fueron uniones p^+nn^+ fabricadas conjuntamente en FAGOR y en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid.

Las obleas utilizadas para la preparación de los diodos fueron de silicio impurificado con fósforo con una resistividad de $62.5 \Omega \cdot \text{cm}$, correspondiente a una concentración de este dopante básico de $6.67 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

Sobre este substrato se efectuaron las difusiones laterales p^+ y, posteriormente, n^+ con las impurezas respectivas de boro y fósforo, a una temperatura de unos $1280 \text{ }^\circ\text{C}$ y durante un período de 20 horas cada una de ellas. Sobre la estructura anterior se procedió a difundir platino de acuerdo con la siguiente secuencia:

- Limpieza de la oblea.

- Deposición de una emulsión de platino, concretamente Filmtronics 920X, sobre la cara n^+ mediante pintado.
- Secado a 300 °C durante 15 minutos.
- Difusión de Platino en horno de tubo abierto en atmósfera inerte (N_2) a las temperaturas y tiempos indicados en la Tabla I.

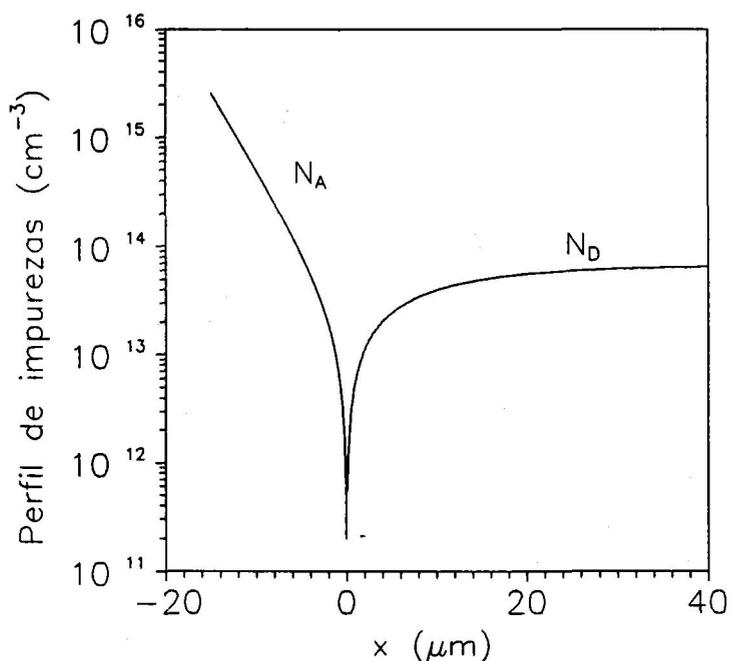


Figura 3.- Perfiles de impurezas donadoras, N_D , y aceptadoras, N_A , en las uniones p^+n bajo estudio.

En una etapa previa al desarrollo de este trabajo se obtuvo el perfil de impurezas básicas de estas muestras [Jiménez-Tejada et al.,1992b]. Dicho perfil se puede modelar por una función exponencial, $N (1 - e^{-x/\lambda})$, donde N y λ dependen de la región en donde se encuentren. Si situamos la unión metalúrgica en $x=0$, la concentración de donadores lejos de la unión metalúrgica en la región N es $N = 6.67 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $\lambda = 10 \text{ μm}$. En la

región P, $N = 2.07 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $\lambda = 3.1 \text{ } \mu\text{m}$. El área de la unión es 0.02 cm^2 . Este perfil se muestra en la figura 3.

TABLA I. Muestras mediadas experimentalmente.

Referencia	T (°C)	t (minutos)
Pt 609 N ⁺ 14	850	1+120+1/2
Pt 606 N ⁺ 14	860	1+120+1/2
Pt 610 N ⁺ 14	870	1+120+1/2

En otro trabajo se caracterizaron los niveles creados por el platino presentes en las muestras mediante espectroscopía de transitorios isotermos de capacidad (CCITS) [López-Villanueva et al.,1990]. Como resultado de ese estudio se detectaron dos niveles profundos: uno aceptador, E_{T1} , localizado a 0.22 eV por debajo del mínimo de la banda de conducción, y otro donador, E_{T2} , situado a 0.34 eV por encima del máximo de la banda de valencia. Ambos niveles con concentración $N_T(x)$.

V.4. RESULTADOS.

Para la obtención de las secciones eficaces de captura de mayoritarios de los dos niveles profundos indicados (σ_{nA} sección eficaz de captura de electrones para el nivel aceptador y σ_{pD} de huecos para el donador), se midieron en el laboratorio transitorios de capacidad bajo distintas condiciones experimentales: Se tomaron medidas a diferentes temperaturas, se aplicaron diferentes pulsos de polarización variando los valores entre los que conmutaba la polarización como la forma para comprobar que estas dos últimas condiciones no influían en el resultado final.

V.4.1 Obtención de la sección eficaz de captura térmica de electrones del nivel aceptador, σ_{nA} .

Debido a que el ajuste entre los transitorios experimentales y numéricos con tres parámetros (σ_{nA} , σ_{pD} y $N_T(x)$) resulta de gran dificultad se aprovechó la morfología de la muestra para separar los ajustes. Así, σ_{nA} y la concentración de impurezas profundas N_T se obtuvo lejos de la unión metalúrgica, mediante la aplicación de altas tensiones inversas de polarización y pulsos de poca amplitud. La razón del cálculo inicial de N_T lejos de la unión se debe a que es en esa región donde se produce la captura, y por tanto donde los procedimientos capacitivos son sensibles a dicha magnitud. La polarización fue de este modo con el objeto de que el borde de la zona de carga espacial no varíe significativamente en el lado p^+ , y la captura sea casi exclusiva del nivel aceptador en el lado n .

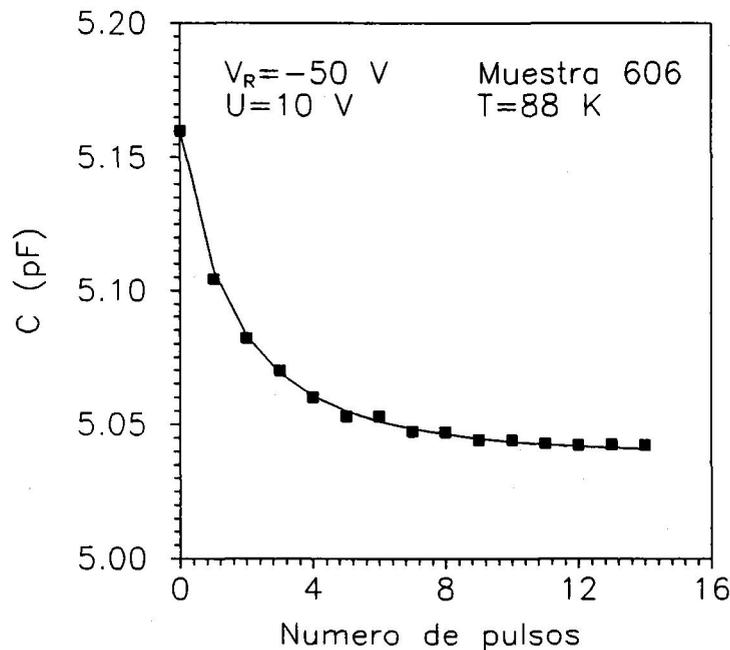


Figura 4.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 606 con pulsos de polarización entre -50 V y -40 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=40$ ns, $t_p=60$ ns, $t_r=75$ ns y $t_m=0.4$ s.

Para asegurarnos que estamos en las condiciones descritas en el párrafo anterior, se aplicaron pulsos de 10 V de amplitud a las muestras polarizadas en inverso a -50 V. Esto se hizo en el rango de temperaturas entre 80 y 93 K. No se pudo ampliar más el rango de temperaturas debido a la proximidad del nivel aceptador con la banda de conducción, y aunque en el ajuste se tolera cierta emisión, a temperaturas mayores este fenómeno enmascara prácticamente la captura imposibilitando un ajuste fiable. En las figuras 4 , 5 y 6 se muestran algunos de los ajustes realizados para las tres muestras medidas.

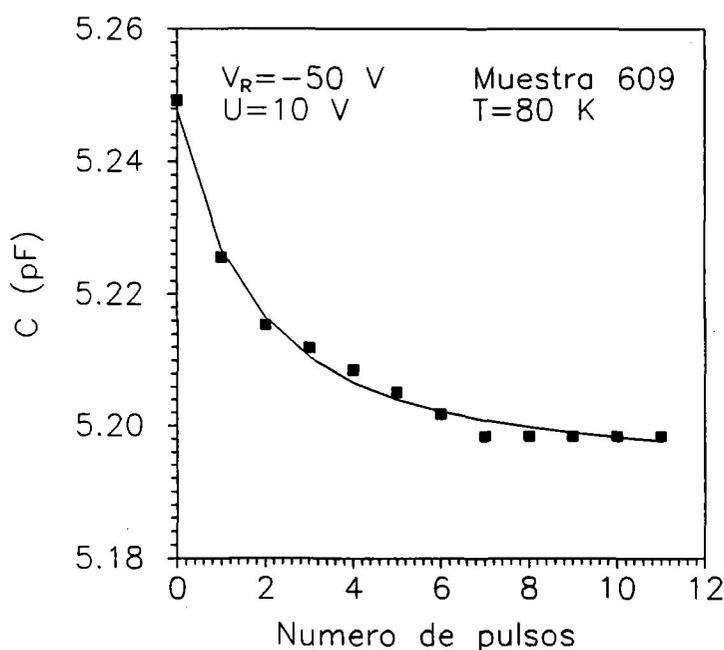


Figura 5.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 609 con pulsos de polarización entre -50 V y -40 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=40$ ns, $t_n=80$ ns, $t_r=60$ ns y $t_m=0.5$ s.

El valor obtenido se confirmó en ajustes con transitorios de capacidad experimentales obtenidos a polarizaciones inversas menores: -40 V, -30 V, -20 V, -10 V y -2 V, y distintas amplitudes de pulso combinándolo con la captura en el otro nivel.

Hemos comprobado que el valor de la sección eficaz de captura térmica de electrones para el nivel aceptador, σ_{nA} , es independiente de la forma y duración del pulso, aunque hay que decir que al ser valor elevado es necesario aplicar pulsos muy estrechos (del orden de 40 a 80 ns) para obtener transitorios de capacidad experimentales con la forma adecuada para un buen ajuste. También como cabía esperar, dicho valor resultó independiente de la concentración de centros con un error menor del 10 por ciento.

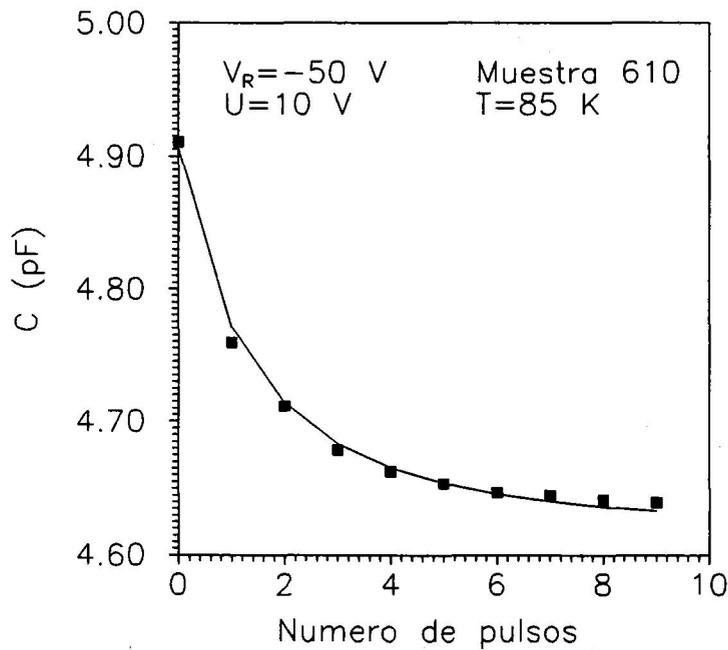


Figura 6.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 610 con pulsos de polarización entre -50 V y -40 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f = 40 \text{ ns}$, $t_n = 60 \text{ ns}$, $t_r = 60 \text{ ns}$ y $t_m = 0.5 \text{ s}$.

