

UNIVERSIDAD DE GRANADA  
FACULTAD DE CIENCIAS

Departamento de Electrónica  
y Tecnología de Computadores

INFLUENCIA DE LA CONCENTRACION  
DE CENTROS PROFUNDOS EN LAS PROPIEDADES  
ELECTRICAS DE UNIONES P-N NO ABRUPTAS.  
APLICACION AL SISTEMA Si:Pt.

TESIS DOCTORAL

Juan Antonio Jiménez Tejada

Granada, 1991



Este trabajo se ha realizado en el Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada, bajo la dirección de D. Juan E. Carceller Beltrán, y se enmarca dentro de una de las líneas de investigación del Grupo de Caracterización de Dispositivos Electrónicos de este Departamento.

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que han prestado su colaboración.

Al director del departamento, D. Pedro Cartujo Estébanez, por su alentador apoyo y por permitirme disponer de todos los medios necesarios para la realización del trabajo.

A mi director, D. Juan E. Carceller Beltrán, por servirme de eficiente guía durante el tiempo que he trabajado con él y por sus valiosos e inestimables consejos.

A los compañeros de la Universidad de Valladolid por permitirnos disponer de unas muestras sin las cuales no hubiera sido posible este trabajo.

A mis compañeros D. Juan A. López Villanueva, D. Jesús Banqueri Ozáez y D. Ignacio Melchor Ferrer por su ayuda no sólo material sino humana. Al resto de los compañeros del departamento por el interés mostrado.

En general, a todos mis familiares y amigos que les he hecho sufrir conmigo algunos momentos de tensión.

Gracias.



A Begoña.



Dr. D. Juan Enrique CARCELLER BELTRÁN, Catedrático del  
Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la  
Universidad de Granada

CERTIFICA

Que el trabajo de investigación que se refleja en la memoria  
"Influencia de la concentración de centros profundos en las  
propiedades eléctricas de uniones P-N no abruptas. Aplicación al  
sistema Si:Pt", presentada por D. Juan Antonio JIMÉNEZ TEJADA  
para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas ha sido realizado  
en su totalidad bajo mi dirección en este departamento.

Granada, 23 de septiembre de 1991.





Memoria presentada por D.  
Juan Antonio Jiménez Tejada  
para optar al grado de Doctor  
en Ciencias Físicas.

Granada, septiembre de 1991



# ÍNDICE

|  |    |
|--|----|
| 0. INTRODUCCIÓN .....  | 1  |
| 1. MODELO NUMÉRICO DE UNA UNIÓN PN   |    |
| 1.1 Introducción .....   | 7  |
| 1.2 Aproximación de deplexión .....  | 8  |
| 1.2.1 Distribución de carga en una unión gradual<br>con centros profundos. Estado Estacionario ..... | 12 |
| 1.2.2 Variación de la zona de carga espacial<br>Estado transitorio .....                             | 15 |
| 1.3 Descripción de una unión por metodos numéricos .....   | 18 |
| 1.3.1 Ecuación unidimensional de Poisson .....   | 19 |
| 1.3.1.1 Régimen estacionario .....   | 19 |
| 1.3.1.2 Régimen transitorio .....  | 21 |
| 1.3.2 Capacidad en alta frecuencia .....   | 23 |
| 1.3.3 Método para la obtención de la capacidad<br>en alta frecuencia .....                           | 25 |
| 1.4 Comportamiento eléctrico de una unión gradual<br>con centros profundos .....                     | 29 |
| 1.4.1 Distribución de magnitudes en muestras<br>menos dopadas .....                                  | 30 |
| 1.4.2 Distribución de magnitudes en muestras<br>más dopadas .....                                    | 36 |
| 1.4.3 Evolución de la distribución de carga con la<br>concentración de centros profundos .....       | 42 |
| 1.4.4 Evolución de las magnitudes con la temperatura   |    |

|  |     |
|--|-----|
| para muestras más dopadas . . . . .  | 45  |
| 1.4.5 Comportamiento transitorio de la densidad de<br>carga neta . . . . .   | 52  |
| <br>   |     |
| 2. MONTAJE EXPERIMENTAL. CARACTERIZACIÓN PRIMARIA DE LAS<br>MUESTRAS   |     |
| 2.1 Introducción . . . . .   | 63  |
| 2.2 Proceso tecnológico . . . . .  | 64  |
| 2.2.1 Distribución de impurezas resultante . . . . .   | 64  |
| 2.3 Caracterización en corriente. I-V . . . . .  | 69  |
| 2.4 Caracterización mediante técnicas capacitivas . . . . .  | 73  |
| 2.4.1 Características C(V). Determinación de perfiles<br>de concentración . . . . .                                    | 73  |
| 2.4.2 Aplicación de las técnicas capacitivas para la<br>obtención de perfiles a una curva C-V teórica. . . . .         | 74  |
| 2.4.3 Detección de centros profundos en las muestras<br>menos dopadas con platino . . . . .                            | 82  |
| 2.5 Determinación de parámetros de los niveles profundos.<br>Transitorios isotérmicos de capacidad constante . . . . . | 87  |
| 2.5.1 Análisis de ITS . . . . .  | 90  |
| 2.5.2 Diagrama de Arrhenius . . . . .  | 96  |
| <br>   |     |
| 3. MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE PERFILES DE IMPUREZAS.  |     |
| 3.1 Introducción . . . . .   | 101 |
| 3.2 Procedimiento experimental . . . . .   | 104 |
| 3.2.1 Parámetros iniciales . . . . .   | 106 |
| 3.2.2 Factores de ocupación de los centros . . . . .   | 107 |

|   |     |
|---|-----|
| 3.3 Determinación del perfil de impurezas básicas.  |     |
| Curvas capacidad-tensión a temperatura ambiente . . . . .   | 113 |
| 3.4 Determinación de perfiles de concentración de impurezas profundas. Curvas C-V a bajas temperaturas . . . . .      | 127 |
| 3.4.1 Comparación de resultados experimentales y teóricos . . . . .   | 129 |
| 3.5 Modelo de difusión de impurezas. Justificación de la constancia de la concentración de centros profundos. . . . . | 138 |
| 3.6 Justificación de la igualdad de concentración de los niveles. Revisión de trabajos previos . . . . .              | 140 |
| <br>  |     |
| 4. DLTS DE CAPACIDAD APLICADA A UNIONES GRADUALES DOPADAS CON PLATINO   |     |
| 4.1 Introducción . . . . .  | 147 |
| 4.2 Montaje . . . . .   | 148 |
| 4.3 Espectros de DLTS . . . . .   | 151 |
| 4.3.1 Muestras con baja concentración de platino. . . . .   | 151 |
| 4.3.2 Muestras con alta concentración de platino. . . . .   | 170 |
| 4.4 Transitorios isotérmicos de capacidad . . . . .   | 172 |
| 4.4.1 Evolución de los transitorios de capacidad con la concentración de centros profundos . . . . .                  | 173 |
| 4.4.2 Evolución de los transitorios de capacidad en función de la temperatura. Nivel $E_{T2}$ . . . . .               | 177 |
| 4.5 Transitorios de tensión a capacidad constante para muestras fuertemente dopadas con platino . . . . .             | 181 |
| 4.6 Trabajos previos de DLTS realizados sobre el sistema Si:Pt . . . . .  | 184 |

|              |     |
|--------------|-----|
| CONCLUSIONES | 189 |
| APÉNDICE 1   | 193 |
| APÉNDICE 2   | 207 |
| APÉNDICE 3   | 213 |
| BIBLIOGRAFIA | 221 |

## 0. INTRODUCCIÓN

Los semiconductores son la piedra angular de la industria electrónica ya que sus propiedades pueden ser modificadas mediante el control de impurezas y otras imperfecciones. Las impurezas básicas introducen una perturbación pequeña en el cristal (de hecho se manifiestan creando estados muy próximos a las bandas) contribuyendo con portadores de carga adicionales, electrones o huecos. Su misión principal es controlar el tipo y el valor de la conductividad.

Otras impurezas y una serie de defectos de la red constituyen una perturbación local más importante, dando lugar a niveles energéticos situados frecuentemente más hacia el interior de la banda prohibida. Este tipo de impurezas se denominan centros profundos. A diferencia con las impurezas poco profundas, los centros profundos actúan principalmente como trampas de portadores o como centros recombinantes. Los centros profundos controlan la vida media de los portadores y con esa función son indeseables en aquellos dispositivos donde los portadores deban tener elevados tiempos de vida media, como es el caso de las células solares; o en el caso contrario son muy útiles en dispositivos de conmutación rápida. También, cuando la energía desprendida por recombinación o captura de portadores se hace en forma de luz, se pueden introducir en los dispositivos optoelectrónicos.

La investigación sistemática de los centros profundos en semiconductores comenzó hace unos 30 años. Desde ese momento los cambios principales se han producido en las técnicas utilizadas y en las cuestiones hacia las que se han orientado. Inicialmente se analizaron materiales semiconductores aislados a los que se les añadían las impurezas. Sin embargo, el salto principal en el campo de la experimentación fue el desarrollo de técnicas aplicadas a uniones tanto entre dos semiconductores como entre un semiconductor y un metal. Mediante la aplicación de tensiones apropiadas se pueden extraer e introducir portadores móviles en la unión,

modificar la posición del nivel de Fermi en el interior de la banda prohibida y variar la población de los centros profundos sacando al sistema fuera de su estado estacionario. El reflejo de este cambio en el estado de carga de los centros se observa a través de medidas de capacidad y corriente.

Las técnicas que recojen estas medidas, basadas en la unión, se extendieron con Sah y sus colaboradores en los años 70 [1]. Desde entonces se han introducido variantes como la muy conocida espectroscopía de transitorios de niveles profundos (DLTS) de Lang [2], en la que, al barrer la temperatura, los niveles profundos se muestran como picos en un espectro continuo. Las técnicas de la unión en general y la DLTS en particular revolucionaron el proceso de caracterización eléctrica de los centros profundos [3,4].

La ventaja principal de las técnicas de unión es la posibilidad de separar los centros profundos de las impurezas básicas y centrarnos en señales cuyo origen sean estos centros. Además estas medidas son específicas del centro con el que se esté tratando, es decir, que se puede determinar la concentración, coeficientes de captura y niveles de energía incluso cuando haya varios presentes en la misma muestra.

Sin embargo cuando existe una alta concentración de centros profundos la interpretación de estas medidas resulta difícil. En ausencia de efectos como la dependencia del coeficiente de emisión con el campo eléctrico aplicado, o el de una relajación multiexponencial debida a varios niveles de impurezas con parecidos coeficientes de emisión y si la concentración de impurezas profundas es pequeña comparada con las poco profundas se ha mostrado [5] que un transitorio de capacidad debe ser exponencial. Sin embargo, cuando la concentración de centros profundos es alta, este transitorio no es exponencial y el considerarlo como tal proporcionaría valores erróneos para los coeficientes de emisión. La técnica de los transitorios de tensión a capacidad constante eliminó dicho error [6] proporcionando relajaciones exponenciales. El hecho de que la técnica de los transitorios de capacidad manteniendo constante la



tensión sea más fácil de elaborar y que además siga siendo más popular entre muchos investigadores ha hecho que algunos autores sigan tratando sus deficiencias y así se encuentran en la literatura correcciones para perfiles constantes de los dos tipos de impurezas [7]. En trabajos posteriores [8] se ha profundizado más tratando perfiles cualesquiera y proporcionando índices de no-exponencialidad dependiendo de las relaciones entre concentraciones de impurezas básicas y profundas, pero siempre se han considerado los centros profundos en menor concentración, situación que no deja de ser un caso particular.

Aunque se haya mencionado antes que las impurezas poco profundas introducen una perturbación pequeña en el cristal eso no quiere decir que jueguen un papel poco importante en una unión. De forma muy generalizada se han venido utilizando también técnicas capacitivas aplicadas a la unión para medir los perfiles de concentración de este tipo de impurezas, sin duda por la importancia que estos perfiles tienen a la hora de aplicar las técnicas anteriores para la caracterización de los niveles profundos. Entre ellas y en régimen estático, en cuanto a la polarización, la de la capacidad en alta frecuencia [9] es adecuada para bajas concentraciones de centros profundos. La utilidad de esta técnica se ha tratado en muchos trabajos, sin embargo, las conclusiones obtenidas a partir de la comparación de resultados numéricos y experimentales [10] han dejado abierto un interrogante sobre la aplicabilidad de una aproximación frecuentemente utilizada, la de depleción, introduciendo correcciones para la determinación del perfil de impurezas.

En general todas estas técnicas de unión tienen una limitación, pues requieren un tratamiento y unas condiciones de validez adecuados. Todas ellas se sustentan gracias a unas expresiones analíticas que describen el comportamiento del dispositivo, pero estas expresiones son fruto de algún tipo de simplificación. Un tratamiento aproximado ampliamente conocido y aceptado es, como se acaba de mencionar, el de la aproximación de depleción o vaciamiento [11-15]. Su utilización

simplifica las expresiones matemáticas anulando las concentraciones de portadores en la región de depleción, o igualándolas a la concentración de impurezas en la zona neutra del semiconductor. Con estas consideraciones el problema se reduce a una situación lineal. Este procedimiento es adecuado especialmente a diodos PN o estructuras MOS cuyos perfiles de impurezas cumplan unas determinadas condiciones. En el caso de una unión PN las concentraciones en los dos lados de la unión deben ser uniformes o con pequeños gradientes. La propia difusión de átomos de impurezas hace que esta suposición sea particularmente inapropiada. En algunos trabajos se intenta formular la aproximación de depleción para uniones graduales lineales, reconociéndose en ciertos de ellos [15] la inconsistencia de ese tratamiento. Es común encontrar también modificaciones para la anchura de la zona de carga espacial bajo la presencia de perfiles de impurezas no uniformes, siendo incorrecta esta práctica por la propia dificultad de tratar con potenciales no uniformes fuera de esta región.

Sin embargo, el comportamiento eléctrico de los dispositivos semiconductores, con perfiles de impurezas arbitrarios, en general es no lineal por lo que también la formulación matemática de la física del dispositivo implicará la existencia de ecuaciones diferenciales no lineales. Esto conduce a que, incluso para el dispositivo más simple, se deben introducir métodos numéricos para su tratamiento. La simulación mediante técnicas numéricas de los dispositivos semiconductores es un tema de considerable interés [16-18]. Esto es debido a que el modelado está en creciente auge en el diseño de circuitos VLSI así como en la interpretación de resultados experimentales para la caracterización de materiales y dispositivos.

Para simular el comportamiento de dispositivos semiconductores se requiere la resolución simultánea de tres ecuaciones diferenciales, la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico, y las dos ecuaciones de continuidad para las corrientes de electrones y huecos. Como resultado de acoplar las tres ecuaciones, las densidades de electrones y huecos son funciones no lineales del potencial eléctrico lo

que conduce a una ecuación de Poisson no lineal.

Tan solo en algunos casos particulares estas ecuaciones no lineales se pueden resolver por separado: en situaciones de equilibrio térmico en los dispositivos semiconductores; también en los problemas que implican uniones polarizadas en inverso, que se pueden reducir a tratar la ecuación de Poisson considerando que los cuasiniveles de Fermi para mayoritarios son constantes y los portadores minoritarios despreciables. La resolución de la ecuación de Poisson no lineal es por tanto de gran importancia en el modelado y caracterización de dispositivos semiconductores.

La resolución correcta de la ecuación de Poisson implica conocer de antemano una serie de parámetros como la distribución de impurezas básicas y la de centros en la unión así como el nivel de ocupación de estos centros. Ante esta situación parece que nos encontramos en un círculo vicioso: por un lado se duda de la validez de las técnicas de unión clásicas para la obtención de estos parámetros y por otro lado los necesitamos a la hora de describir numéricamente el sistema. Hasta la fecha y por lo que se refiere a los perfiles de impurezas básicas se venía trabajando con unos casos particulares de uniones: a) estructuras P<sup>+</sup>N o N<sup>+</sup>P, en donde se considera toda la zona de carga espacial distribuida en el lado menos dopado; b) uniones lineales ligadas a uniones profundas formadas por difusión, aunque estrictamente la linealidad solo sería cierta en regiones próximas a la unión metalúrgica donde nos quedamos con el primer término de un desarrollo en serie de Taylor de la función de difusión. Sin embargo, por regla general tendremos situaciones intermedias entre estos dos tipos de perfiles de impurezas básicas. Por lo que se refiere a los perfiles de impurezas profundas ya se han mencionado trabajos en los que se estudia el grado de compensación de impurezas básicas por profundas pero no hemos encontrado en la literatura situaciones en las que ese grado de compensación varíe dentro de una misma muestra, es decir, que las concentraciones de centros profundos sean mayores, menores o iguales a la de los dopantes básicos dependiendo del punto de la unión que estemos considerando.

A lo largo de todo este trabajo trataremos con una situación general, que contendrá muchos de estos casos particulares que se han estudiado, pero además, otros que nos mostrarán resultados experimentales no explicables por teorías que están sustentadas por determinadas aproximaciones. La simulación de una unión PN con alta concentración de centros profundos mediante la solución numérica de la ecuación de Poisson nos permitirá interpretar en régimen estacionario, las medidas de capacidad en alta frecuencia, y en régimen transitorio, las relajaciones isotérmicas de capacidad a tensión constante e incluso anomalías en los de tensión a capacidad constante. La confirmación experimental de las predicciones teóricas se va a realizar a partir del análisis de estructuras  $P^+NN^+$  de silicio impurificadas con platino. En concreto, el platino en el silicio es una impureza que se ha venido estudiando de manera muy extensiva; los trabajos sobre centros profundos en el silicio siguen siendo de gran interés por cuanto muchas de sus propiedades físicas no se han descrito hasta ahora de manera general; por otra parte, ésta impureza es apropiada para controlar la vida media en el silicio y por tanto podrán resultar de gran importancia en muchos dispositivos semiconductores. Es por esto que, basándonos en algunas de sus propiedades ya conocidas, tratemos de profundizar más en temas como la caracterización eléctrica completa de muestras altamente compensadas, en uniones reales.

Los resultados aquí expuestos tienen un carácter más general que la mera aplicación de los posibles resultados a una impureza concreta, el platino como se ha mencionado anteriormente. Por ello, podremos extrapolar las propiedades, resultados o técnicas que se utilicen a cualquier tipo de semiconductor impurificado con elementos extraños donde la relación entre concentración de impurezas básicas y profundas sea arbitraria a lo largo de la unión.

# 1. MODELO NUMÉRICO DE UNA UNIÓN PN

## 1.1 INTRODUCCIÓN

El comportamiento real de un semiconductor viene descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales prácticamente intratables analíticamente. Sin embargo este problema se puede reducir a una ecuación diferencial lineal ordinaria si se impone el conjunto de simplificaciones correspondientes a la aproximación de depleción. Hasta ahora esta aproximación ha sido una herramienta indispensable en el estudio cuantitativo de dispositivos semiconductores unidimensionales.

La mayoría de las aplicaciones de esta aproximación han supuesto un perfil de impurezas constante a trozos, de manera que resulta uniforme tanto en la región P como en la región N de una unión. La desviación de este modelo respecto de la realidad ha llevado a sustituirlo por un perfil variable de forma lineal [19-21], y aunque los frutos de algunos de estos trabajos han sido moderadamente satisfactorios, de hecho la aproximación de depleción no se puede aplicar de manera consistente en este modelo lineal necesitando correcciones [21,22]. Otra forma de evitar la aproximación de depleción es el uso de técnicas numéricas [19,20,23].

Un perfil exponencial [24] es más apropiado como aproximación a una situación práctica por dos razones principales: Primero porque da una visión más precisa de los perfiles reales más usuales. Segundo porque una característica de la función exponencial (la derivada de su logaritmo es constante) simplifica en gran medida los resultados del modelo. Se irán analizando los distintos modelos utilizados para describir el comportamiento de una unión desde la unión abrupta a la unión exponencial, todos ellos basados en la aproximación de vaciamiento. Se valorarán sus regiones de validez y por último se concluirá con la necesidad de evitar la aproximación de depleción y acudir a técnicas numéricas para tratar los casos más generales.

## 1.2 APROXIMACIÓN DE DEPLEXIÓN

Normalmente no se encuentra en la literatura una descripción detallada de la aproximación de deplexión ya que se supone perfectamente conocida. Su exposición nos ayudará a comprender el por qué de utilizar a lo largo de nuestro trabajo técnicas numéricas en lugar de esta aproximación, aunque sí la emplearemos para analizar las muestras de manera cualitativa. La aplicación de la aproximación de deplexión junto con unas condiciones de contorno consistentes requiere hacer las siguientes simplificaciones:

1) Existencia de regiones a ambos lados de la unión donde se anulan las concentraciones de electrones y huecos.

2) Fuera de estas regiones, el potencial eléctrico y las concentraciones de portadores son las que existirían en ausencia de unión.

3) El potencial y su derivada son continuos en los límites de las regiones de deplexión mientras que no lo son las concentraciones de portadores.

La primera de ellas es realmente la aproximación de vaciamiento; las dos restantes son consecuencia de la consistencia de las condiciones de contorno. Para distribuciones de impurezas uniformes a ambos lados de la unión, la segunda suposición implica densidad de carga nula y potencial uniforme fuera de la región de deplexión. La anulación de la carga únicamente no implica potencial uniforme pues un potencial lineal también es solución de la laplaciana nula.

El segundo punto es especialmente importante para nuestro trabajo en el que nos encontramos con perfiles de impurezas no uniformes. En otros trabajos de investigación se ha considerado una dependencia lineal para la concentración de impurezas con la distancia en regiones próximas a la unión. La elección de este nuevo modelo ha venido motivada por acercarse un paso más hacia los perfiles de impurezas reales y por su sencillez de descripción. La justificación de que las uniones profundas

formadas por difusión tengan una región lineal cerca de la unión es cierta sin más que desarrollar el perfil en serie de Taylor y quedarnos con el primer término del desarrollo. Sin embargo no es probable que a medida que varíe la polarización aplicada a la unión, la zona de carga espacial quede confinada a la zona lineal. Generalmente estos métodos suponen que una de las regiones de la unión queda delimitada por una concentración uniforme de impurezas, la que existía en el material semiconductor original sobre el que se pretenden fabricar los distintos dispositivos.

Las aplicaciones de la aproximación de depleción que se han realizado sobre una unión lineal gradual no incorporan la segunda simplificación (por consistencia con las condiciones de contorno). En ausencia de una unión PN, el potencial en el semiconductor con perfil lineal de impurezas no es constante. La existencia de gradientes de concentración de impurezas determina la existencia de difusión de portadores que dan lugar a gradientes de potencial y estos se oponen a su vez a la difusión de carga móvil. Este potencial no uniforme no se incorpora en el tratamiento de este tipo de uniones. Además, la no uniformidad del potencial implica que la continuidad de su gradiente en el tercer punto introduzca inhomogeneidades en las condiciones de contorno para la solución del potencial en la región de depleción. Ya en el año 1960 Morgan y Smits [15] reconocieron estas diferencias haciendo notar que su inclusión de manera apropiada sería algebraicamente confusa y propusieron un tratamiento numérico.

En la práctica, la mayoría de las uniones difundidas descritas por funciones error, gaussianas o similares se encuentran en un nivel intermedio entre las altamente asimétricas y las lineales. La función exponencial nos proporciona una aproximación más realista. Es común tener una unión delimitada por un lado por una región con concentración de impurezas uniforme. La difusión directa o combinada con la implantación iónica determinan el perfil de la otra región.

Como demostración ilustrativa, consideremos la función Gaussiana

$\exp(-x^2)$ . La solución de la ecuación diferencial lineal de difusión, con una elección particular de condiciones de contorno [25], así como la aproximación analítica de los perfiles obtenidos por implantación iónica (antes del recocido o "annealing") conducen a la función Gaussiana. También la función error complementaria, solución de la ecuación de difusión se comporta asintóticamente como gaussiana para grandes valores de  $x$ . El desarrollo de la función gaussiana en serie de Taylor alrededor de un punto  $x_0$  es:

$$e^{-x^2} \approx e^{-x_0^2} [1 - 2x_0(x-x_0) + (2x_0^2 - 1)(x-x_0)^2] \quad (1)$$

Nos quedamos con el segundo término de la serie puesto que estamos desarrollando para valores elevados de  $x$ , próximos a la unión y lejos del máximo de concentración de la función error. El modelo de unión lineal se queda tan solo con el primer término del desarrollo como se ha mencionado anteriormente. Si consideramos ahora la función exponencial  $\exp(-x_0(2x-x_0))$  y su desarrollo en serie:

$$e^{-x_0(2x-x_0)} \approx e^{-x_0^2} [1 - 2x_0(x-x_0) + 2x_0^2(x-x_0)^2] \quad (2)$$

para valores de  $2x_0^2$  mucho mayores que la unidad la función exponencial se aproxima a la función gaussiana hasta un segundo orden. La función exponencial también tiene la propiedad de decrecer hasta cero a medida que aumenta  $x$ , conducta que no presenta la función lineal.

También a favor del modelo de la unión exponencial hay que mencionar la simplicidad de la expresión del potencial,  $\Phi(x)$ , en equilibrio térmico. Suponiendo la densidad de corriente de mayoritarios nula y que su concentración viene dada por la concentración de impurezas, el potencial se puede escribir [13]:



$$\Phi(x) = \frac{KT}{q} \ln[N(x)] \quad (3)$$

por lo que en caso de presentar el perfil  $N(x)$  un carácter exponencial, el potencial sería constante y no nulo.

Este hecho es aprovechado [26] para estudiar de forma analítica este tipo de unión mediante el uso de la aproximación de vaciamiento. Se encuentra una expresión para el potencial eléctrico y unos valores para la coordenada  $x$  que delimitan la zona de carga espacial. Lo que no queda claro es que una medida de la capacidad haga recuperar el ancho teórico de esta zona de transición. Baccarani [10] en un trabajo anterior utiliza la aproximación de depleción para un perfil arbitrario en estructuras Schottky y MOS; también define unos extremos para la zona de carga espacial pero ello le impone la necesidad de establecer una corrección en el potencial; con esta corrección obtiene resultados analíticos coincidentes con resultados de simulación.

La disponibilidad de sistemas de tratamiento numérico de la información ha originado un gran crecimiento en la velocidad de procesamiento de datos, y hoy puede resultar más conveniente ya que se dispone de ello, el analizar de forma exacta un sistema en vez de acudir a métodos aproximados, que siempre tienen alguna limitación.

La aproximación de vaciamiento va ser muy útil en nuestro trabajo para dar una visión cualitativa de nuestras muestras, para su presentación y para la definición y explicación de procesos que en ellas tienen lugar. Sobre todo cuando además de la existencia de impurezas básicas hay centros profundos, con el agravante añadido de presentar concentraciones del mismo orden.