El valor de σ_{nA} es independiente de la temperatura en el rango entre 80 K y 93 K, obteniéndose:

$$\sigma_{nA} = (1.05 \pm 0.05) \times 10^{-14} \text{ cm}^2.$$

La posibilidad de que otro par de valores de σ_{nA} y N_T produjera los mismos ajustes es inexistente debido a que cada uno de estos parámetros afecta de manera muy distinta

al transitorio numérico calculado. La pendiente inicial del transitorio está afectada principalmente por σ_{nA} , mientras que la amplitud del mismo viene marcada por la concentración de impurezas profundas, como se pudo observar en el estudio de la sensibilidad de nuestro procedimiento que se realizó en un apartado anterior. A pesar de todo, se han simulado transitorios con otras parejas de valores, comprobándose en todos ellos la divergencia con los resultados experimentales.

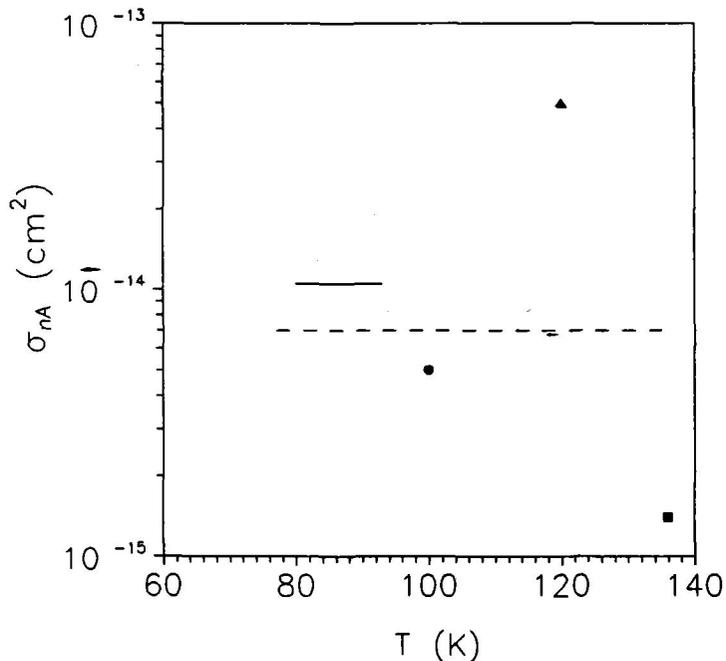


Figura 7.- Valores de la sección eficaz de captura de electrones del nivel aceptador del platino en función de la temperatura dados por nuestro trabajo (línea continua) y según otros autores: círculo [Pals,1974], cuadrado [Evwaraye y Sun,1976], línea discontinua [Brotherton et al.,1979], triángulo [Christmann et al.,1992].

A modo de resumen en la figura 7 se comparan valores de σ_{nA} a distintas temperaturas obtenidos en este trabajo [Palma et al.,1993] con los de otros autores [Pals,1974], [Evwaraye y Sun,1976], [Brotherton et al.,1979], [Christmann et al.,1992]. Las posibles razones de las discrepancias en los resultados se analizarán más adelante.

V.4.2. Obtención de la sección eficaz de captura térmica de huecos del nivel donador σ_{pD} .

En el rango de temperaturas entre 80 K y 130 K hemos obtenido el valor de la sección eficaz de captura térmica de huecos para el nivel donador situado a 0.34 eV de la banda de valencia creado por el platino en el silicio, σ_{pD} . Simultáneamente a este cálculo, se obtiene la concentración de platino, en las regiones cercanas a la unión en ambos lados de la unión metalúrgica. Al trabajar en zonas próximas a la unión hay que tener en cuenta las variaciones en ambos lados y, por tanto, la captura de los dos niveles.

Debido a que, en un primer cálculo, estimamos un valor para σ_{pD} muy inferior al de σ_{nA} , se pueden dividir los transitorios de capacidad en dos partes, la primera rápida y otra lenta, y obtener en cada zona un valor de σ_{pD} y σ_{nA} . La parte inicial rápida era más sensible al alto valor de σ_{nA} , mientras que el tramo final del transitorio lo era a σ_{pD} . Por esa razón los ajustes en los tramos finales de los transitorios nos permiten calcular σ_{pD} de una manera más precisa.

Otra dificultad añadida es que para que la captura de huecos por parte del nivel donador sea significativa en el transitorio de capacidad, se deben aplicar tensiones inversas muy pequeñas a las muestras. Esto implica la influencia de la gradualidad de los perfiles de impurezas básicas en los transitorios, obteniendo transitorios con tramos ascendentes como se predijo en el estudio teórico realizado para muestras muy dopadas.

En las figuras 8 y 9 se muestran algunos de los ajustes realizados entre los transitorios experimentales y simulados para las tres muestras y a bajas temperaturas (menores de 90 K) para obtener σ_{pD}

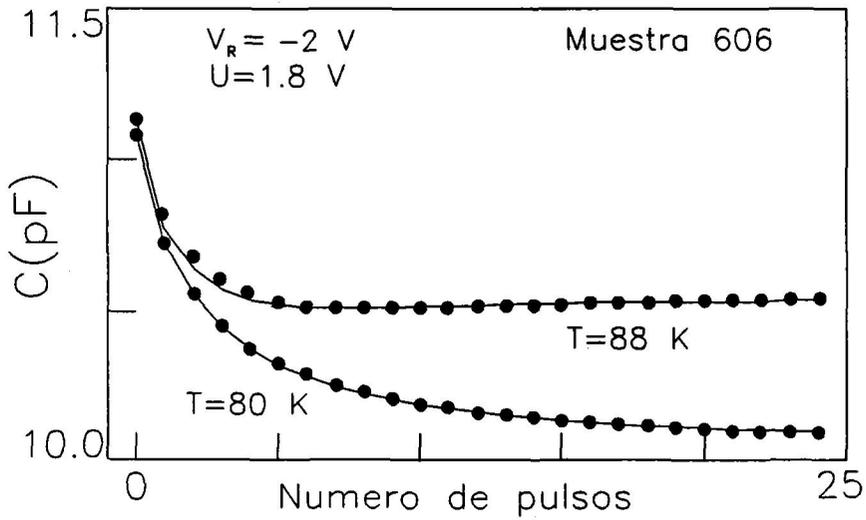


Figura 8.- Ajustes entre los transitorios de capacidad experimentales (símbolos) y los numéricos (líneas) para la muestra 606 con pulsos de polarización entre -2 V y -0.2 V, a diferentes temperaturas. En el ajuste a $T=88 \text{ K}$ se puede apreciar el tramo final creciente. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=40 \text{ ns}$, $t_n=60 \text{ ns}$, $t_r=60 \text{ ns}$ y $t_m=0.5 \text{ s}$.

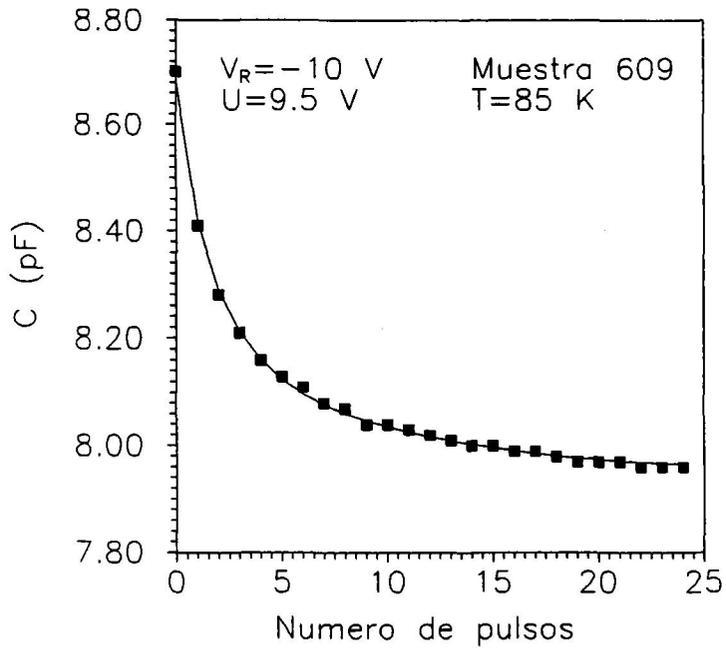


Figura 9.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 609 con pulsos de polarización entre -10 V y -0.5 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=30 \text{ ns}$, $t_n=60 \text{ ns}$, $t_r=70 \text{ ns}$ y $t_m=0.5 \text{ s}$.

En la figura 8 se muestran transitorios medidos y calculados en las muestras con concentración intermedia en las que se observan tramos crecientes. El ajuste es posible incluso en estos casos extremos, y nos permite calcular valores de las secciones eficaces de captura a esas temperaturas bajo esas condiciones experimentales. Aunque en trabajos recientes [Pons, 1984] [Meijer et al., 1984] la emisión ha sido incluida en el análisis numérico de la captura en la cola de Debye, en este caso, aparece una distribución diferente de portadores libres dentro de la zona de carga espacial debido a la gradualidad de los dopantes básicos. Como se ha demostrado en el capítulo anterior, este fenómeno no se puede explicar desde ese tipo de tratamiento.

A temperaturas en torno a los 125 K también se ajustaron transitorios de capacidad experimentales para calcular σ_{pD} . Como a esas temperaturas la emisión del nivel aceptador es muy rápida, una vez transcurrido el tiempo de respuesta de los aparatos, t_m , sólo medimos la variación por la captura del nivel donador. En las figuras 10 y 11 se muestran algunos de los ajustes a dichas temperaturas. Los resultados de estos ajustes muestran una dependencia térmica de σ_{pD} , obteniéndose los valores:

$$\begin{aligned}\sigma_{pD} &= (2.6 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ a } T=80 \text{ K} \\ &= (2.8 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ a } T=82-88 \text{ K} \\ &= (8.5 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ a } T=125-129 \text{ K}.\end{aligned}$$

Esta dependencia puede describirse como:

$$\sigma_{pD}(T) = 6.8 \times 10^{-15} e^{-\frac{0.023}{K_B T}} \text{ cm}^2$$

siendo K_B la constante de Boltzmann en unidades de eV/K y T la temperatura absoluta.