A continuación vamos a presentar de forma gráfica a una unión arbitraria analizando como se distribuye la carga en la unión en estado estacionario y ante cambios en los agentes externos.

### 1.2.1 DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN UNA UNIÓN GRADUAL CON CENTROS PROFUNDOS. ESTADO ESTACIONARIO.

Consideremos una unión gradual con centros profundos en concentración  $N_T$  que crean un nivel energético situado en la mitad superior de la banda prohibida (figura 1.a, 1.d). Supongamos que la unión está polarizada en inverso a una tensión  $V$ . Las impurezas están ocupadas de electrones desde el lado N de la unión hasta el punto  $x_T$  donde coinciden el nivel de Fermi y el nivel creado por las impurezas. En el lado P los niveles están vacíos.

La densidad de carga en la unión es diferente dependiendo del carácter eléctrico del nivel. En general en cualquier punto del dispositivo la densidad de carga viene dada por:

$$\rho(x) = q(N_D(x) - N_A(x) + N_{TD}^+(x) - n + p) \quad (4)$$

si se trata de un nivel donador y por:

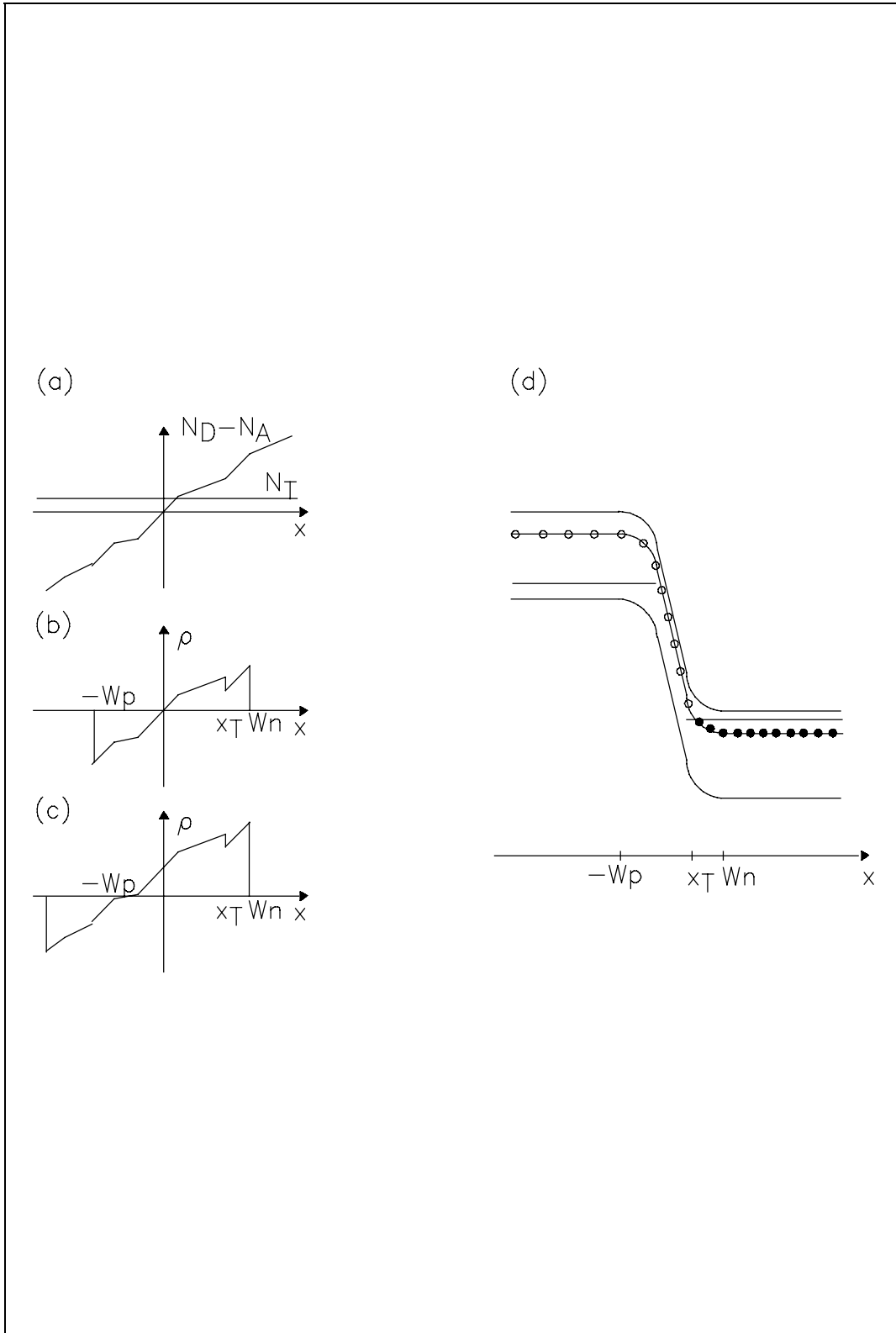
$$\rho(x) = q(N_D(x) - N_A(x) - N_{TA}^-(x) - n + p) \quad (5)$$

si es aceptador.

El estado de carga de estos niveles está representado por el factor de ocupación que en general se expresa como:

$$f_T(x) = \frac{n_T(x)}{N_T} = \frac{e_p + c_n n(x)}{e_p + e_n + n(x)c_n + p(x)c_p} \quad (6)$$

Admitiendo la aproximación de vaciamiento en el interior de la zona de carga espacial, el factor de ocupación se reduce a:



**Figura 1.** 1.a, Perfil de impurezas. 1.b, Distribución de carga para el caso de centros profundos aceptadores. 1.c, Distribución de carga para el caso de centros profundos donadores. 1.d, diagrama de bandas.

$$f_T(x) = \frac{e_p}{e_n + e_p} \quad (7)$$

que, para los valores habituales de los coeficientes de captura térmica, en el caso particular de estar el nivel en la mitad superior de la banda prohibida va a anularse; de encontrarse en la parte inferior la mayor probabilidad de emisión sería debida a los huecos y por lo tanto sería próximo a uno.

Si se desprecia la concentración de huecos en la zona neutra N el factor de ocupación tiende a la unidad y si se desprecia la de los electrones en la zona neutra P tiende a cero. Teniendo en cuenta que:

$$e_n = g_n c_n N_c e^{\frac{E_T - E_c}{KT}} \quad (8)$$

$$e_p = g_p c_p N_v e^{\frac{E_v - E_T}{KT}} \quad (9)$$

donde  $E_c$  es el mínimo de la banda de conducción,  $E_v$  el máximo de la de valencia,  $N_c$  y  $N_v$  la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y valencia respectivamente,  $E_T$  el nivel creado por el centro profundo y  $g_{n,p}$  la degeneración del centro; el factor de ocupación queda en la transición de la zona de carga espacial con la zona neutra N queda de la forma:

$$f_T = \frac{1}{1 + g_n e^{\frac{E_T - E_{Fn}}{KT}}} \quad (10)$$

expresión que presenta un punto de inflexión para  $E_{Fn} - E_T = KT \cdot \ln(g_n)$ . En el caso de que  $g_n = 1$  ese punto se localiza en la intersección del nivel de Fermi con el nivel creado por las impurezas.

Con esta forma para el factor de ocupación y suponiendo neutralidad fuera de la zona de transición una primera visión de como se distribuye la carga sería:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & x < -W_p \\ N_D - N_A & -W_p \leq x \leq x_T \\ N_D - N_A - N_{TA}^- & x_T < x < W_n \\ 0 & w_n \leq x \end{cases} \quad (11)$$

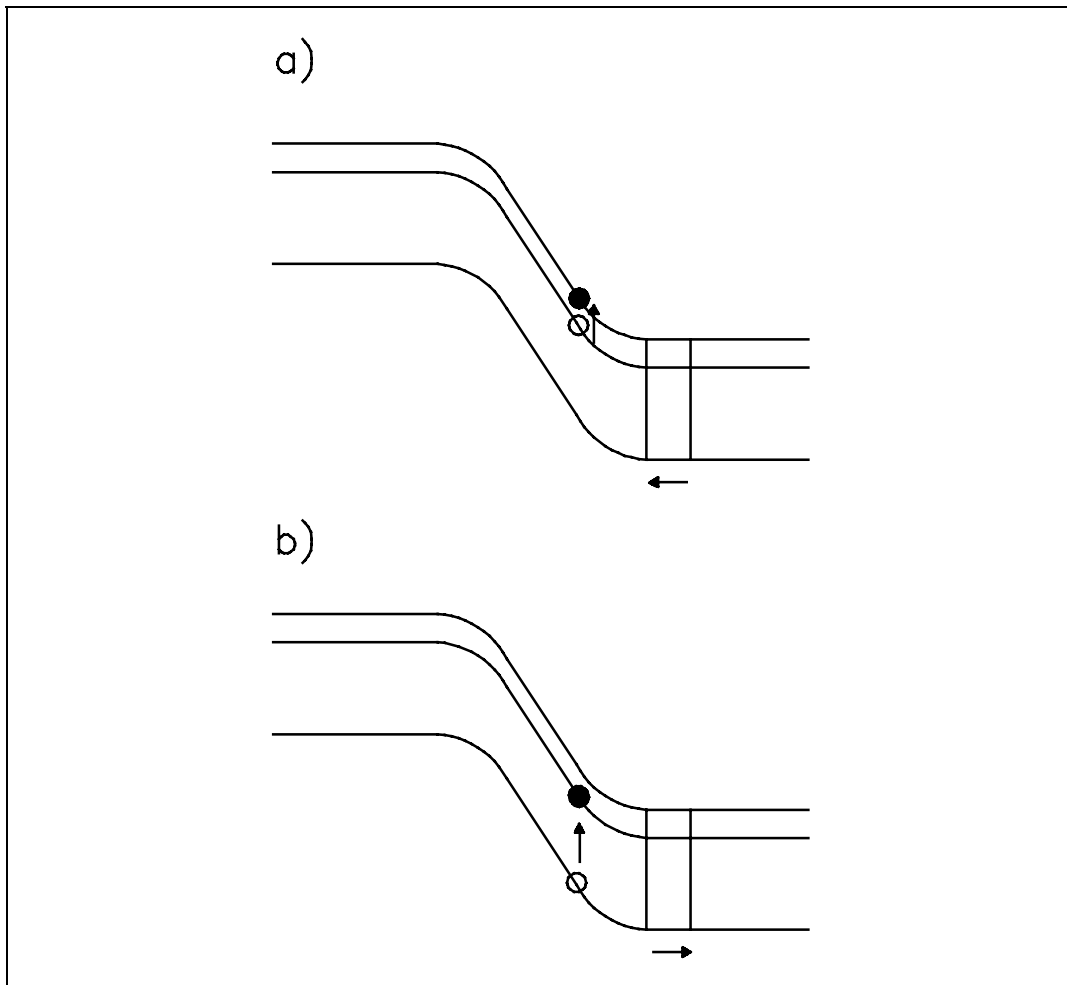
$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & x < -W_p \\ N_D - N_A + N_{TD}^+ & -W_p \leq x \leq x_T \\ N_D - N_A & x_T < x < W_n \\ 0 & w_n \leq x \end{cases} \quad (12)$$

para centros aceptadores y donadores respectivamente (distribuciones que se representan en las figuras 1b y 1c).

Cualquier intento de obtener una expresión analítica para la anchura de la zona de carga espacial conduciría a tener que aplicar la aproximación de depleción, aproximación que tiene demasiadas limitaciones incluso para los perfiles más simples. Es por ello que para distribuciones de concentración arbitrarias utilicemos métodos numéricos.

### 1.2.2 VARIACIÓN DE LA ZONA DE CARGA ESPACIAL. ESTADO TRANSITORIO.

Si se polariza más en inverso a la unión con una tensión  $V'$ , tal que  $|V'| > |V|$ , aumenta la zona de carga espacial. En el instante posterior a la aplicación



**Figura 2.** 2a) Emisión de mayoritarios. 2b) Emisión de minoritarios. Variación de la carga y del extremo de la zona de carga espacial.

de esta nueva tensión existe una zona en el interior de la región de carga espacial en la que los niveles estarán ocupados por electrones y a su vez no hay portadores libres en las bandas por lo que nos encontramos en una situación de desequilibrio tendiéndose a la emisión de los portadores de carga atrapados. Esta región de la zona de carga espacial está delimitada por los puntos donde se cruzan el nivel de Fermi y el nivel de impurezas en los instantes anterior y posterior a la aplicación de esta tensión. Fuera de esta región no existe generación térmica debido a la alta concentración de portadores libres en las bandas de energía. El cambio en la ocupación de estos niveles significa que hay un trasvase de carga desde esta región hacia el circuito externo. Esto modificará la cantidad de carga en la zona de transición. Si se mantiene constante la polarización de la unión

PN, este cambio de la carga obligará a modificar la anchura de la zona de carga espacial. Dependiendo de hacia que banda se alejan los portadores que hacen cambiar el factor de ocupación así variará la zona de carga espacial. En la región N una emisión de mayoritarios desde los centros implica que haya un aumento de carga positiva y por lo tanto deba ser compensado con una disminución de la zona de carga espacial (figura 2a). Por el contrario si hay emisión de minoritarios en esta misma zona, el aumento es de carga negativa y debe ser compensado con un aumento de la zona de carga espacial (figura 2b). El reflejo de estas variaciones se puede observar experimentalmente sobre medidas de capacidad, creciendo ante los pulsos de mayoritarios y decreciendo por la emisión de minoritarios. No se ha mencionado la región P en este mecanismo de flujo de carga a lo largo de la unión. Sólo en el caso de una estructura asimétrica P<sup>+</sup>N o N<sup>+</sup>P toda la variación de carga se produciría en la zona menos dopada. A medida que las muestras reales se alejan de este modelo habrá que tener en cuenta la variación de los dos extremos de la zona de carga espacial. La simulación numérica de una unión real y su comprobación experimental nos permitirán descubrir otras componentes en este movimiento de cargas, que se deberán combinar con las descritas en este modelo simple.