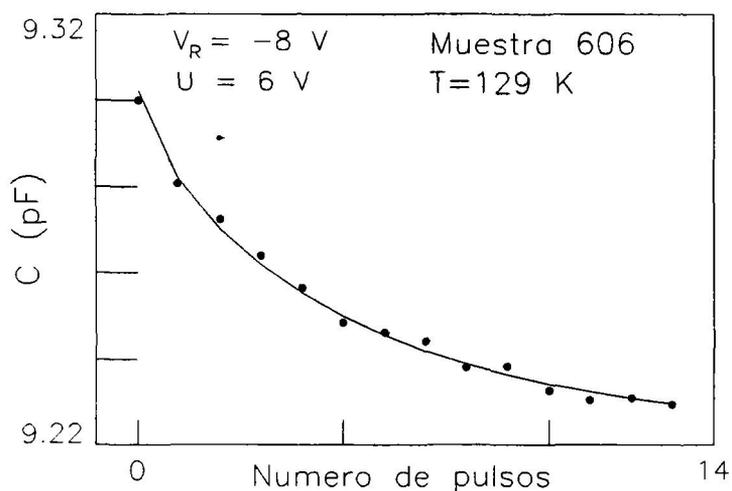


Figura 10.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 606 con pulsos de polarización entre -8 V y -2 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=40 \text{ ns}$, $t_n=120 \text{ ns}$, $t_r=50 \text{ ns}$ y $t_m=0.5 \text{ s}$.

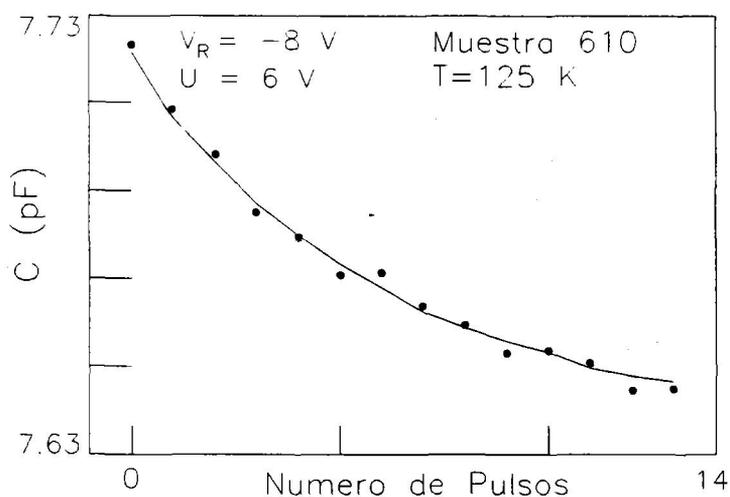


Figura 11.- Ajuste entre el transitorio de capacidad experimental (símbolos) y el numérico (línea) para la muestra 610 con pulsos de polarización entre -8 V y -2 V. La forma de los pulsos fue la siguiente: $t_f=40 \text{ ns}$, $t_n=60 \text{ ns}$, $t_r=50 \text{ ns}$ y $t_m=0.5 \text{ s}$.

En la figura 12, se representan las dependencias térmicas de σ_{pD} de distintos autores [Pals,1974], [Carceller,1978], [Brotherton et al.,1979], frente a los valores

obtenidos en este estudio [Palma et al.,1993]. Merece la pena resaltar la gran dispersión que muestran los distintos resultados, por razones que analizaremos en el apartado de discusión de los resultados.

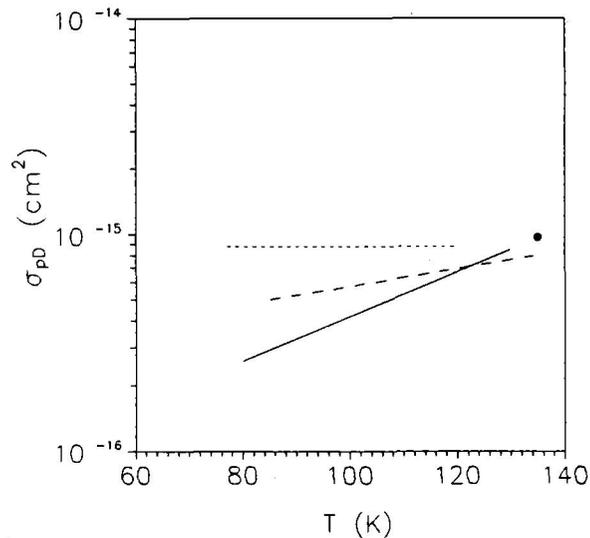


Figura 12.- Dependencia térmica de los valores de la sección eficaz de captura de huecos del nivel donador del platino según nuestro trabajo (línea continua) en comparación con la de algunos autores: círculo [Pals,1974], línea punteada [Carceller,1978], línea discontinua [Brotherton et al.,1979],.

V.4.3. Obtención del perfil de impurezas profundas.

Como hemos mencionando, simultáneamente a la obtención de las secciones eficaces de captura de mayoritarios de ambos niveles creados por el platino, se ha ido

calculando los perfiles de concentración de las impurezas profundas en las tres muestras.

El método sistemático de cálculo ha sido el siguiente:

- Comenzando con polarizaciones altas se ha calculado la concentración de centros lejos de la unión. Para situar de una manera exacta la posición en la unión a la que corresponde dicha concentración, se han calculado las evoluciones de los factores de ocupación durante los transitorios y así delimitar espacialmente el resultado de N_T obtenido.

- Este procedimiento se ha repetido con tensiones cada vez menores, con lo que obtenemos concentraciones en regiones más cercanas, e incluso de la zona p^+ de la unión.

- A continuación el perfil de $N_T(x)$ se aproximó por una expresión analítica.

En este caso los resultados se ajustaron bien a una función exponencial de la forma:

$$N_T(x) = Ae^{Bx} + C$$

En la figura 13 se muestra una serie completa de ajustes, haciendo el barrido en tensiones, para la obtención del perfil de impurezas profundas de una de las muestras. ,

Los resultados obtenidos se pueden observar en la figura 14. Las muestras 609 y 610 están casi compensadas en la región n, y cerca de la unión metalúrgica, la concentración de platino supera a la del dopante básico.

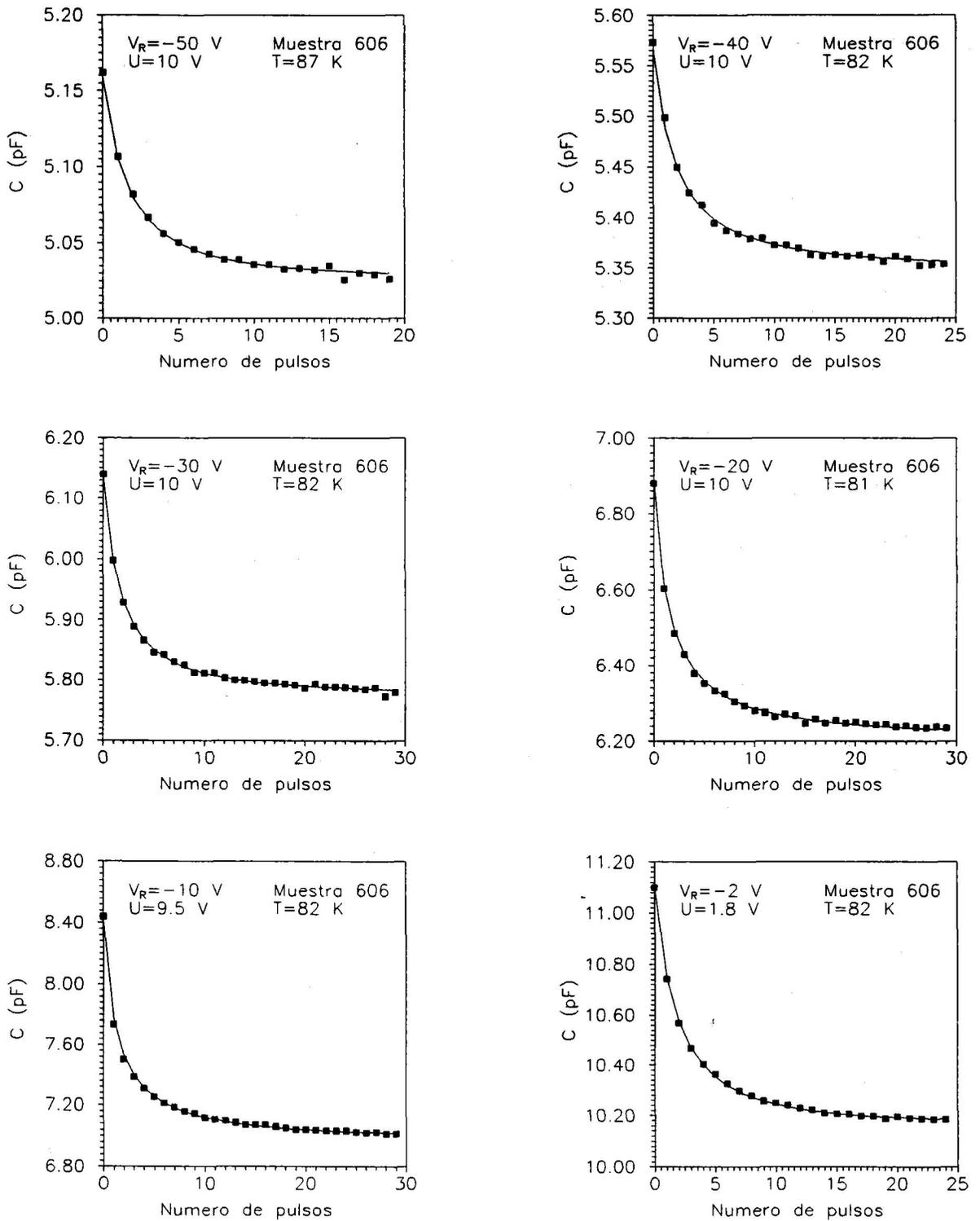


Figura 13.- Serie de ajustes entre distintas polarizaciones en la muestra 606.

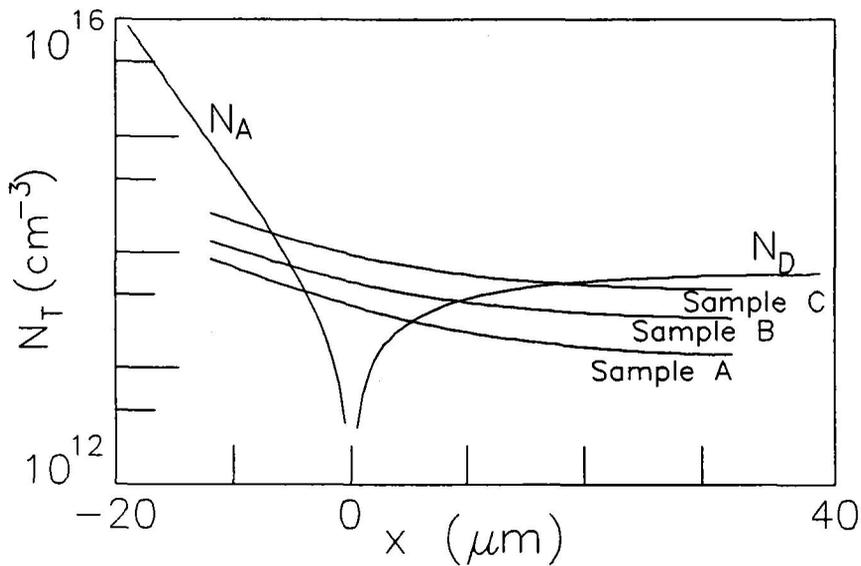


Figura 14.- Concentración de platino para las tres muestras estudiadas, obtenido con nuestro método, comparado con el perfil de impurezas básicas.

V.4.4. Discusión de los resultados: Comparación con valores de otros autores.

Los valores obtenidos de las secciones eficaces de captura de mayoritarios por los niveles creados por el platino en el silicio publicados por otros autores se muestran en la Tabla II.

Como se aprecia en las figuras 7 y 13 y en la Tabla II, existen sustanciales diferencias entre los valores de las secciones eficaces de captura. Estas diferencias pueden deberse tanto a las técnicas experimentales usadas como a las expresiones analíticas aproximadas utilizadas para calcular dichos valores. Entre las posibles causas de esta disparidad cabe resaltar algunos puntos:

- Para calcular estos valores, la mayoría de los estudios necesitan conocer la concentración de impurezas profundas, y, por tanto, un error en esta magnitud produce

resultados imprecisos. Respecto a este punto, hay que puntualizar que en las medidas realizadas hasta ahora la concentración relativa de centros es muy baja lo que implica que el error cometido no será muy importante, siempre y cuando no nos acerquemos a la unión metalúrgica, lo que llevaría a problemas con los perfiles de dopantes básicos.

TABLA II. Secciones eficaces de captura térmica medidas para los niveles aceptador y donador del platino.

Autor	σ_{nA} $\times 10^{-14}$ (cm^2)	T (K)	σ_{pD} $\times 10^{-16}$ (cm^2)	T (K)	Muestra	Téc. ^a
Pals, 1974	0.5	100	9.7	135	pn	1
Evwaraye y Sun, 1976	0.14	136	0.11	185	p ⁺ n/n ⁺ p	2
Carceller, 1978			8.8	77-120	n ⁺ p	3
Brotherton et al., 1979	0.7	77-135	5 8	85 130	p ⁺ n n ⁺ p	1
Kwon et al., 1987	5.3		34		Schottky	2
Stöffler y Weber, 1986	1.0				Schottky	2
Christmann et al., 1992	5	120			pn	2
Nuestros valores	1.05	80-93	2.8 8.5	85 130	p ⁺ n	

^aTécnica: (1) Cortocircuito de la unión a capacidad constante.
 (2) DLTS.
 (3) Cortocircuito de la unión a tensión constante.

- Despreciar la captura durante los tiempos de subida y bajada de los pulsos de polarización, también produce un resultado afectado por un error no despreciable. Hemos

comprobado por simulación que para el nivel aceptador del platino se minusvalora el valor de su sección eficaz. Como hemos mostrado en un apartado anterior, dicho error puede rondar el 50 por ciento.

- En el caso de muestras casi compensadas, si la región de captura se aproxima al punto de cruce entre las concentraciones de impurezas profundas y poco profundas aparecen los fenómenos de emisión ya explicados. Aquí los errores pueden ser de varios órdenes de magnitud.

CONCLUSIONES

1.- Se ha realizado una revisión de las distintas teorías que pretenden interpretar el fenómeno de la captura térmica por emisión de fonones por parte de imperfecciones en una red semiconductor, y que son:

- El proceso de cascada para el caso de impurezas poco profundas cargadas positivamente en silicio a muy bajas temperaturas.
- El mecanismo de emisión multifonón para transiciones de energía mayores que la energía de los fonones de la red.
- El modelo de captura en dos etapas como combinación de los anteriores mecanismos aplicado a captura en impurezas profundas con carga positiva.

Dicho examen reveló ciertos aspectos donde no hay común acuerdo, lo que nos condujo al estudio de este tema mediante la simulación numérica por el método de Monte Carlo.

2.- Para la simulación por el método de Monte Carlo del proceso de cascada como parte integrante de la simulación del transporte de un electrón en la banda de conducción del silicio se han considerado los estados excitados creados por una impureza coulombiana con energía de ionización inferior a la energía térmica como un continuo. Se ha calculado la modificación que dichos estados crean en las probabilidades de dispersión inelásticas por fonones de la red y en las energías de estos fonones. Nuestro tratamiento se ha

Conclusiones

realizado desde un punto de vista exclusivamente energético que ha permitido evitar los inconvenientes del tratamiento espacial llevado a cabo en trabajos anteriores.

Como resultado de la aplicación de este procedimiento para un número suficientemente grande de partículas, se ha obtenido la sección eficaz de captura térmica de electrones por impurezas donadoras poco profundas para temperaturas menores de 50 K . Esto se ha realizado a partir del promedio de la velocidad media y del tiempo de captura de cada portador. Se ha comprobado que los tiempos de captura hasta ahora definidos no reproducen las medidas experimentales. Esta discrepancia nos ha conducido a la realización de un minucioso estudio estadístico de esta magnitud del que hemos extraído las siguientes conclusiones:

2.a.- A las temperaturas de estudio, los estados excitados de la impureza de energía de ionización inferior a $K_B T$ son los que más participan en el proceso de captura en este tipo de centros.

2.b.- La distribución de tiempos de captura presenta un doble decaimiento exponencial con constantes de tiempos muy diferentes, incluyendo aportaciones no tenidas en cuenta en la estadística de Shockley, Read y Hall.

2.c.- La constante de tiempo asociada al decaimiento rápido, debido a las dispersiones con la red, se ha identificado e interpretado como el tiempo de relajación de la energía.

2.d.- La constante de tiempo lenta reproduce las dependencias con la temperatura y concentración de impurezas ionizadas típicas de los datos experimentales. Estos hechos junto con la escala temporal de las medidas de los tiempos de captura nos ha llevado a identificar esta constante de tiempo con el tiempo de captura

realmente medido.

3.- Partiendo del formalismo no condoniano de Ridley, dentro de la aproximación de bajas temperaturas y acoplamiento débil, se han obtenido expresiones de las probabilidades de captura por emisión multifonón válidas para electrones con energía inferior a 0.3 eV. Para ello se han utilizado modelos generales y simples de los elementos que participan en este fenómeno, y admitido una interacción electrón-fonón no polar en silicio y polar en GaAs.

4.- Estas probabilidades así obtenidas se han utilizado para introducir el mecanismo de captura por emisión de fonones en la simulación por Monte Carlo. Se han incluido como un mecanismo más de dispersión junto con el resto de probabilidades de dispersión inelásticas por fonones tanto en silicio como en arseniuro de galio. Sobre los parámetros comúnmente tomados como libres en la expresión de la probabilidad de captura se han verificado los siguientes modelos e hipótesis:

4.a.- Para centros profundos en Si se tomó el fonón no polar longitudinal óptico de energía 63 meV y para el GaAs el fonón polar óptico de 35 meV, valores típicos de estos fonones en dichos semiconductores, como los participantes en las transiciones multifonón.

4.b.- Para el factor de Huang-Rhys, S , se han tomado las estimaciones experimentales, salvo en aquellos casos donde no se conoce. En estos últimos casos nuestro procedimiento ha permitido calcularlo.

4.c.- En cuanto al radio efectivo de la impureza, magnitud que cuantifica el grado de confinamiento de la órbita ligada, se ha demostrado que el valor proporcionado por el modelo de la función delta y del defecto cuántico es adecuado.

Conclusiones

Se ha evitado el principal problema para la implementación numérica de este mecanismo por Monte Carlo, es decir, la gran diferencia de tiempos entre la duración de un vuelo libre y un evento de captura. La proporcionalidad de la probabilidad incluida en la simulación con la concentración de centros capaces de capturar un portador ha permitido realizar simulaciones con concentraciones más altas que las habituales que, dentro de limitaciones asumibles, no perturban el resultado final.

5.- El buen acuerdo presentado entre las secciones eficaces de captura térmica experimentales y las calculadas numéricamente para los centros aceptadores neutros del platino, oro y titanio en silicio, y para los defectos EL2 y EL3 y los creados por el cromo y el hierro en arseniuro de galio han llevado a las conclusiones:

5.a.- Los valores de los factores de Huang-Rhys calculados están muy próximos a las estimaciones experimentales.

5.b.- Se ha verificado la hipótesis habitual de la independencia de la sección eficaz de captura térmica con la temperatura para centros metálicos neutros en silicio con campos eléctricos aplicados por debajo de 10^4 V/cm.

5.c.- En los ajustes de la sección eficaz de captura en función del campo eléctrico también se ha hallado un buen acuerdo con los datos experimentales disponibles en silicio, lo que permite verificar la expresión de la probabilidad de captura propuesta para electrones alejados del fondo de la banda de conducción.

5.d.- Se ha reproducido la dependencia térmica de la sección eficaz de captura del defecto EL2 en GaAs sin necesidad de incluir estados excitados.

6.- Se ha comprobado que la aproximación para bajas temperaturas dada por el

formalismo de Ridley es válida para todos los centros analizados, con lo que no ha sido necesario acudir a expresiones de la probabilidad térmicamente activadas que usualmente llevan a graves errores en la interpretación de este fenómeno.

Se ha mostrado la importancia de la simulación para la interpretación correcta de la dependencia térmica de las secciones eficaces de captura de centros en GaAs. La competencia del mecanismo de captura con el resto de mecanismos de dispersión de la red se ha revelado como un factor importante en la comprensión de este proceso.

7.- Se han combinado en una misma simulación los dos mecanismos de captura antes analizados para implementar el modelo de dos etapas con objeto de interpretar la captura por parte de centros atractivos profundos en silicio. Nuestro procedimiento numérico ha evitado las simplificaciones sin justificación física impuestas por el tratamiento analítico de este modelo, y:

7.a.- Se ha demostrado que es necesario permitir la transición multifonón desde cualquier estado libre para reproducir la fuerte dependencia térmica de las medidas experimentales. Se ha debido modificar la expresión de la probabilidad con el fin de adaptar el estado inicial a un estado excitado o a uno de la banda.

7.b.- Se ha comprobado mediante el buen ajuste con los datos experimentales de los centros donadores ionizados del azufre, el selenio y el oro que las transiciones asistidas por fonones ópticos juegan un papel esencial en este mecanismo para temperaturas superiores a 100 K, en contra de la opinión de algunos autores.

7.c.- Se han calculado los factores de Huang-Rhys para estos centros: $S=0.15$ para el azufre, $S=0.17$ para el Se y $S=2.3$ para el oro.

7.d.- Se ha mostrado que, en el caso del azufre, las transiciones directas desde la banda de conducción al estado fundamental son dominantes por encima de 150 K, y que el electrón se mueve habitualmente en la mitad superior de los estados excitados de la impureza lo que reafirma la hipótesis del continuo de estados para esa región de energías.

7.e.- Mediante simulación se ha comprobado que la captura por parte de estos centros en presencia de campo eléctrico apreciable es similar a la de los neutros debido a la contribución despreciable de los estados excitados tal y como han sugerido algunos estudios y medidas experimentales.

8.- Se han calculado las relaciones entre el factor de Huang-Rhys y la profundidad energética del nivel para centros neutros y cargados en silicio y en GaAs. Se han confirmado gran parte de resultados anteriores sobre este tema. Estas relaciones son de gran utilidad para la implementación directa y sencilla del acoplamiento electrón-fonón que poseen estos centros en la red, y que tiene gran importancia en el estudio de propiedades térmicas y ópticas del material.

9.- Con el objetivo de la determinación experimental de la sección eficaz de captura térmica se ha realizado un examen crítico de las aproximaciones y rangos de aplicabilidad de las técnicas capacitivas de medida directa de esta magnitud.

10.- Se ha demostrado que en los centros metálicos en silicio que presentan dos niveles profundos, uno aceptador en la mitad superior de la banda prohibida y otro donador en la inferior, no es posible asegurar si son dos centros bipolares o uno tripolar con las técnicas de medida de mayoritarios usualmente utilizadas en el estudio de centros profundos.