### 1.3 DESCRIPCIÓN DE UNA UNIÓN POR MÉTODOS NUMÉRICOS

La ecuación unidimensional de Poisson, en la forma que aparece en los dispositivos semiconductores no degenerados, no tiene una solución analítica o directa a menos que, como hemos mencionado anteriormente, nos encontremos con perfiles de impurezas uniformes o casi uniformes y se resuelva en base a unas aproximaciones. La solución numérica de este problema ha sido considerada por algunos autores [27-30]. Los últimos describen un método por el cual las soluciones numéricas de la ecuación de Poisson son fáciles de obtener para el estado de equilibrio de semiconductores con perfiles de impurezas no uniformes implantados iónicamente, o bien para dispositivos semiconductores con implantación iónica polarizados en inverso.

En nuestro trabajo se va a modificar el método descrito por Klopfenstein y Chung [30] para poder aplicarlo a un caso más general: una unión gradual impurificada con centros profundos. Se distinguirán dos formas de resolución dependiendo de si se trata un régimen estacionario o transitorio. A partir de su solución, es decir, una vez conocido el potencial eléctrico en la unión desarrollaremos una expresión para la capacidad en alta frecuencia.

La importancia de esta magnitud la da el hecho de interpretar resultados procedentes de técnicas capacitivas tanto en régimen estacionario como transitorio pues resulta difícil con la presencia de perfiles de impurezas básicas y profundas arbitrarios. Es por ello que simulemos una unión PN gradual con centros profundos mediante la solución numérica de la ecuación de Poisson y evaluada para diferentes concentraciones de impurezas profundas; esto nos permitirá aplicar y explicar correctamente técnicas capacitivas a la unión.



### 1.3.1 ECUACION UNIDIMENSIONAL DE POISSON

#### 1.3.1.1 RÉGIMEN ESTACIONARIO

Sea una unión PN con un perfil de impurezas gradual dado por  $N_D(x)-N_A(x)$ . Consideremos además la presencia de dos centros profundos, uno con carácter aceptador y otro con carácter donador, con concentraciones  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$  respectivamente. Si la unión se encuentra polarizada en inversa a una tensión  $-V$  y en estado estacionario y llamamos  $\Phi(x)$  al potencial en cualquier punto de la estructura, la descripción eléctrica de la misma implica resolver la ecuación:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_s} \quad (13)$$

$$\rho(x) = q(p(x) - n(x) + N_D(x) - N_A(x) - N_{T1}f_{T1} + N_{T2}(1 - f_{T2})) \quad (14)$$

en donde:  $p(x)$  y  $n(x)$  son las distribuciones espaciales de huecos y de electrones libres,  $f_{T1}$  y  $f_{T2}$  los factores de ocupación de los centros profundos,  $q$  el valor absoluto de la carga del electrón y  $\epsilon_s$  la constante dieléctrica del silicio.

Esta ecuación la hemos resuelto [31,32] para las zonas P y N utilizando una modificación del procedimiento iterativo de Cowell-Newton con un retículo variable que se redefine de forma automática después de cada iteración, introduciendo nuevos puntos de la red allí en donde se producen importantes variaciones del potencial. Este método resulta ser convergente, aunque la presencia de centros profundos hace que este proceso sea más lento que el de Klopfenstein y Chung, ya que los factores de ocupación se modifican después de cada iteración. Como condiciones de contorno se imponen la continuidad del campo y del potencial en la unión metalúrgica ( $x=0$ ):

$$\Phi(-W_p) = -\frac{E_i}{q} - V \quad \text{y} \quad \Phi(W_n) = -\frac{E_i}{q} \quad (15)$$

(Por simplicidad se ha tomado como origen de energías el seudonivel de Fermi de electrones,  $E_{FN}=0$ ).  $V$  es la tensión inversa aplicada y  $E_i$  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 suficiente lejos como para que las variaciones de potencial entorno de ellos sean despreciables.

Así pues, se tiene:

en la zona P:

$$n \ll p \quad (16)$$

$$p(x) = n_i e^{-\beta(\Phi - V)} \quad (17)$$

$$f_T = 1 - \frac{p(x)R + n_T}{R(p(x) + p_T) + n_T} \quad (18)$$

en la zona N:

$$p \ll n \quad (19)$$

$$n(x) = n_i e^{\beta\Phi} \quad (20)$$

$$f_T = \frac{n(x) + Rp_T}{n(x) + n_T + Rp_T} \quad (21)$$

$n_i$  es la concentración intrínseca de portadores,  $\beta=q/KT$ ,  $R=c_p/c_n$  es el cociente entre los coeficientes de captura térmica de huecos y de electrones, que como en nuestro caso [31] no influye en los resultados para un amplio margen de valores, se toma  $R = 1$  y  $p_T$  y  $n_T$  están relacionados con los coeficientes de emisión térmica por:

$$e_n = n_T c_n \quad e_p = p_T c_p \quad (22)$$

Podemos expresar en consecuencia la ecuación de Poisson de forma compacta:

$$\Phi'' = \frac{d^2\Phi}{dx^2} = f(\Phi) \quad (23)$$

### 1.3.1.2 RÉGIMEN TRANSITORIO

Consideremos de nuevo el mismo tipo de unión y los mismos centros profundos que en el apartado anterior. Si se somete a la muestra a una nueva tensión inversa  $-V'$  y se pretende estudiar como evoluciona la unión hasta que alcanza la nueva situación estacionaria, la descripción del sistema vendrá dada por una ecuación de Poisson dependiente del tiempo:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x,t)}{\epsilon_s} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \rho(x,t) = q[ & p(x,t) - n(x,t) + N_D(x) - N_A(x) \\ & - N_{T1}f_{T1}(x,t) + N_{T2}(1 - f_{T2}(x,t))] \end{aligned} \quad (25)$$

donde los factores de ocupación de los centros evolucionan con esta variable según la ecuación:

$$\frac{\partial f_T}{\partial t} = -(c_n n + c_p p + e_n + e_p) f_T + (c_n n + e_p) \quad (26)$$

La ecuación de Poisson se resuelve para diferentes instantes de tiempo a medida que transcurre el transitorio. En este caso hay una interdependencia más acusada entre los factores de ocupación de los centros y el potencial eléctrico al introducir la variable tiempo como se muestra en la ecuación:

$$f_T(x,t) = \frac{n(x,t) + R\phi_T}{n(x,t) + R\phi(x,t) + n_T + R\phi_T} + \left[ f_T(x,t - \Delta t) - \frac{n(x,t) + R\phi_T}{n(x,t) + R\phi(x,t) + n_T + R\phi_T} \right] e^{-(nc_n + pc_p + e_n + e_p)\Delta t} \quad (27)$$

que es resultado de resolver la ecuación diferencial (26) para un tiempo  $t$  y como condición inicial el valor del factor de ocupación en un tiempo anterior  $t - \Delta t$ . El tratamiento del sistema de ecuaciones compuesto por las expresiones (24) y (26) puede simplificarse si se resuelven por separado y de manera alternativa ambas ecuaciones. Para ello es necesario que los incrementos de tiempo finitos  $\Delta t$  sean lo suficientemente pequeños comparados con la constante de tiempo del transitorio como para poder suponer durante este intervalo constantes la densidad de portadores libres, electrones y huecos, en la evaluación de la ecuación (27). Para los nuevos valores de los factores de ocupación se vuelven a calcular las densidades de portadores mediante la resolución de la ecuación de Poisson.

### 1.3.2 CAPACIDAD EN ALTA FRECUENCIA

Una vez calculada la distribución teórica del potencial en la unión  $\Phi(x)$ , para cada tensión externa aplicada, podemos deducir de él cualquier magnitud que nos interese, como las concentraciones de portadores, los factores de ocupación de los centros, el campo 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:

$$Q = \int_0^{w_n} \rho(x) dx \quad (28)$$

donde  $\rho(x)$  se obtiene de las expresiones (14) ó (25) dependiendo del estado que se analice.

Y a partir de (28) la capacidad en alta frecuencia, magnitud que utilizaremos para ser comparada con los resultados experimentales:

$$C = \frac{dQ}{dV} \quad (29)$$

Al efectuar las medidas de capacidad en alta frecuencia, la variación de potencial aplicado a la unión se manifestará en la concentración de portadores, pero no en el factor de ocupación de los centros profundos por ser éstos más lentos en responder. 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 quedarían:

$$n(x) = n_i e^{\frac{q(\Phi + \delta\Phi)}{KT}} \quad (30)$$

$$p(x) = n_i e^{\frac{q(V + \delta V)}{KT}} e^{-\frac{q(\Phi + \delta\Phi)}{KT}} \quad (31)$$

considerando incrementos despreciables frente a  $KT/q$ :

$$n(x) = n_i e^{\beta \Phi} (1 + \beta \delta \Phi) \quad (32)$$

$$p(x) = n_i e^{\beta(V-\Phi)} (1 - \beta \delta \Phi) (1 + \beta \delta V) \quad (33)$$

despreciando términos de segundo orden se pueden escribir estas concentraciones:

$$n(x) = n_i e^{\beta \Phi} (1 + \beta \delta \Phi) \quad (34)$$

$$p(x) = n_i e^{\beta(V-\Phi)} [1 + \beta(\delta V - \delta \Phi)] \quad (35)$$

al estar bajo condiciones de alta frecuencia la población de los centros profundos no varía, con lo que la ecuación de Poisson quedaría:

$$\frac{d^2 \Phi_o}{dx^2} + \frac{d^2 \delta \Phi}{dx^2} = -\frac{\rho_o}{\epsilon_s} - \frac{q}{\epsilon_s} \beta (p_o (\delta V - \delta \Phi) - n_o \delta \Phi) \quad (36)$$

y definiendo

$$y \equiv \frac{\delta \Phi}{\delta V} \quad (37)$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_s} \beta (-p_o + n_o) y + p_o \quad (38)$$

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:

$$Q + \delta Q = \int_0^{W_n} (\rho_o + \delta \rho_o) dx \quad (39)$$

y la capacidad:

$$C = \frac{dQ}{dV} = \int_0^{W_n} \beta q (p_o(1-y) - n_o y) dx \quad (40)$$

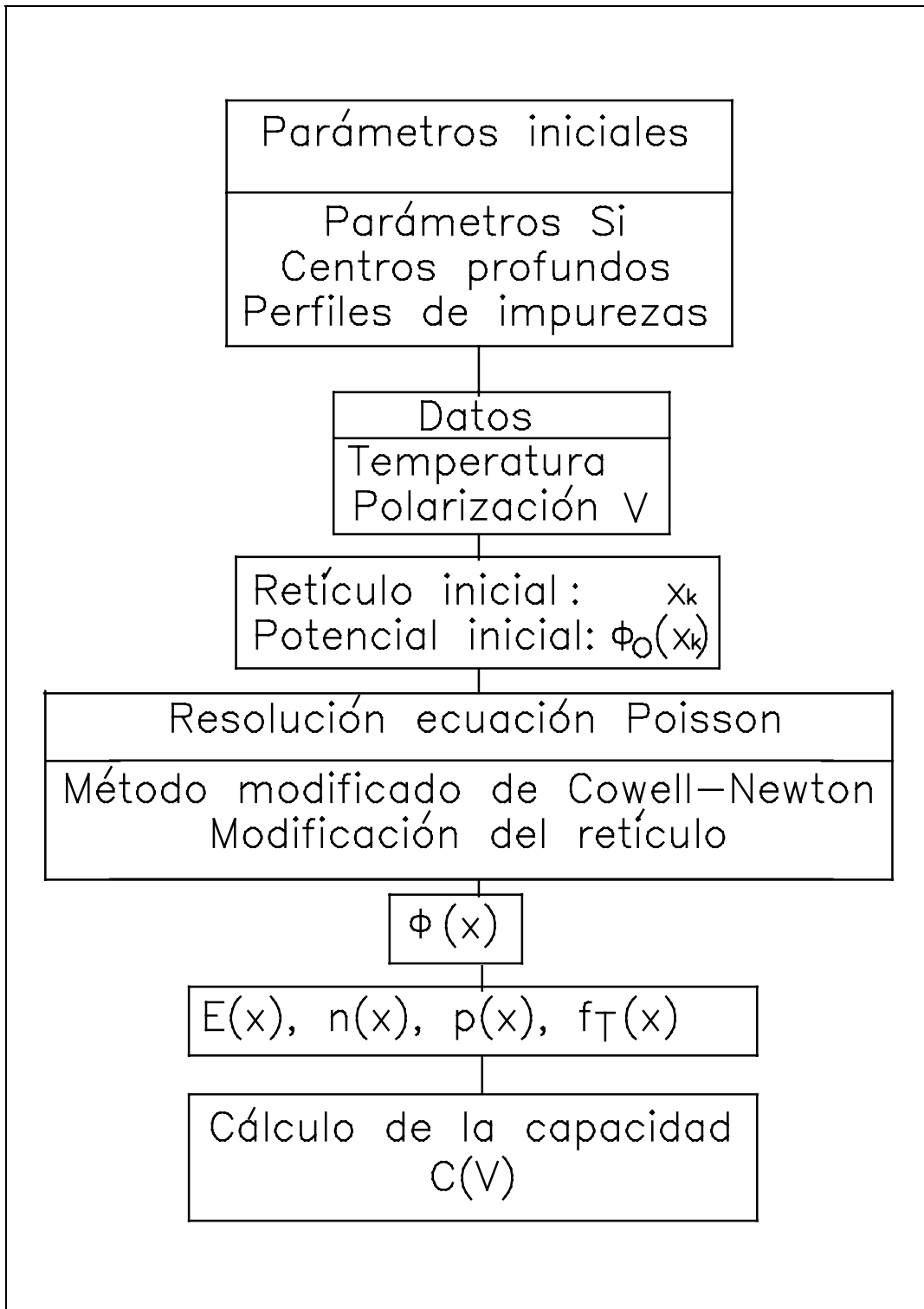
que, para la zona N se reduce a:

$$C = - \int_0^{W_n} \beta q n_o y dx \quad (41)$$

### 1.3.3 MÉTODO PARA LA OBTENCIÓN DE LA CAPACIDAD EN ALTA FRECUENCIA

Las partes principales del método las constituyen el procedimiento iterativo de Cowell-Newton para la obtención del potencial en la unión y el cálculo de la integral (41) para la capacidad en alta frecuencia. El resto son procesos que permiten la evaluación de estas magnitudes. En la figura 3 se puede ver el camino que hay que seguir para obtener el valor de la capacidad correspondiente a una determinada tensión. Hay que partir de una definición completa de la unión teniendo en cuenta los parámetros del semiconductor con el que se esté trabajando, en este caso silicio, el perfil de impurezas básicas y las características de los centros presentes en la muestra: carácter eléctrico, posición energética en la banda prohibida y concentración. El valor de la capacidad calculada dependerá de condiciones externas de temperatura y polarización aplicada.