11.- Se ha desarrollado una técnica propia combinada numérico experimental de medida precisa de esta magnitud y de los perfiles de concentración de centros profundos en uniones pn con más de un centro de distinto carácter que ha proporcionado las siguientes conclusiones:

11.a.- Se han evitado y cuantificado los errores que suponen las aproximaciones clásicas de las técnicas tradicionales previamente analizadas tanto por la concentración de centros como por despreñar la forma de los pulsos de polarización no abruptos.

11.b.- Se han interpretado transitorios anómalos durante la captura observados experimentalmente en muestras muy dopadas como un efecto de la gradualidad del perfil del dopante básico.

11.c.- Se ha comprobado la alta sensibilidad de nuestro procedimiento tanto al valor de la sección eficaz como a la de concentración de centros profundos.

12.- Esta técnica se ha aplicado para obtener las secciones eficaces de captura térmica de mayoritarios y la concentración de impurezas profundas en varias muestras dopadas con platino en el rango de 80 K a 130 K. Como resultado de este estudio se ha hallado un valor de la sección eficaz de captura de electrones del centro aceptador independiente de la temperatura, mientras que la sección eficaz de huecos del nivel donador muestra un comportamiento creciente con la misma. Por último, se han comparado nuestros resultados con los disponibles en la bibliografía encontrando buen acuerdo con algunas de las medidas más recientes.

APÉNDICE A:**MECANISMOS DE DISPERSION INELASTICOS INTRODUCIDOS EN LA SIMULACIÓN POR EL MÉTODO DE MONTE CARLO.****A.1. DISPERSIÓN POR FONONES ACÚSTICOS INTRAVALLE.**

Para tratar la disipación de energía a través de fonones acústicos correctamente, debemos tener en cuenta la energía del fonón implicado en el balance energético de la colisión:

$$\epsilon(k') = \epsilon(k) \pm \hbar q u \quad (\text{A.1})$$

donde q es el vector de onda del fonón y u la velocidad del sonido. En la notación que sigue el signo superior se refiere a absorción y el inferior a emisión.

Cuando se consideran todos los detalles de las bandas elipsoidales multivalle y su no parabolicidad [Jacobini y Reggiani, 1983] resulta una probabilidad de dispersión por unidad de tiempo como función de la energía para absorción y emisión:

$$P_{e,ac}(\epsilon) = \frac{m_d^{1/2} (K_B T)^3 E_1^2}{2^{5/2} \pi \hbar^4 u^4 \rho} [\gamma(\epsilon)]^{-1/2} \times \quad (A.2)$$

$$[(1+2\alpha\epsilon)[F_1(x_{2,a})-F_1(x_{1,a})]+2\alpha K_B T[F_2(x_{2,a})-F_2(x_{1,a})]] \quad \text{Absorción}$$

$$[(1+2\alpha\epsilon)[G_1(x_{2,e})-G_1(x_{1,e})]-2\alpha K_B T[G_2(x_{2,e})-G_2(x_{1,e})]] \quad \text{Emisión}$$

donde $\gamma(\epsilon)$ es la relación de dispersión entre el vector de onda y la energía y

$$F_1(x) = \int_0^x N_q(x') x'^2 dx',$$

$$F_2(x) = \int_0^x N_q(x') x'^3 dx',$$

(A.3)

$$G_1(x) = \int_0^x [N_q(x') + 1] x'^2 dx',$$

$$G_2(x) = \int_0^x [N_q(x') + 1] x'^3 dx'$$

siendo N_q la función de distribución de Bose para los fonones acústicos. Los argumentos de esas funciones integrales vienen dados por:

- Para absorción:

$$x_{1,a} = C(\alpha) [\sqrt{\epsilon_s} (1+2\alpha\epsilon) - \sqrt{\gamma}] ; \gamma < \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s} \quad (A.4)$$

$$x_{2,a} = C(\alpha) [\sqrt{\epsilon_s} (1+2\alpha\epsilon) + \sqrt{\gamma}] ; \gamma < \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s}$$

$$\begin{aligned}
 x_{1,a} &= 0 & ; \gamma > \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s} \\
 x_{2,a} &= C(\alpha)[\sqrt{\gamma} + \sqrt{\epsilon_s}(1+2\alpha\epsilon)] & ; \gamma > \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s}
 \end{aligned}
 \tag{A.5}$$

- Para emisión:

$$\begin{aligned}
 x_{1,e} &= 0 & ; \gamma > \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s} \\
 x_{2,e} &= C(\alpha)[\sqrt{\gamma} - \sqrt{\epsilon_s}(1+2\alpha\epsilon)] & ; \gamma > \frac{\epsilon_s}{1-4\alpha\epsilon_s}
 \end{aligned}
 \tag{A.6}$$

siendo

$$C(\alpha) = \frac{4\epsilon_s^{1/2}}{K_B T(1-4\alpha\epsilon_s)}
 \tag{A.7}$$

con K_B la constante de Boltzmann, T la temperatura absoluta, ϵ la energía del electrón, m_d la masa efectiva del mismo, ρ la densidad másica de la red, u la velocidad del sonido en ella, α el parámetro de no parabolicidad de la banda de conducción, E_1 el potencial de deformación acústico y $\epsilon_s = m_d u^2/2$.

A.2. DISPERSIÓN POR FONONES ACÚSTICOS NO POLARES INTRAVALLE E INTERVALLE.

Para los modos ópticos, el hamiltoniano de perturbación se asume proporcional al desplazamiento atómico y no a su derivada como en el caso de los acústicos. Además la energía asociada con los fonones ópticos en las transiciones intravalle puede considerarse

constante, por esta razón N_q se convierte en independiente de q ($N_q = N_{op}$).

Introduciendo todas las aproximaciones de valles elipsoidales y no parabolicidad de las bandas la probabilidad de dispersión por fonones ópticos (de frecuencia ω_{op}) por unidad de tiempo es:

$$P_{e,op}(\epsilon) = \frac{(D_r K)^2 m_d^{3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_{op}} \left[\begin{array}{c} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{array} \right] [\gamma(\epsilon \pm \hbar \omega_{op})]^{1/2} [1 + 2\alpha(\epsilon \pm \hbar \omega_{op})] \quad (\text{A.8})$$

donde γ es la relación entre la energía y el vector de onda del electrón. $D_r K$ es la constante de acoplamiento óptico.

La expresión para la probabilidad para las transiciones intervalle asistidas por fonones ópticos es formalmente idéntica a la obtenida para las transiciones intravalle, salvo que hay que multiplicarla por el número de posibles valles finales equivalentes según el tipo de dispersión intervalle considerada, Z_f . Por supuesto, se sustituyen las energías de sus fonones y constantes de acoplamiento, teniendo en cuenta la posible diferencia de energías del fondo del valle inicial y final.

A.3. DISPERSIÓN POR FONONES POLARES ÓPTICOS.

En materiales polares, como el GaAs, además de las dispersiones por el potencial de deformación, existen otras interacciones electrón-fonón debida a la polarización electrostática asociada a las vibraciones atómicas. Habitualmente esta interacción se trata de dos modos distintos. Por un lado, debido a modos acústicos, cuando la deformación del cristal produce un campo piezoeléctrico. Como usualmente este mecanismo se implementa en la aproximación elástica y es importante sólo a bajas temperaturas no se ha incluido en la simulación. Por otro lado, debido a modos ópticos, cuando la

polarización asociada a los dos átomos vibrando con fases opuestas juega un papel importante, que será tratado en este epígrafe. En ambos casos la interacción hamiltoniana puede escribirse como

$$H' = \int \rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (\text{A.9})$$

donde $\rho(\mathbf{r})$ es la densidad de carga de el electrón y $\phi(\mathbf{r})$ es el potencial electrostático asociado con la polarización $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ del cristal. La naturaleza electrostática del mecanismo es tal que la eficiencia del mecanismo de dispersión decrece al incrementarse la energía del electrón, esto es a temperaturas o campos eléctricos aplicados mayores.

Cuando dos átomos vibran a lo largo del eje polar en un modo longitudinal óptico, crean un dipolo eléctrico oscilante y, por tanto, un campo eléctrico alterno y un potencial que puede dispersar a los portadores. La probabilidad total de dispersión por fonones ópticos por unidad de tiempo viene dada por:

$$P_{e,\rho o}(\epsilon) = \frac{e^2\sqrt{m}\omega_{op}}{\sqrt{2}\hbar} \left(\frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{1+2\alpha\epsilon'}{\gamma^{1/2}(\epsilon)} F_o(\epsilon, \epsilon') \begin{bmatrix} N_q \\ N_q+1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

donde $\gamma(\epsilon) = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \hbar^2k^2/2m$, $\epsilon' = \epsilon \pm \hbar\omega_{op}$ es la energía del electrón después de la transición. κ_{∞} y κ_0 son las constantes dieléctricas del material a frecuencia infinita y cero respectivamente, y

$$F_o(\epsilon, \epsilon') = C^{-1} \left[A \ln \left| \frac{\gamma^{1/2}(\epsilon) + \gamma^{1/2}(\epsilon')}{\gamma^{1/2}(\epsilon) - \gamma^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right], \quad (\text{A.11})$$

con

$$\begin{aligned} A &= [2(1+2\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon') + \alpha(\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon'))]^2 \\ B &= -2\alpha\gamma^{-1/2}(\epsilon)\gamma^{-1/2}(\epsilon')[4(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon') + \alpha(\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon'))] \\ C &= 4(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon')(1+2\alpha\epsilon)(1+2\alpha\epsilon'). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

APÉNDICE B:**PARÁMETROS FÍSICOS DE LA BANDA DE CONDUCCIÓN DE LAS REDES DE Si Y GaAs INTRODUCIDOS EN LA SIMULACIÓN POR EL MÉTODO DE MONTE CARLO.**

En este apartado se muestran los distintos parámetros físicos, introducidos en las simulaciones por Monte Carlo realizadas en este trabajo, que caracterizan el transporte de electrones en la banda de conducción de las redes cristalinas de Silicio y Arseniuro de Galio. En primer lugar nos ocuparemos de la red de Si y a continuación de la de GaAs.

B.1. PARÁMETROS DE LA BANDA DE CONDUCCIÓN DEL Si.

En las distintas simulaciones por el Método de Monte Carlo para la banda de conducción de la red de silicio se ha modelado de la forma siguiente:

- Seis valles en la aproximación de la masa efectiva y
- no parabolicidad de los valles con un valor del parámetro $\alpha = 0.5 \text{ eV}^{-1}$.

Los mecanismos de dispersión considerados son la dispersión por fonones

Apéndice B

acústicos, fonones ópticos no polares intravalle y fonones ópticos no polares intervale. Los distintos parámetros físicos que caracterizan la banda de conducción y que forman parte de la ecuaciones para evaluar las distintas probabilidades de dispersión vienen recogidos en la tabla I que se muestra a continuación.

TABLA I: Parámetros para la banda de conducción del Si [Jacoboni y Reggiani, 1983].

Parámetro	Valor
Densidad (ρ)	2.329 g/cm ³
Velocidad del sonido (u)	6500 m/s
Constante dieléctrica (ϵ)	11.7 ϵ_0
Masa efectiva longitudinal (m_l)	0.92 m_0
Masa efectiva transversal (m_t)	0.19 m_0
Potencial de deformación acústico (E_1)	9.0 eV
Temperatura equivalente del fonón TA	140 K
Constante de acoplamiento del fonón TA (D_1K)	0.5×10^8 eV/cm
Temperatura equivalente del fonón LA	215 K
Constante de acoplamiento del fonón LA (D_1K2)	0.8×10^8 eV/cm
Temperatura equivalente del fonón LO	720 K
Constante de acoplamiento del fonón LO (D_1K3)	11.0×10^8 eV/cm
Fonones responsables de transiciones intervale	
Temperatura equivalente del fonón TA	220 K
Constante de acoplamiento	0.3×10^8 eV/cm
Temperatura equivalente del fonón LA	550 K
Constante de acoplamiento	2×10^8 eV/cm
Temperatura equivalente del fonón TO	685 K
Constante de acoplamiento	2×10^8 eV/cm

B.2. PARÁMETROS DE LA BANDA DE CONDUCCIÓN DEL GaAs.

TABLA II: Parámetros del material GaAs [Littlejohn et al., 1977].

Parámetros de volumen.			
Parámetro	Valor		
Densidad	5.36 g/cm ³		
Afinidad electrónica	4.07 eV		
Energía del fonón LO	35.36 meV		
Velocidad del sonido	5240 m/s		
Constante dieléctrica óptica	10.92 ϵ_0		
Constante dieléctrica estática	12.92 ϵ_0		
Parámetros dependientes del valle			
Parámetro	Valle de la banda de conducción		
	$\Gamma(000)$	X(100)	L(111)
Potencial de deformación acústico (eV)	7.0	9.27	9.2
Masa efectiva (m^*/m_0)	0.063	0.58	0.222
No parabolicidad (eV ⁻¹)	0.61	0.204	0.461
Ancho de la banda prohibida (eV)	1.439	1.961	1.769
Potencial de deformación óptico (eV/cm)	0	0	3x10 ⁸
Energía del fonón óptico (meV)	-	-	34.3
Potencial de deformación intervalle (eV/cm)			
desde $\Gamma(000)$	0	10 ⁹	10 ⁹
desde X(100)	10 ⁹	7x10 ⁸	5x10 ⁸
desde L(111)	10 ⁹	5x10 ⁸	10 ⁹
Energía del fonón intervalle (eV)			
desde $\Gamma(000)$	0	0.0299	0.0278
desde X(100)	0.0299	0.0299	0.0293
desde L(111)	0.0278	0.0293	0.0290
Número de valles equivalentes	1	3	4

Apéndice B

Como se indica en la Tabla II para la modelización de la banda de conducción en el GaAs se han tomado los tres mínimos inferiores cada cual con su degeneración y parámetro de no parabolicidad.

APÉNDICE C:

RESOLUCIÓN DE LA EVOLUCIÓN DEL ESTADO DE CARGA DE UN CENTRO TRIPOLAR.

El sistema de ecuaciones diferenciales que debemos resolver para tal fin es:

$$f_T^0(t) = 1 - f_T^*(t) - f_T^-(t) \quad (C.1)$$

$$\frac{\partial f_T^-(t)}{\partial t} = (c_{nA}n + e_{pA})f_T^0(t) - (e_{nA} + c_{pA}p)f_T^-(t) \quad (C.2)$$

$$\frac{\partial f_T^*(t)}{\partial t} = (c_{pD}p + e_{nD})f_T^0(t) - (e_{pD} + c_{nD}n)f_T^*(t) \quad (C.3)$$

junto con los factores de ocupación en el instante inicial.

Utilizando la ecuación (C.1) para eliminar el factor de centros neutros en las otras dos queda un par de ecuaciones diferenciales con dos incógnitas:

$$\frac{\partial f_T^-(t)}{\partial t} = (c_{nA}n + e_{pA})(1 - f_T^*(t)) - (c_{nA}n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA}p)f_T^-(t) \quad (C.4)$$

$$\frac{\partial f_T^+(t)}{\partial t} = (c_{pD}p + e_{nD})(1 - f_T^-(t)) - (c_{pD}p + e_{nD} + e_{pD}c_{nD}n)f_T^+(t) \quad (\text{C.5})$$

Para manejar las ecuaciones mejor definimos los siguientes parámetros:

$$\begin{aligned} \alpha &= c_{nA}n + e_{pA} \\ \tau_A &= (c_{nA}n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA}p)^{-1} \\ \beta &= c_{pD}p + e_{nD} \\ \tau_D &= (c_{pD}p + e_{nD} + e_{pD} + c_{nD}n)^{-1} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

los cuales los consideraremos constantes en el tiempo suponiendo el caso de que la concentración de dopante básico sea mucho mayor que la de impurezas profundas.

Por lo tanto, el sistema de ecuaciones a resolver queda:

$$\frac{\partial f_T^-(t)}{\partial t} = \alpha(1 - f_T^-(t)) - \frac{f_T^-(t)}{\tau_A} \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{\partial f_T^+(t)}{\partial t} = \beta(1 - f_T^+(t)) - \frac{f_T^+(t)}{\tau_D} \quad (\text{C.8})$$

Este sistema de ecuaciones diferenciales se resuelve de la manera estándar.

Despejamos el factor de ocupación de electrones de la ecuación (C.8):

$$f_T^+(t) = 1 - \frac{1}{\beta} \frac{\partial f_T^+(t)}{\partial t} - \frac{f_T^+(t)}{\beta \tau_D} \quad (\text{C.9})$$

derivando respecto del tiempo:

$$\frac{\partial f_T^+(t)}{\partial t} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 f_T^+(t)}{\partial t^2} - \frac{1}{\beta \tau_D} \frac{\partial f_T^+(t)}{\partial t} \quad (\text{C.10})$$

Introducimos las ecuaciones (C.9) y (C.10) en la ecuación (C.7). Multiplicando por β y agrupando términos queda:

$$\frac{\partial^2 f_T^*(t)}{\partial t^2} + (\tau_A^{-1} + \tau_D^{-1}) \frac{\partial f_T^*(t)}{\partial t} + (\tau_A^{-1} \tau_D^{-1} - \alpha \beta) f_T^*(t) = \beta (\tau_A^{-1} - \alpha) \quad (C.11)$$

La expresión (C.11) es una ecuación diferencial ordinaria de 2º orden con coeficientes constantes. La solución es la suma de la solución de la ecuación homogénea más una solución particular. La solución de la ecuación homogénea es de la forma:

$$f_{Th}^*(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \quad (C.12)$$

siendo C_i constantes de integración dependientes de las condiciones iniciales, mientras que λ_i son las soluciones de la ecuación característica de la expresión (C.11):

$$\lambda^2 + (\tau_A^{-1} + \tau_D^{-1})\lambda + \tau_A^{-1} \tau_D^{-1} - \alpha \beta = 0 \quad (C.13)$$

sobre la que volveremos más adelante.

La solución particular, dada la forma del término independiente de la ecuación diferencial, es una constante. Al introducirla en la ecuación (C.11) se obtiene:

$$f_{Tp}^*(t) = \beta \frac{\tau_A^{-1} - \alpha}{\tau_A^{-1} \tau_D^{-1} - \alpha \beta} \quad (C.14)$$

por tanto la solución general de la expresión C.11 será:

$$f_T^*(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} + \beta \frac{\tau_A^{-1} - \alpha}{\tau_A^{-1} \tau_D^{-1} - \alpha \beta} \quad (C.15)$$

Resolvamos ahora la ecuación característica, (C.13). El discriminante vale:

$$(\tau_A^{-1} + \tau_D^{-1})^2 - 4(\tau_A^{-1}\tau_D^{-1} - \alpha\beta) \quad (\text{C.16})$$

si el producto $\alpha\beta$ es despreciable frente al producto de inversas de las constantes de tiempo:

$$\tau_A^{-1}\tau_D^{-1} - \alpha\beta \approx \tau_A^{-1}\tau_D^{-1} \quad (\text{C.17})$$

cada una de las soluciones λ_i será la inversa de cada una de las constantes de tiempo. De esta manera cada uno de los exponentes sólo depende de los coeficientes de un nivel. En caso contrario, los exponentes lambdas serán expresiones complejas en las que se mezclan los coeficientes de ambos niveles de energía del centro tripolar. Analicemos, por tanto, el 2º término de la expresión (C.16). Examinándolo detenidamente, observamos que en el caso en el que las concentraciones de huecos y electrones no sea despreciables a la vez $\alpha\beta$ no se puede despreciar frente al otro término, ya que contiene el producto $c_{nA}c_{pD}pn$. En los casos donde una o ambas concentraciones de portadores libres son despreciables tenemos:

- $n=0$, p distinto de 0:

$$\begin{aligned} \alpha\beta &= e_{pA}(c_{pD}p + e_{nD}) \\ c_{pD}p(e_{nA} - e_{pA}) &= c_{pD}pe_{nA} \\ e_{nD}(e_{nA} - e_{pA}) &= e_{nD}e_{nA} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

con lo que se verifica la condición (C.17).

- $p=0$, n distinto de 0:

$$\begin{aligned} \alpha\beta &= e_{nD}(c_{nA}n + e_{pA}) \\ c_{nA}n(e_{pD} - e_{nD}) &= c_{nA}ne_{pD} \\ e_{pA}(e_{pD} - e_{nD}) &= e_{pA}e_{pD} \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

- $n=p=0$

$$\alpha\beta = e_{pA}e_{nD} \quad (\text{C.20})$$

producto que es despreciable en los niveles que estamos considerando, el donador en la mitad inferior de la banda prohibida y el aceptador en la superior.

En todos estos casos se verifica la condición (C.17), por lo que:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -\tau_A^{-1} \\ \lambda_2 &= -\tau_D^{-1}\end{aligned}\tag{C.21}$$

En el caso de una unión pn donde nos podemos encontrar con todos estos casos estas igualdades se verifican si las condiciones experimentales en que se produce la evolución de los distintos factores de ocupación impiden la entrada de minoritarios en las regiones bajo estudio. Para conseguir esto basta con no polarizar en directo la unión, es decir, en condiciones de pulsos de mayoritarios sólo. A partir de ahora nos quedamos en los casos en que la sí se verifica y por tanto utilizaremos las igualdades (C.21).

Volviendo a la obtención de los factores de ocupación, utilizando (C.9), (C.15) y (C.21) obtengo la solución para el factor de ocupación de electrones:

$$f_T(t) = \frac{\tau_A^{-1} - \tau_D^{-1}}{\beta} C_1 e^{-\frac{t}{\tau_A}} + \alpha \tau_A\tag{C.22}$$

que junto con la ocupación inicial de electrones me permite despejar el valor de la constante C_1 :

$$C_1 = \beta \frac{f_T(0) - \alpha \tau_A}{\tau_A^{-1} - \tau_D^{-1}}\tag{C.23}$$

con lo que queda el factor de ocupación de electrones del centro tripolar, en función ya de los coeficientes:

$$f_T(t) = \frac{c_{nA}n + e_{pA}}{c_{nA}n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA}p} + \left(f_T^-(0) - \frac{c_{nA}n + e_{pA}}{c_{nA}n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA}p} \right) e^{-(c_{nA}n + e_{pA} + e_{nA} + c_{pA}p)t} \quad (\text{C.24})$$

expresión que es idéntica a la obtenida para un centro bipolar aceptador.

En cuanto al factor de ocupación de huecos del centro, conocido la condición inicial y siguiendo un tratamiento análogo obtenemos:

$$f_T^*(t) = \frac{c_{pD}p + e_{nD}}{c_{pD}p + e_{nD} + e_{pD} + c_{nD}n} + \left(f_T^*(0) - \frac{c_{pD}p + e_{nD}}{c_{pD}p + e_{nD} + e_{pD} + c_{nD}n} \right) e^{-(c_{pD}p + e_{nD} + e_{pD} + c_{nD}n)t} \quad (\text{C.25})$$

expresión idéntica a la de un centro bipolar donador.