Para la simulación de la unión en sí se definirá inicialmente un retículo con un número de puntos variable a lo largo del programa dependiendo del incremento de potencial entre dos consecutivos. En nuestro caso vamos a establecer como diferencia de potencial máxima entre dos puntos consecutivos el uno por ciento de la



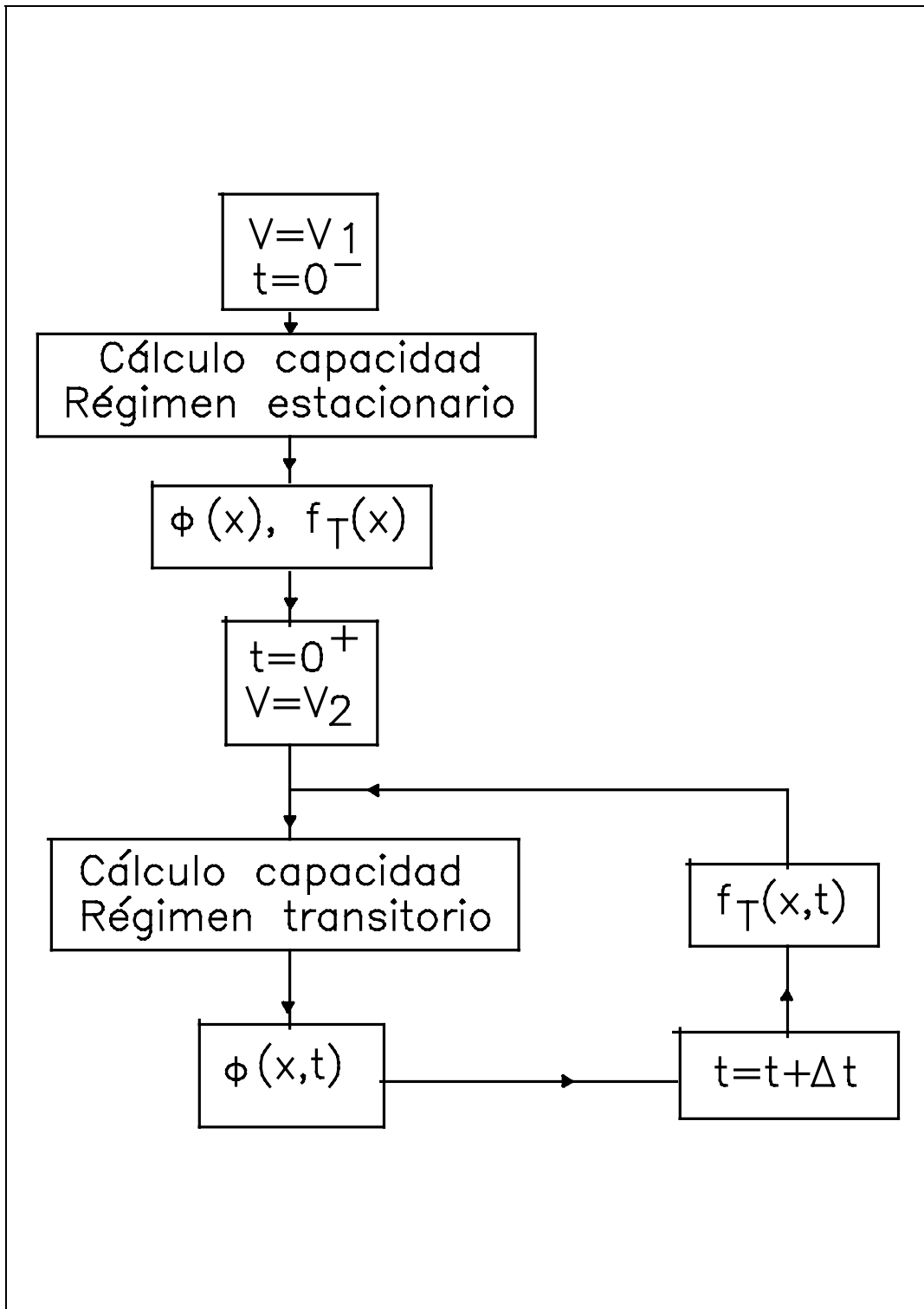
**Figura 3.** Diagrama de flujo para el cálculo de la capacidad en alta frecuencia y en régimen estacionario.



diferencia de los valores extremos absolutos de esta magnitud eléctrica. Esta elección tiene la contrapartida de trabajar con un número elevado de puntos por lo que el tiempo empleado será también grande. La ventaja es, sin embargo, que nos aseguramos de no perder información. En el momento en que tengamos una primera estimación del comportamiento de las muestras podemos llegar a una situación de compromiso que nos permita minimizar el tiempo de ejecución y la pérdida de información. Igualmente el procedimiento iterativo requiere como punto de partida un perfil de potencial en la unión. Se elige como potencial inicial aquel que satisface la condición de neutralidad en cualquier región de la estructura.

La obtención del potencial por este método numérico permitirá calcular otras magnitudes que intervienen en la evaluación de la capacidad. Todos estos pasos intermedios se detallan en el apéndice 1.

La simulación por métodos numéricos de un transitorio de capacidad en alta frecuencia requiere la repetición en el tiempo del proceso anterior junto con el cálculo de los factores de ocupación de los centros mientras dure dicho transitorio (figura 4). Nuestro método en general es aplicable tanto a transitorios debidos a emisión de portadores hacia las bandas como a la captura de electrones o huecos por parte de estos centros. En general vamos a considerar como punto de partida a la unión en estado estacionario sometida a una tensión inversa  $V_1$  para un tiempo  $t < 0$ . En  $t = 0$  se somete a la muestra a otra tensión  $V_2$  y se deja evolucionar. El factor de ocupación calculado para  $t < 0$  se utiliza para obtener una primera distribución de potencial ( $t = 0^+$ ), esta vez para la tensión  $V_2$ . A partir de ese instante comienza el transitorio por lo que se incrementa el tiempo en  $\Delta t$ , se evalúa la nueva ocupación de los centros y para esa nueva distribución volvemos a calcular el perfil de potencial en la unión. El proceso se repetirá hasta que se alcance el nuevo estado estacionario.



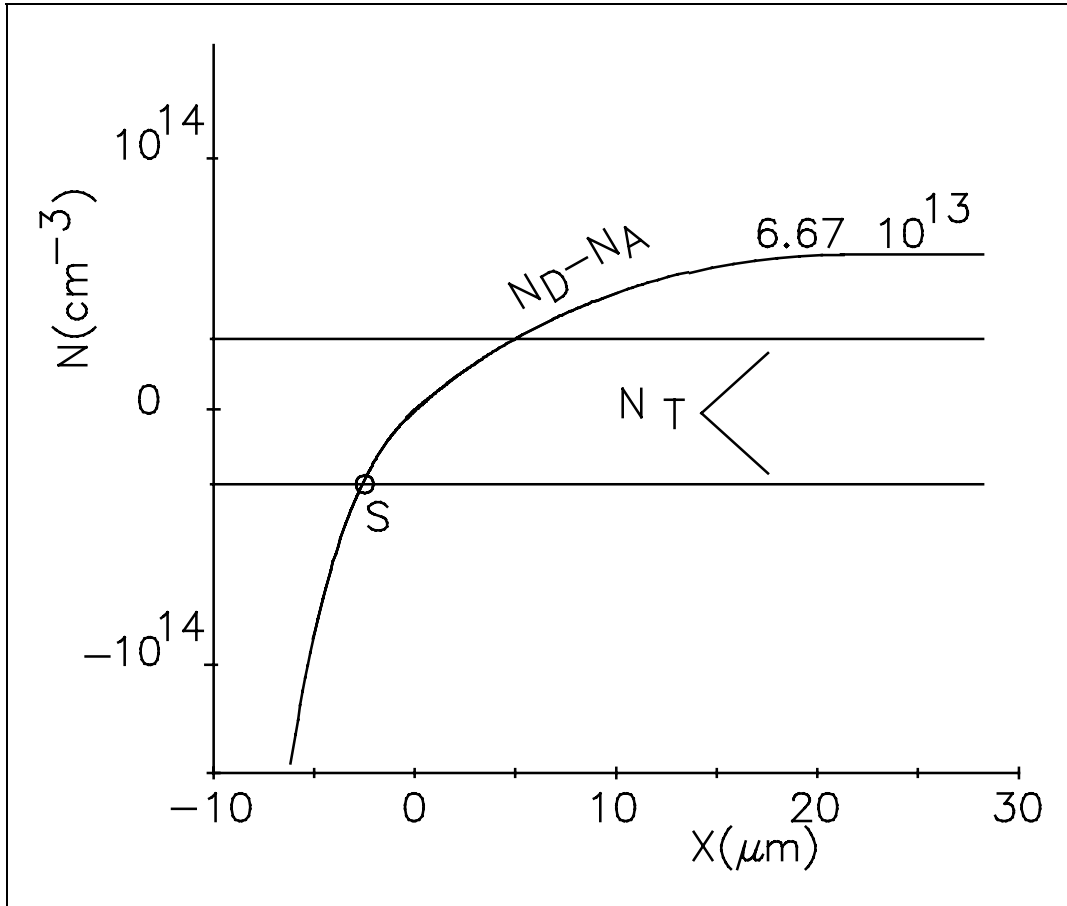
**Figura 4.** Diagrama de flujo para la obtención de un transitorio de capacidad como respuesta a un cambio en la tensión de polarización.

## 1.4 COMPORTAMIENTO ELÉCTRICO DE UNA UNIÓN GRADUAL CON CENTROS PROFUNDOS

Una vez establecidas las bases por las cuales no se puede aplicar satisfactoriamente a una unión PN gradual arbitraria un conjunto de aproximaciones que se han venido utilizando de manera generalizada y una vez expuesto nuestro método teórico para la descripción eléctrica de una unión con centros profundos vamos a aplicar éste a un caso concreto. El objetivo de este análisis será anticipar la existencia de sucesos anómalos que se podrán observar bien directamente en los transitorios isotérmicos de capacidad o de tensión, o bien en el reflejo de ellos en los espectros de DLTS. Para ello calcularemos una serie de magnitudes que pueden obtenerse directamente a partir de la distribución de potencial en la unión,  $\Phi(x)$ . Estas magnitudes son: la concentración de electrones,  $n(x)$ , la concentración de huecos,  $p(x)$ , los factores de ocupación de los niveles presentes en el semiconductor -consideraremos silicio-,  $f_{T1}(x)$ , la densidad de carga,  $\rho(x)$  y el campo eléctrico  $E(x)$ .

A lo largo de este apartado trabajaremos con una unión gradual con dopado mayor en la zona P que en la N, por lo que podríamos calificarla como "estructura P<sup>+</sup>N". La concentración en el lado N alcanza un valor máximo para  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , que denominaremos concentración del sustrato (figura 5). La forma de este perfil de impurezas es similar a la de una función exponencial de la forma  $N_D(1-e^{-x/\lambda})$ .

Además de las impurezas básicas vamos a incluir dos centros profundos con las siguientes características: uno de ellos lo vamos a situar a 0.22 eV debajo de la banda de conducción y le asignamos carácter aceptador, el otro a 0.34 eV encima de la banda de valencia y con carácter donador; al primero lo llamaremos nivel  $E_{T1}$  y al segundo nivel  $E_{T2}$ , la concentración será igual para ambos; en la figura se define un punto característico "S" en el que se igualan las concentraciones de impurezas básicas y profundas en la zona P.

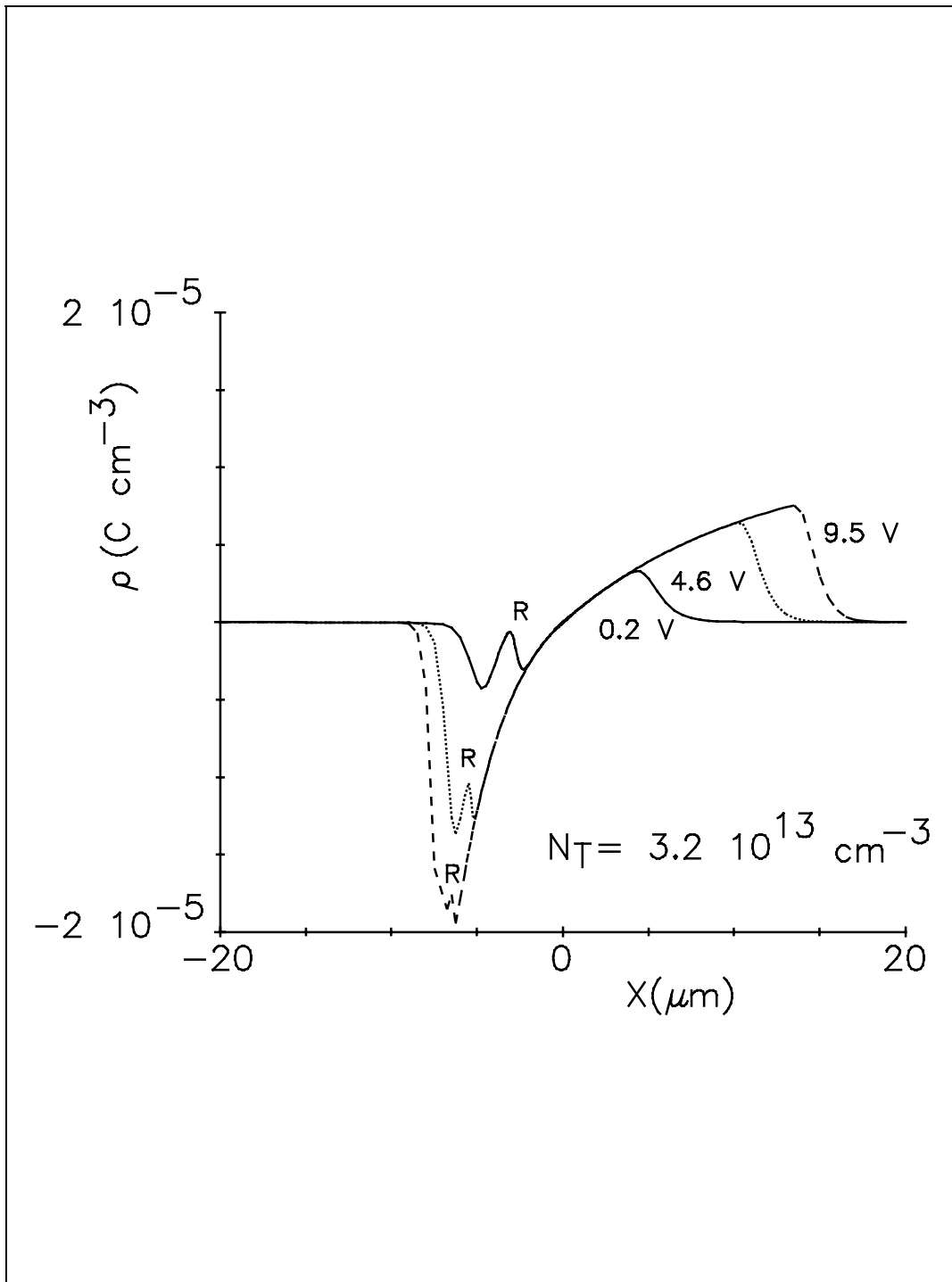


**Figura 5.** Perfil de impurezas básicas y profundas.

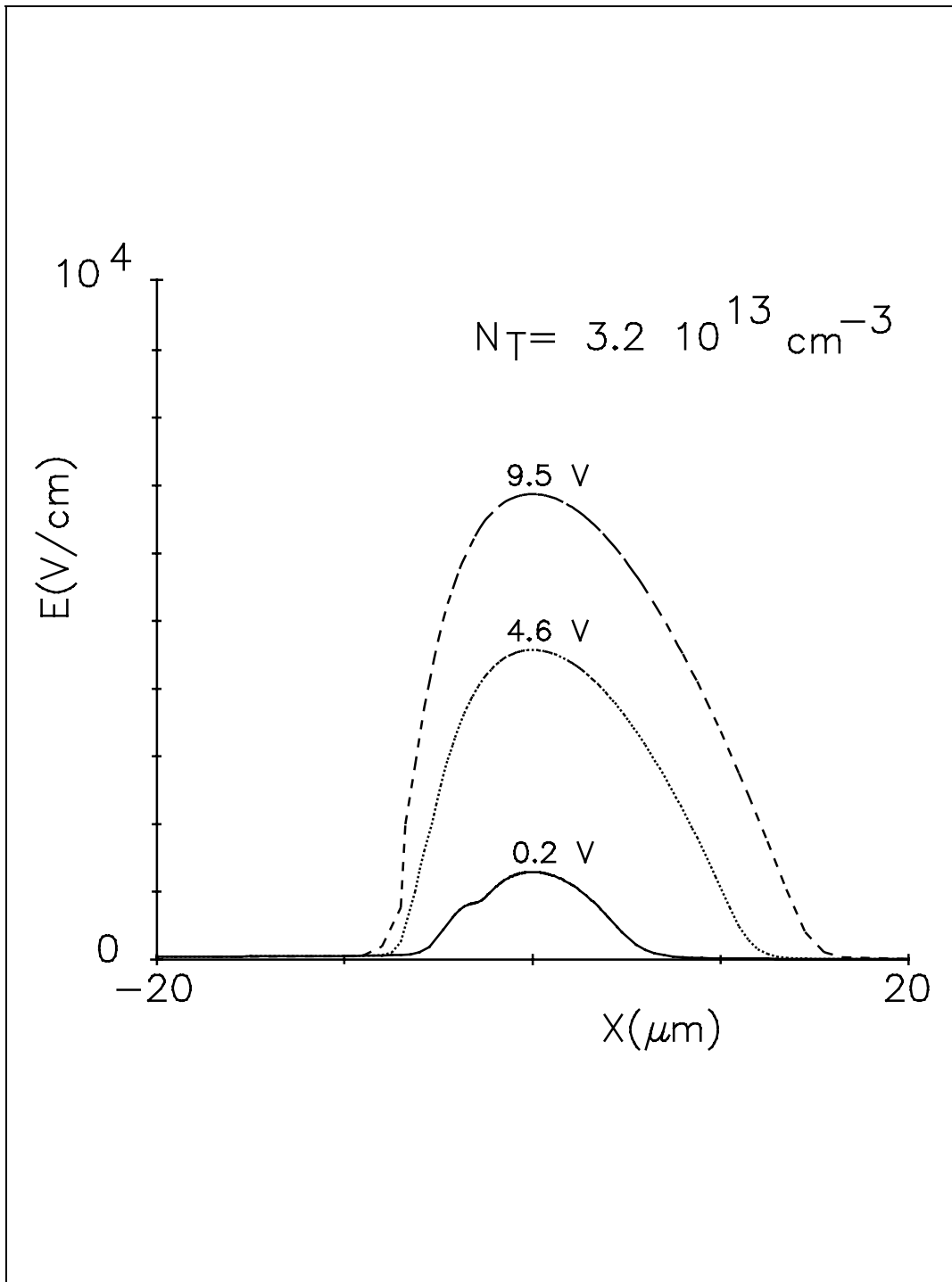
La elección de estas variables puede resultar arbitraria, sin embargo, como se verá más adelante, existe una íntima relación con las muestras que se van a estudiar - diodos de silicio impurificados con platino-; tratamos de evitar el análisis de casos que aunque sean interesantes teóricamente no se vean reproducidos en la práctica.

### 1.4.1 DISTRIBUCIÓN DE MAGNITUDES EN MUESTRAS MENOS DOPADAS.

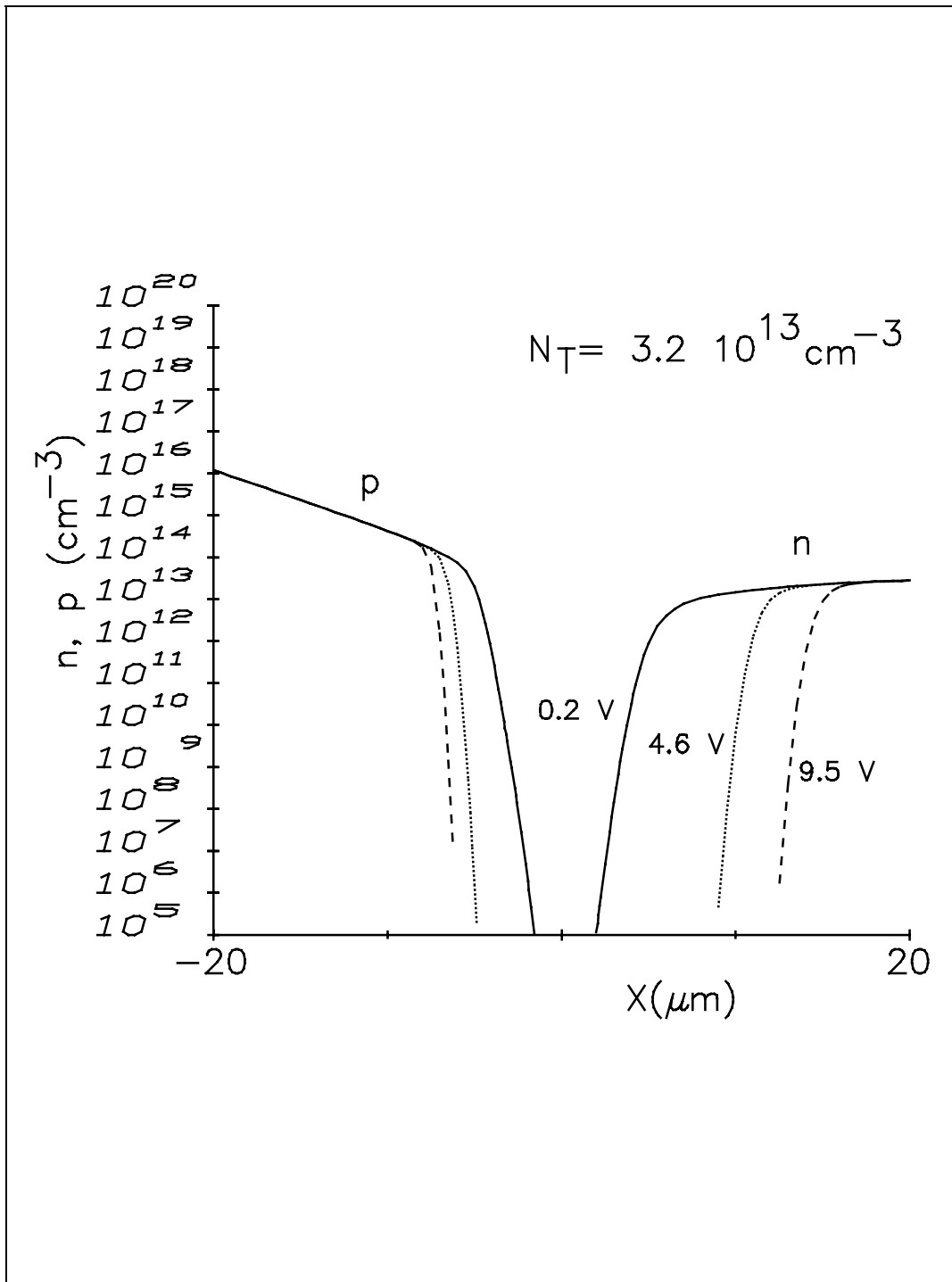
Para analizar los problemas más complejos que surgen cuando hay muestras con una gran concentración de centros profundos partiremos de muestras con un buen comportamiento, entendiendo por buen comportamiento aquellas que son explicables por la teoría conocida hasta nuestro trabajo. Se elegirá un temperatura