BIBLIOGRAFÍA.

ABAKUMOV V.N., PEREL' V.I. y YASSIEVICH I.N., 1978, "*Capture of carriers by attractive centers in semiconductors (Review)*", Sov. Phys. Semicond. **12**(1), pp. 1-18.

ALVES J.L.A. y LEITE J.R., 1984, "*Watson-sphere-terminated model applied to the Au⁰ and Pt substitutional impurities in silicon*", Phys. Rev. B **30**(12), pp. 7284-7286.

AMATO M.A. y RIDLEY B.K., 1980, "*A comparison of simple theoretical models for the photoionisation of impurities in semiconductors*", J. Phys. C **13**, pp. 2027-2039.

AMATO M.A., 1992, "*Thermal excitation rates and capture cross section associated with deep impurities in semiconductors*", Solid-State Electron. **35**(5), pp. 731-734.

ARMELLES G., BARRAU J., BROUSSEAU M., PAJOT B. y NAUD C., 1985, "*Effective mass-like states of the deep acceptor level of Au and Pt in silicon*", Solid State Com. **56**(3), pp. 303-305.

ASCARELLI G. y RODRIGUEZ S., 1961, "*Recombination of electron and donors in n-type germanium*", Phys. Rev. **124**(5), pp. 1321-1328.

BARBOLLA J., PUGNET M., BRABANT J.C. y BROUSSEAU M., 1976, "*Thermal capture cross-section of free electrons at neutral gold centers in n-type silicon*", Phys. Stat. Sol. (a) **36**, pp. 495-498.

BEBB H.B., 1969, "*Application of the quantum-defect method to optical transitions involving deep effective-mass-like impurities in semiconductors*", Phys. Rev. **185**(3), pp. 1116-1126

Bibliografía

- BROTHERTON S.D., BRADLEY P. y BICKNELL J., 1979, "*Electrical properties of platinum in silicon*", J. Appl. Phys. **50**(5), pp. 3396-3403.
- BROTHERTON S.D. y LOWTHER J.E., 1980, "*Electron and hole capture at Au and Pt centers in silicon*", Phys. Rev. Lett. **44**(9), pp. 606-609.
- BROTHERTON S.D. y BRADLEY P., 1982, "*Measurement of minority carrier capture cross sections and application to gold and platinum in silicon*", J. Appl. Phys. **53**(3), pp. 1543-1552.
- BROWN R.A. y RODRIGUEZ S., 1967, "*Low-temperature recombination of electrons and donors in n-type germanium and silicon*", Phys. Rev. **153**(3), pp. 890-900.
- BUCHANAN D.A., FISCHETTI M.V. y DiMARIA D.J., 1991, "*Coulombic and neutral trapping centers in silicon dioxide*", Phys. Rev. **43**(2), pp. 1471-1486.
- BURT M.G., 1979, "*Electron capture by multiphonon emission at the B center in gallium arsenide*", J. Phys. C **12**, pp. 4827-4832.
- BURT M.G., 1981, "*The determination of the Huang-Rhys factor for a deep level in a semiconductor*", J. Phys. C **14**, pp. L845-L849.
- CARCELLER J.E., 1978, "*Estudio de los dispositivos de potencia de silicio impurificados con platino por análisis de la admitancia*", Tesis doctoral, Universidad Central de Barcelona.
- CHANDRESEKHAR S., 1943, "*Stochastic problems in physics and astronomy*", Rev. Mod. Phys. **15**, pp. 1.
- CHANTRE A., VINCENT G. y BOIS D., 1981, "*Deep-level optical spectroscopy in GaAs*", Phys. Rev. B **23**(10), pp. 5335-5359.
- CHRISTMANN P., WETZEL C., MEYER B.K., ASEMOV A. y ENDRÖS A., 1992, "*Spin dependent recombination in Pt-doped silicon p-n junctions*", J. Appl. Phys. **60**(15), pp. 1857-1859.
- DARKEN L.S., 1992, "*Theoretical model for hole capture at acceptors in Germanium*", Phys. Rev. Lett. **69**(19), pp. 2839-2842.
- EVWARAYE A.O. y SUN E., 1976, "*Electrical properties of platinum in silicon as determined by deep-level transient spectroscopy*", J. Appl. Phys. **47**(7), pp. 3172-3176.

-
- FOURCHES N., 1991, "A quantitative treatment for deep level transient spectroscopy under minority-carrier injection", *J. Appl. Phys.* **70**(1), pp. 209-214.
- FORTINI A. y MUNOGLU S., 1986, "High level boundary conditions in the space-charge region of a PN junction", *Solid-State Electron.* **29**(10), pp. 1107-1108.
- GIBB R.M., REES G.J., THOMAS B.W., WILSON L.H., HAMILTON B., WIGHT D.R. y MOTT N.F., 1977, "A two stage model for deep level capture", *Phylos. Mag.* **36**(4), pp. 1021-1034.
- GOGUENHEIM D. y LANNOO M., 1990, "Theoretical and experimental aspects of the thermal dependences of electron capture coefficients", *J. Apply. Phys.* **68**(3), pp. 1059-1069.
- GREEN M.A., 1990, "Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon", *J. Appl. Phys.* **67**(6), pp. 2944-2954.
- GRIMMEISS H.G., JANZEN E. y SKARSTAM B., 1980a, "Electronic properties of selenium-doped silicon", *J. Appl. Phys.* **51**(7), pp. 3740-3745.
- GRIMMEISS H.G., JANZEN E. y SKARSTAM B., 1980b, "Deep sulfur-related centers in silicon", *J. Appl. Phys.* **51**(8), pp. 4212-4217.
- GRIMMEISS H.G. y SKARSTAM B., 1981, "Excited states at deep centers in Si:S and Si:Se", *Phys. Rev. B* **23**(4), pp. 1947-1960.
- HALL R.N., 1952, "Electron-hole recombination in germanium", *Phys. Rev.* **87**(2), p. 387.
- HARDELOV Ch., YANCHEV I., GERMANOVA K., IVANOV Tzv., SAMURKOVA L., KIROV K. y NIGOHOSIAN A., 1992, "Nonexponential deep level transient spectroscopy analysis of moderately doped bulk n-GaAs", *J. Appl. Phys.* **71**(5), pp. 2270-2273.
- HENRY C.H., KUKIMOTO H., MILLER G.L. y MERRITT F.R., 1972, "Photocapacitance studies of the oxygen donor in GaP. II Capture cross sections", *Phys. Rev. B* **7**(6), pp. 2499-2507.
- HENRY C.H. y LANG D.V., 1977, "Nonradiative capture and recombination by multiphonon emission in GaAs and GaP", *Phys. Rev. B* **15**(2), pp. 989-1016.
-

Bibliografía

- HOWGATE D.W., 1969, "*Calculation of nonradiative electron transition rates in a lattice-localized-electron system*", Phys. Rev. **177**(3), pp. 1358-1369.
- HUANG K. y RHYS A., 1950, "*Theory of light absorption and non-radiative transitions in F-centres*", Proc. Roy. Soc. A **204**, pp. 406-423.
- HUANG K., 1981, "*Adiabatic approximation theory and static coupling theory of nonradiative transition*", Scientia Sinica **24**(1), pp. 27-34.
- JACOBONI C. y REGGIANI L., 1983, "*The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*", Rev. Mod. Phys. **55**(3), pp. 645-705.
- JANZEN E., STEDMAN R., GROSSMANN G. y GRIMMEISS H.G., 1984, "*High-resolution studies of sulfur- and selenium-related donor centers in silicon*", Phys. Rev. B **29**(4), pp. 1907-1918.
- JAROS M. y BRAND S., 1976, "*Localized defects in III-V semiconductors*", Phys. Rev. B **14**(10), pp. 4494-4505.
- JAROS M., 1977, "*Wave function and optical cross sections associated with deep centers in semiconductors*", Phys. Rev. B **16**(8), pp. 3694-3706.
- JAROS M., 1982, "*Deep levels in semiconductors*", Ed. Adam Hilger Ltd., Bristol.
- JIMENEZ-TEJADA J.A., LOPEZ-VILLANUEVA J.A., CARTUJO P., VICENTE J. y CARCELLER J.E., 1992a, "*Evolution of electrical magnitudes in gradual p-n junctions with deep levels during the emission majority carriers*", J. Appl. Phys. **72**(10), pp. 4946-4954.
- JIMENEZ-TEJADA J.A., LOPEZ-VILLANUEVA J.A., CARTUJO P. y CARCELLER J.E., 1992b, "*A non-destructive method to determine impurity profiles in non-abrupt p-n junctions with deep levels*", Solid-State Electron. **35**(2), pp. 1729-1736.
- JINDAL C. y PANAYOTATOS P., 1988, "*A concise and complete solution for linearly graded p-n junctions*", Solid-State Electron. **31**(5), pp. 893-897.
- KANE E.O., 1963, "*Thomas-Fermi approach to impure semiconductor band structure*", Phys. Rev. **131**(1), pp. 79-88.
- KHAN W.I., 1987, "*A new theoretical model for a p-n junction realistic diode*", Solid-State Electron. **30**(12), pp. 1221-1225.

-
- KLEVERMAN M., OLAJOS J. y GRIMMEISS H.G., 1987, "*Observation of $P_{1/2}$ resonant states and Fano resonances of the deep gold acceptor in silicon*", Phys. Rev. B 35(8), pp. 4093-4094.
- KOSTER G.F. y SLATER J.C., 1954a, "*Wave functions for impurity levels*", Phys. Rev. 95(5), pp. 1167-1176.
- KOSTER G.F. y SLATER J.C., 1954b, "*Simplified impurity calculation*", Phys. Rev. 96(5), pp. 1208-1223.
- KOVARSKII V.A., 1962, "*Theory of nonradiative transitions in the non-Condon approximation. Low temperatures*", Soviet Physics- Solid State 4(6), pp. 1200-1209.
- KOVARSKII V.A. y SINYAVSKII E.P., 1963, "*Theory of nonradiative transitions in crystals in the non-Condon approximation. High temperatures*", Soviet Physics- Solid State 4(11), pp. 2345-2348.
- KUBO R., 1952, "*Thermal ionization of trapped electrons*", Phys. Rev. 86(6), pp. 929-937.
- KUBO R. y TOYOZAWA Y., 1955, "*Application of the method of generation function to radiative and non-radiative transitions of a trapped electron in a crystal*", Prog. Theo. Phys. 13(2), pp. 160-182.
- KWON Y.K., ISHIKAWA T. y KUWANO H., 1987, "*Properties of platinum-associated deep levels in silicon*", J. Appl. Phys. 61(3), pp. 1055-1058.
- LANDSBERG P.T. y DHARIWAL S.R., 1989, "*Electric field dependence of capture and emission rates by truncated cascade recombination*", Phys. Rev. B 39(1), pp. 91-93.
- LANG D.V., 1974, "*Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors*", J. Appl. Phys. 45(7), pp. 3023-3032.
- LANG D.V., GRIMMEISS H.G., MEIJER E. y JAROS M., 1980, "*Complex nature of gold-related deep levels in silicon*", Phys. Rev. B 22(7), pp. 3917-3934.
- LAX M., 1960, "*Cascade capture of electrons in solids*", Phys. Rev. 119(5), pp. 1502-1523.
- LITTLEJOHN M.A., HAUSER J.R. y GLISSON T.H., 1977, "*Velocity-field characteristics of GaAs with Γ_6^c - L_6^c - X_6^c conduction band ordering*", J. Appl. Phys. 48(11), pp. 4587-4593.
-

Bibliografía

LOPEZ-VILLANUEVA J.A., JIMENEZ-TEJADA J.A., CARTUJO P., MORANTE J.R. y CARCELLER J.E., 1990, "*Analysis of a reverse-biased linearly graded junction with high concentration of deep impurities*", *Solid-State Electron.* **33**(7), pp. 805-811.

LOWTHER J.E., 1980a, "*Structural bonding of deep level defects and the nature of the amphoteric centres in silicon*", *J. Phys. C* **13**, pp. 3665-3679.

LOWTHER J.E., 1980b, "*Carrier capture at amphoteric deep level defects in silicon*", *J. Phys. C* **13**, pp. 3681-3696.

LUCOVSKY G., 1965, "*On the photoionization of deep impurity centers in semiconductors*", *Solid State Com.* **3**, pp. 299-302.

MARTIN G.M., MITONNEAU A. y MIRCEA A., 1977, "*Electron traps in bulk and epitaxial GaAs crystal*", *Electron. Lett.* **13**, pp. 191-192.

MARTINEZ G., HENNEL A.M., SZUSZKIEWICS W., BALKANSKI M. y CLEJAUD B., 1981, "*Charge transfer $Cr^{3+}(3d^3) \rightarrow Cr^{2+}(3d^4)$ in chromium-doped GaAs*", *Phys. Rev. B* **23**(8), pp. 3920-3932.

MAYO S. y LOWNEY J.R., 1987, "*Photoionization cross-section studies of the platinum-donor center in silicon*", *J. Appl. Phys.* **61**(7), pp. 2626-2632.

MAYO S. y LOWNEY J.R., 1988, "*Lattice relaxation in silicon doped with 4d and 5d transition metals*", *J. Appl. Phys.* **64**(9), pp. 4538-4543.

MARKHAM J.J., 1956, "*Electron-nuclear wave functions in multiphonon processes*", *Phys. Rev.* **103**(3), pp. 588-597.

MEIJER E., GRIMMEISS H.G. y LEDEBO L.Å., 1984, "*Dynamics of capture from free-carrier tails in depletion regions and its consequences in junction experiments*", *J. Appl. Phys.* **55**(10), pp. 4266-4274.

MIRCEA A., MITONNEAU A, HALLAIS J. y JAROS M., 1977, "*Study of the main electron trap in $Ga_{1-x}In_xAs$ alloys*", *Phys. Rev. B* **16**(8) pp. 3665-3675.

MORANTE J.R., CARCELLER J.E., BARBOLLA J. y CARTUJO P., 1982a, "*Interpretation of the electron capture by multiphonon emission at native levels in LPE gallium arsenide*", *J. Phys. C* **15**, pp. L175-L179.

-
- MORANTE J.R., CARCELLER J.E., CARTUJO P. y BARBOLLA J.J., 1982b, "*Analysis of thermal capture of the acceptor level of gold in silicon*", Phys. Stat. Sol. (b) **111**, pp. 375-382.
- MORANTE J.R., CARCELLER J.E., CARTUJO P. y BARBOLLA J.J., 1982c, "*Thermal emission rates and capture cross-sections of majority carriers at titanium levels in silicon*", Solid-State Electron. **26**(1), pp. 1-6.
- MORGAN T.N., 1983, "*Capture into deep electronics states in semiconductors*", Phys. Rev. B **28**(12), pp. 7141-7174.
- NORTON P. y LEVINSTEIN H., 1972, "*Recombination cross section for holes at a singly ionized copper impurity in germanium*", Phys. Rev. B **6**(2), pp. 489-497.
- NORTON P., BRAGGINS T. y LEVINSTEIN H., 1973, "*Recombination of electrons at ionized donors in silicon at low temperatures*", Phys. Rev. Lett. **30**(11), pp. 488-489.
- PALS J.A., 1974, "*Properties of Au, Pt, Pd and Rh levels in silicon measured with constant capacitance technique*", Solid-State Electron. **17**, pp. 1139-1145.
- PALMA A., JIMENEZ-TEJADA J.A., GAMIZ F., CARTUJO P. y CARCELLER J.E., 1992, "*Determinación directa de las secciones eficaces de captura térmica en uniones P⁺N con centros profundos*", en Microelectrónica-92: tecnologías, diseño y aplicaciones, Ed. por Burón A.M., Michell J.A., Solana J.M. y Ruiz G.A., Universidad de Cantabria.
- PALMA A., JIMENEZ-TEJADA J.A., BANQUERI J., CARTUJO P. y CARCELLER J.E., 1993, "*Accurate determination of majority thermal-capture cross-section of deep impurities in p-n junctions*", J. Appl. Phys. **74**(4), pp. 2605-2612.
- PALMA A., JIMENEZ-TEJADA J.A., MELCHOR I., LOPEZ-VILLANUEVA J.A. y CARCELLER J.E., 1995, "*A comprehensive Monte Carlo simulation of the non-radiative carrier capture process by impurities in semiconductors*", J. Appl. Phys. **77**(5)
- PANTELIDES S.T., 1978, "*The electronic structure of impurities and other point defects in semiconductors*", Rev. Mod. Phys. **50**(4), pp. 797-858.
- PANTELIDES S.T., 1993, "*Deep centers in semiconductors: A state-of-the-art approach*", Ed. Gordon and Breach Science Publisher S.A., New York.
- PÄSSLER R., 1978, "*Temperature dependences of the nonradiative multiphonon carrier capture and ejection properties of deep traps in semiconductors*", Phys. Stat. Sol. (b) **85**, pp. 203-215.
-

PÄSSLER R., 1980, "Comment on various attempts to interpret the electron capture properties of the B centre in gallium arsenide", J. Phys. C **13**, pp. L901-L906.

PIMBLEY J.M., 1988, "Depletion approximation analysis of a exponentially gradual semiconductor p-n junction", IEEE Trans. elec. dev. **35**(11), pp. 1957-1962.

PONS D., 1984, "Accurate determination of the free carrier capture kinetics of deep traps by space-charge methods", J. Appl. Phys. **55**(10), pp. 3644-3657.

REGGIANI L., VARANI L., MITIN V. y VANVLIET C.M., 1989, "Molecular-Dynamics calculation of the recombination cross section at ionized impurities in semiconductors", Phys. Rev. Lett. **63**(10), pp. 1094-1097.

REGGIANI L., VARANI L. y MITIN V., 1991, "First-principle calculation of the recombination cross-section assisted by acoustic phonons at shallow impurities in semiconductors", Il Nuovo Cimento D **13**(5), pp. 647-662.

RIDLEY B.K., 1978a, "Multiphonon, non-radiative transition rate for electrons in semiconductors and insulators", J. Phys. C **11**, pp. 2323-2341.

RIDLEY B.K., 1978b, "On the multiphonon capture rate in semiconductors", Solid-State Electron. **21**, pp. 1319-1323.

RIDLEY B.K., 1980, "The photoionisation cross section of deep-level impurities in semiconductors", J. Phys. C **13**, pp. 2015-2026.

RIDLEY B.K. y AMATO M.A., 1981, "A model for the interpretation of measurements of photoionisation and capture cross sections associated with deep-levels impurities", J. Phys. C **14**, pp. 1255-1269.

RIDLEY B.K., 1993, "Quantum processes in semiconductors", Ed. Oxford Press.

ROSENCHER E., MOSSER V. y VINCENT G., 1984, "Transient-current study of field-assisted emission from shallow levels in silicon", Phys. Rev. B **29**(3), pp. 1135-1147.

ROSIER L.L. y SAH C.T., 1971, "Thermal emission and capture of electrons at sulfur centers in silicon", Solid-Stat. Electron. **14**, pp. 41-54.

SACKS N.S. y NORDBRYHN, 1979, "Time dependence of depletion region formation in phosphorus-doped silicon MOS devices at cryogenic temperatures", J. Appl. Phys. **50**(11), pp. 6962-6968.

SAH C.T., FORBES L., ROSSIER C.L. y TASCH A.F.Jr., 1970, "*Thermal and optical emission and capture rates and cross sections of electrons and holes at imperfection centers in semiconductors from photo and dark junction current and capacitance experiments*", *Solid-State Electron.* **13**, pp. 759-788.

SEEGER K., 1991, "*Semiconductor Physics: An introduction*", 5th Ed. Springer-Verlag, Berlin.

SHOCKLEY W. y READ W.T.Jr., 1952, "*Statistics of the recombinations of holes and electrons*", *Phys. Rev.* **87**(5), pp. 835-842.

SILARD A.P. y DUTA M.J., 1991, "*Revised theory of linearly-graded silicon junctions: an analytical approach*", *Solid-State Electron.* **34**(2), pp. 167-172.

STÖFFLER W. y WEBER J., 1986, "*Structure of Pd, Pt and Au impurities in silicon. The energy levels under uniaxial stress and hydrostatic pressure*", "*Defects in semiconductors*", Ed. H.J. von Bardeleben, *Material Science Forum*, vol 10-12, pp. 705-710.

STONEHAM A.M., 1975, "*Theory of defects in solids*", Ed. Oxford University Press, New York.

STONEHAM A.M., 1979, "*Phonon coupling and photoionisation cross-section in semiconductors*", *J. Phys. C* **12**, pp. 891-897.

STONEHAM A.M., 1981, "*Non-radiative transitions in semiconductors*", *Rep. Prog. Phys.* **44**, pp. 1251-1295.

SWIATLA D. y BARTCZAK W.M., 1994, "*Calculation of the Huang-Rhys factor for electron capture by neutral impurity*", *Phys. Rev. B* **43**(8), pp. 6776-6779.

THURBER W.R. y LOWNEY J.R., 1987, "*Methods for accurate determination of emission rate and trap concentration with application to platinum-doped silicon*", *J. Appl. Phys.* **62**(2), pp. 534-540.

VAN OOSTEN A.B., SON N.T., VLASENKO L.S. y AMMERLAAN C.A.J., 1989, "*The electronic structure of platinum, palladium and nickel in silicon*", *Materials Science Forum* Vol. 38-41, pp. 355-360.

VARANI L., REGGIANI L., MITIN V., VAN VLIET C.M. y KUHN T., 1993, "*Nonexponential generation-recombination dynamics in doped semiconductors as a possible source of high-frequency 1/f noise*", *Phys. Rev. B* **48**(7), pp. 4405-4411.

WANG C.W. y WU C.H., 1992, "*A novel technique of analyzing multiexponential transient for DLTS spectra*", Solid-State Electron. **35**(12), pp. 1771-1777.

WEISS S. y KASSING R., 1988, "*Deep level transient fourier spectroscopy (DLTFS)- A technique for the analysis of deep level properties*", Solid-State Electron. **31**(12), pp. 1733-1742.

WOODBURY H.H. y LUDWIG G.W., 1962, "*Spin resonance of Pd and Pt in silicon*", Phys. Rev. **126**(2), pp. 466-470.

YOSHII A., TOMIZAWA M. y YOKOYAMA K., 1987, "*Investigation of numerical algorithms in semiconductor device simulation*", Solid-State Electron. **30**(8), pp. 813-820.

ZHENG J.H., TAN H.S. y NG S.C., 1994, "*Theory of non-radiative capture of carriers by multiphonon processes for deep centers in semiconductors*", J. Phys.:Condens. Matter **6**, pp. 1695-1706.

ZYLBERSZTEJN A., 1978, "*Trap depth and electron capture cross section determination by trap refilling experiments in Schottky diodes*", Appl. Phys. Lett. **33**(2), pp. 200-202.