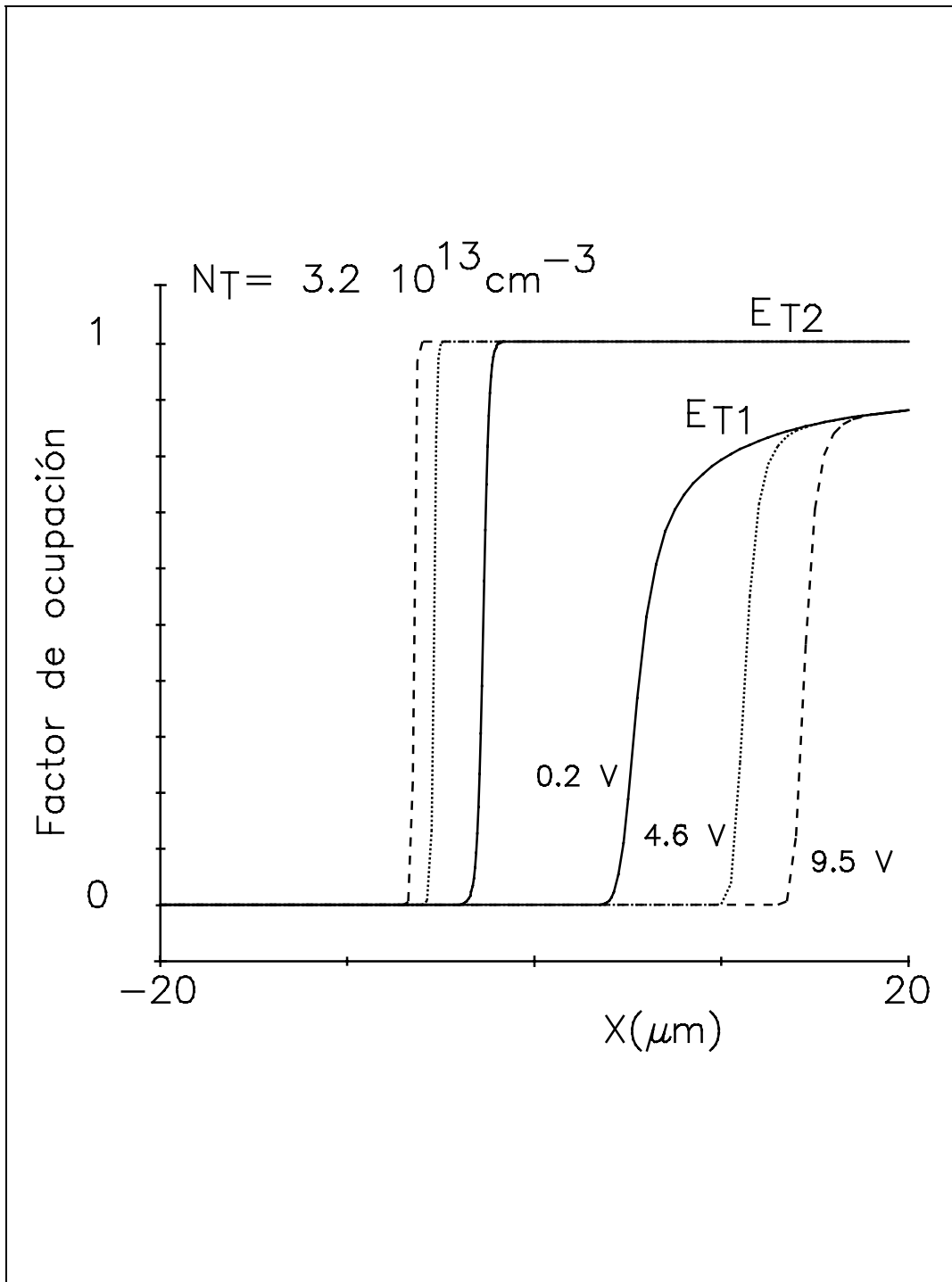
**Figura 6.** Distribución de carga neta en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 7.** Campo eléctrico en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 8.** Distribución de portadores libres en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato  $N$ ,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 9.** Factores de ocupación de los niveles  $E_{T1}$  y  $E_{T2}$  en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato  $N$ ,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



común para todas las simulaciones a fin de poder compararlas entre sí, pero además no tomada de forma arbitraria sino que sea a un valor de interés experimental. En las figuras 6 a 9 se muestra respectivamente la distribución de carga, el campo eléctrico, la distribución de portadores libres y los factores de ocupación de los niveles a lo largo de toda la estructura para tres situaciones estáticas caracterizadas por la tensión inversa aplicada a la muestra, tensiones que son de 0.2 V, 4.6 V y 9.5 V y para una temperatura de 166 K. Las muestras a analizar presentan una concentración en el sustrato de  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y una concentración de centros profundos de  $3.2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , (estos valores numéricos corresponden como hemos mencionado con valores experimentales) es decir, una densidad de impurezas profundas menor que de poco profundas. Del análisis de estas figuras podemos destacar una serie de aspectos conocidos de antemano:

A medida que aumentamos la polarización en inverso el campo eléctrico en la unión también aumenta, así como la zona de carga espacial según se puede ver en cualquiera de estas cuatro figuras.

La zona de carga espacial se extiende principalmente en la región menos dopada, en nuestro caso la zona N, como se puede ver también en todas las figuras. Pero en cualquier caso aumenta con la tensión aplicada.

Se producen caídas no abruptas de la densidad de portadores libres desde las zonas neutras hacia el interior de la zona de carga espacial y de la densidad de carga neta desde la zona de deplexión hacia la zonas neutras.

Hay una clara compensación del semiconductor tipo N. Dado el carácter aceptador del nivel  $E_{T1}$  situado en la mitad superior de la banda prohibida, la concentración de electrones en la zona neutra de esta región será  $n=N_D-N_{T1}^-$ . La representación de la concentración de electrones confirma este hecho.

También hay compensación en la zona P (en este caso el nivel  $E_{T2}$  es donador), aunque en ella cabe destacar dos regiones separadas por el punto donde el nivel de Fermi se cruza con el nivel  $E_{T2}$  (punto R de la figura 6). Así, en la región

externa de la zona de carga espacial la concentración de carga neta es:

$$\rho = -q(N_A - N_T^-) \quad (42)$$

y en el interior, donde los niveles profundos no están ionizados, a la densidad de carga solo contribuyen los niveles poco profundos:

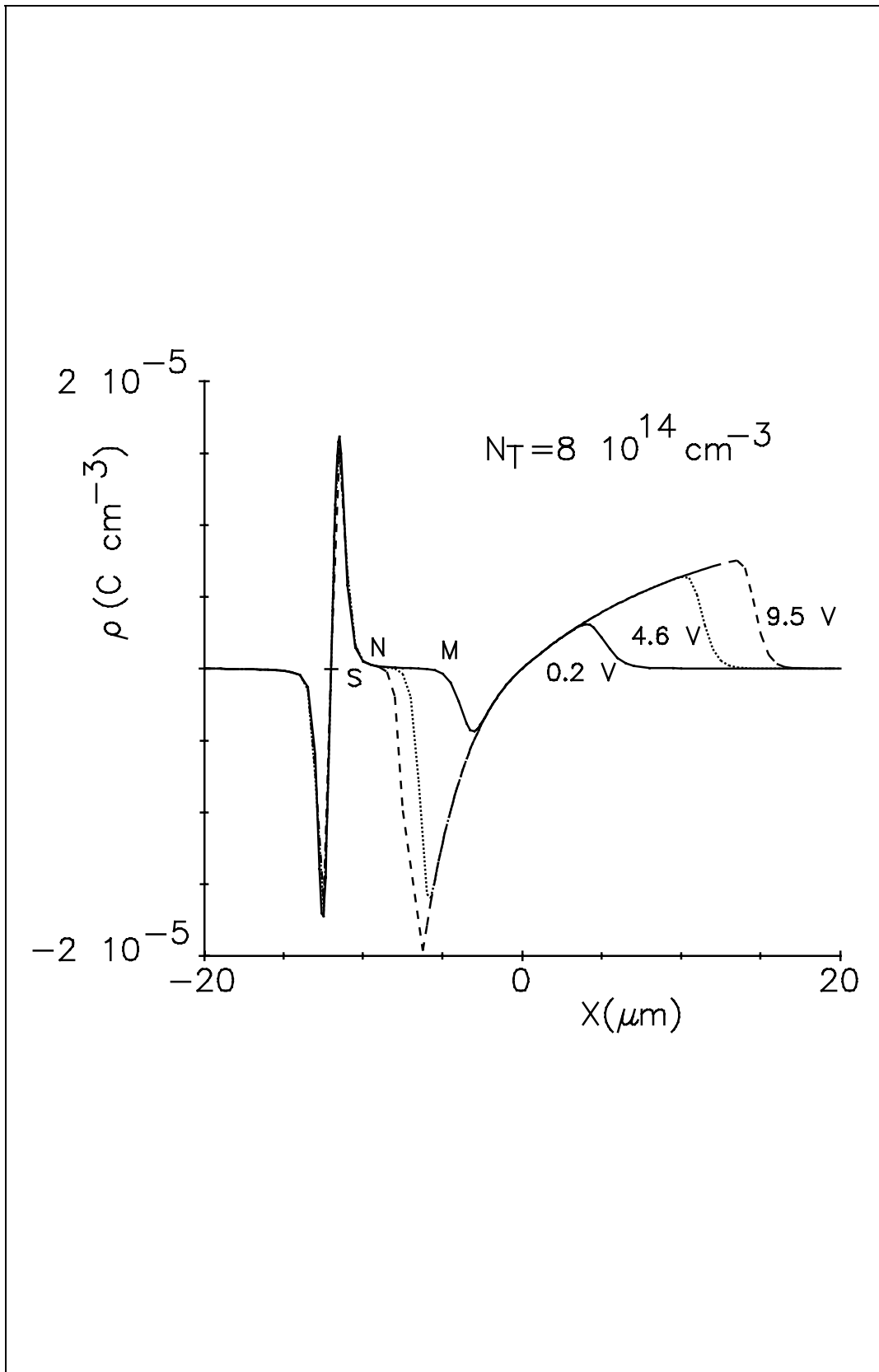
$$\rho = -qN_A \quad (43)$$

Se produce por tanto esa especie de oscilación en el extremo de la zona de carga espacial de la zona P que se observa en la figura 6 (puntos R). Se debe mencionar también que a medida que disminuimos la zona de carga espacial, mediante la aplicación de tensiones de polarización más bajas, como el perfil de impurezas básicas es decreciente hacia el interior de la unión los niveles profundos van a dominar en la expresión (42) llegándose casi a anular la densidad de carga.

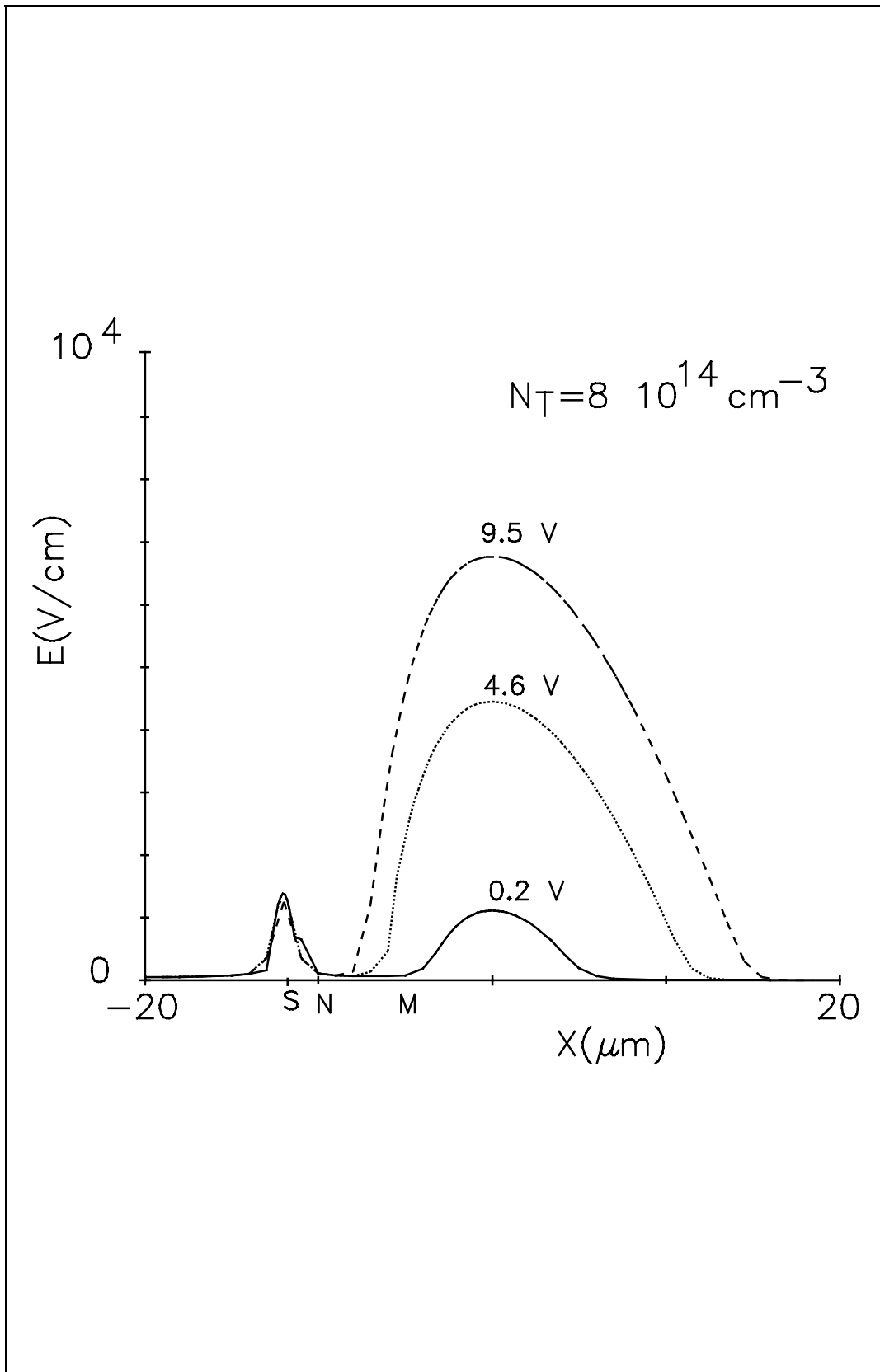
#### **1.4.2 DISTRIBUCIÓN DE MAGNITUDES EN MUESTRAS MÁS DOPADAS**

Con la representación de la densidad de carga, campo eléctrico, portadores libres y factores de ocupación se va a ver como afecta el hecho de aumentar la concentración de centros profundos en muestras con un perfil de impurezas básicas como el que se está analizando. En este nuevo caso vamos a considerar una concentración de impurezas profundas  $N_T = 8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , un orden de magnitud superior a la concentración del sustrato. En las figuras 10 a 13 se muestran estas cuatro magnitudes respectivamente. En ellas cabe destacar una serie de aspectos que van a diferenciar claramente este tipo de muestras de las analizadas anteriormente.

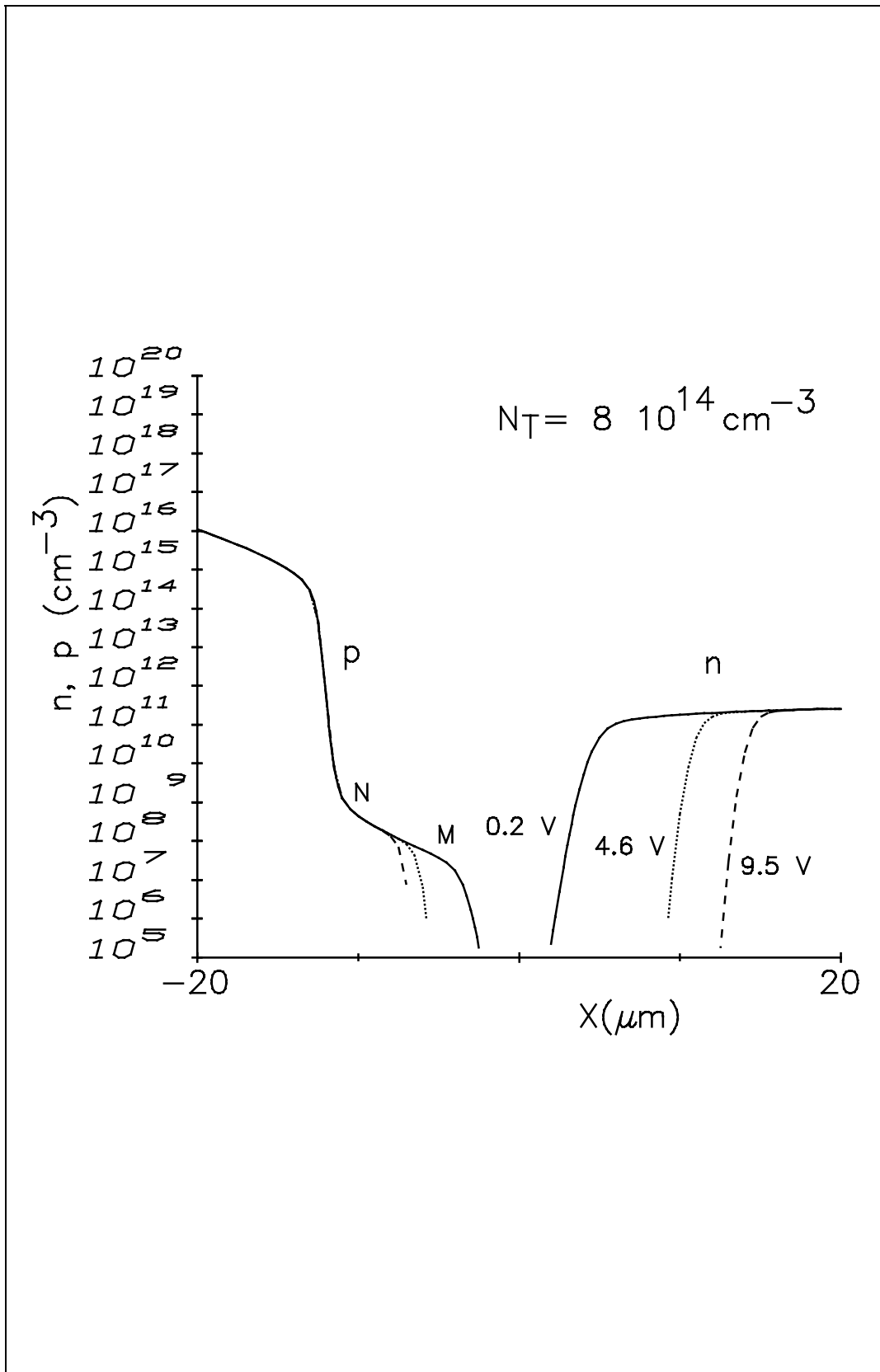
El campo eléctrico aumenta de nuevo en la unión al incrementar la



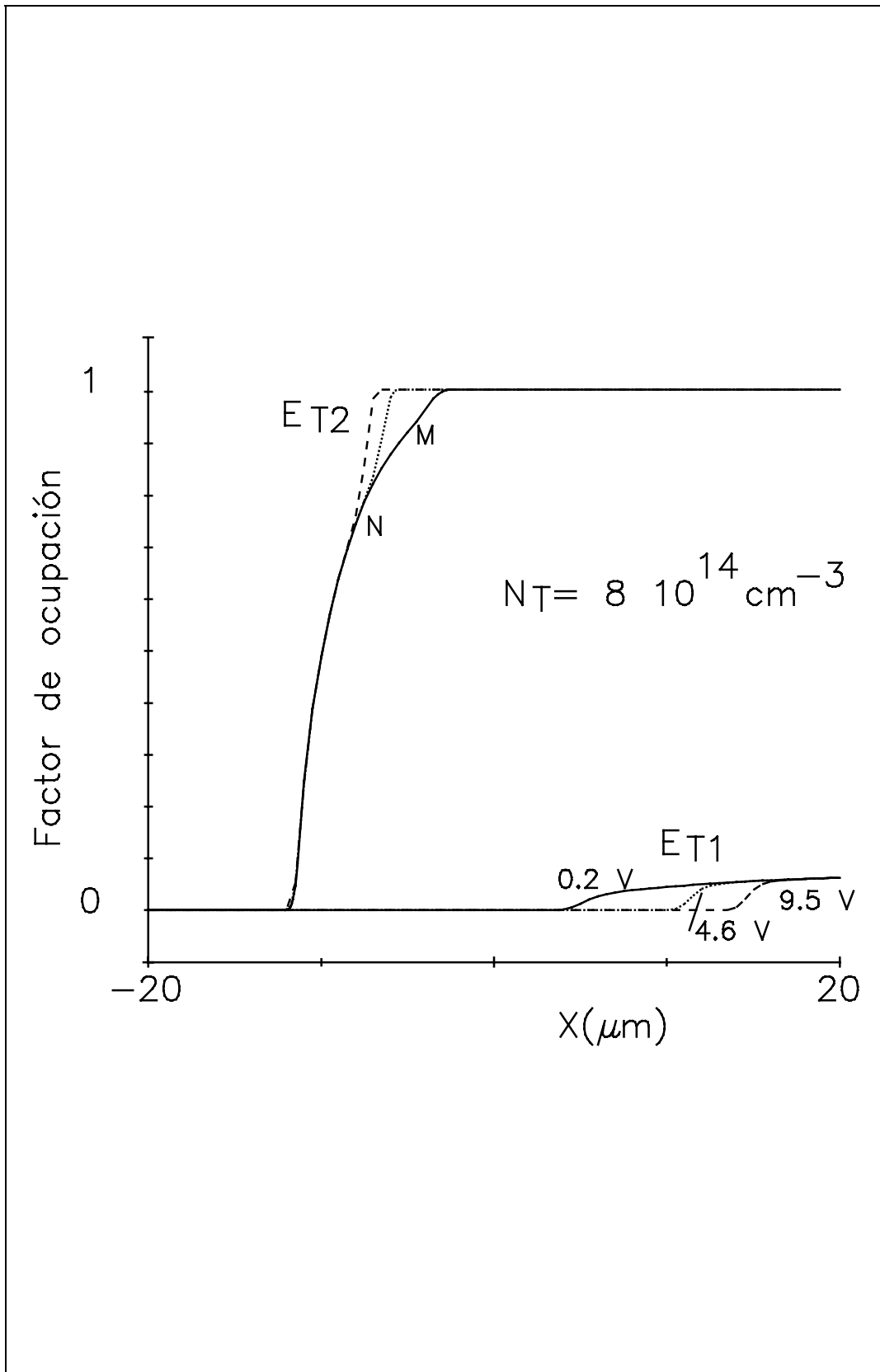
**Figura 10.** Densidad de carga neta en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 11.** Campo eléctrico en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 12.** Distribución de portadores libres en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 13.** Factores de ocupación de los niveles  $E_{T1}$  y  $E_{T2}$  en la unión en función de la tensión inversa aplicada. Muestras de sustrato N,  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .

tensión inversa pero aparece otra región con campo eléctrico no nulo, donde en principio cabía esperarlo con este valor, centrado precisamente en el punto donde se igualan las concentraciones de centros profundos con la de impurezas básicas en la región P (punto S de la figura 10). Este campo eléctrico presenta una evolución con la tensión aplicada contraria a la del campo centrado en la unión metalúrgica, es decir aumenta, aunque ligeramente, a medida que disminuimos la tensión externa.

La explicación del por qué aparece este campo eléctrico en esta zona se puede ver en la figura 10, donde se representa la densidad de carga neta. Si en la situación de baja concentración de centros profundos existían tensiones para las cuales la concentración de impurezas básicas igualaba a la de impurezas profundas ionizadas dentro de la zona de carga espacial de la zona P, en este caso como la presencia de centros profundos es mayor, no solo vamos a encontrar la igualdad para cualquier tensión sino que existirá una región amplia donde dominan los centros profundos frente a las impurezas básicas dando lugar como se observa en la figura a la aparición de una inversión de la carga dentro de la zona de depleción. La primera consecuencia que este fenómeno trae consigo es la aparición de un campo eléctrico en este lugar. La aparición de una nueva barrera en el dispositivo implica la invariabilidad de la zona de carga espacial precisamente en ese punto e impide que los portadores penetren o salgan de esta región. En esta situación la zona de transición puede crecer únicamente por donde no tenga impedimentos, es decir por la zona N de la unión.

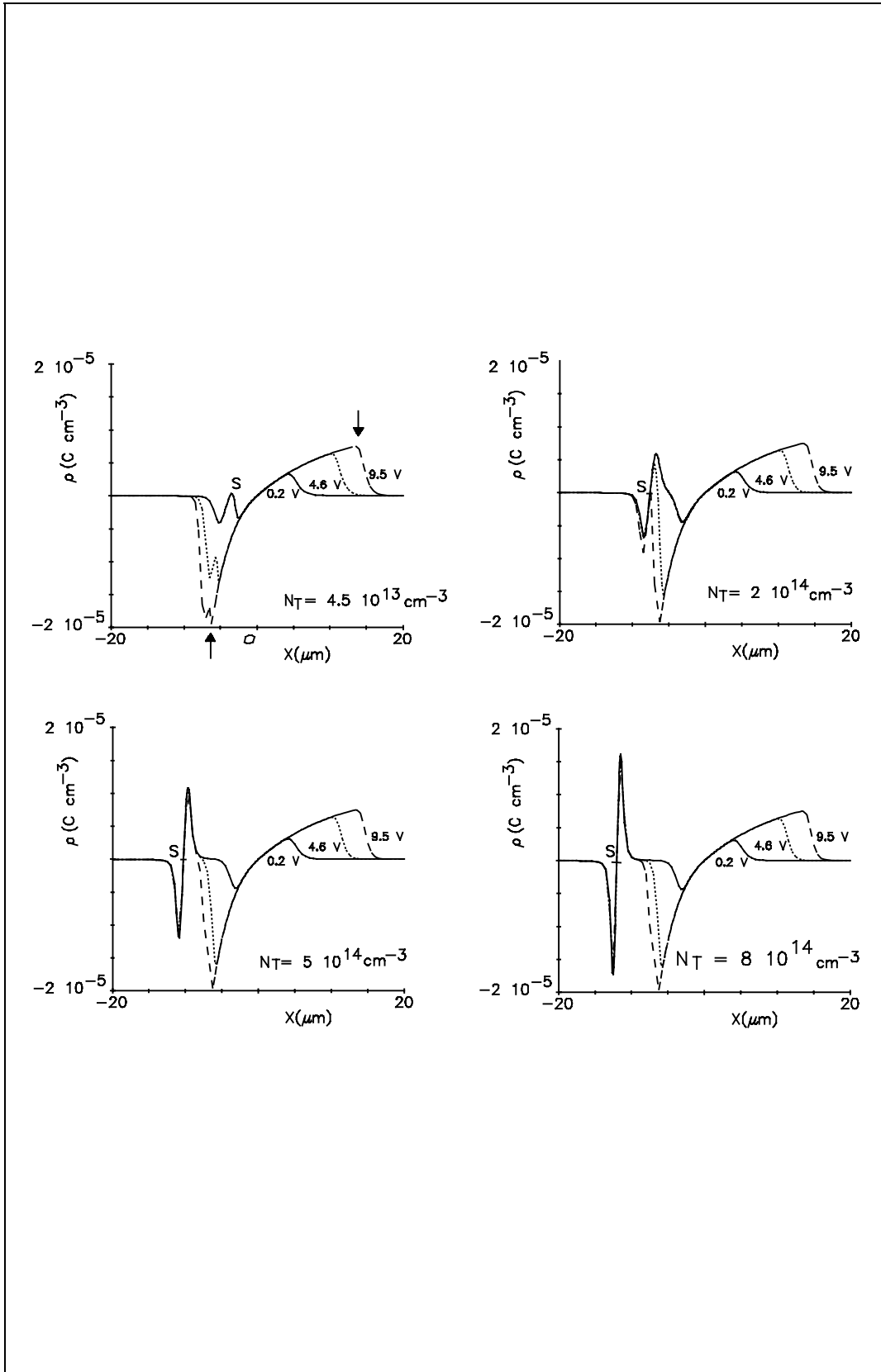
En las representaciones del campo eléctrico y de la carga neta, a medida que la tensión inversa se aproxima a cero, aparece otra región intermedia, entre la unión metalúrgica y el punto donde se igualan las concentraciones de impurezas básicas y profundas (punto S), donde esas dos magnitudes se hacen cero y sin embargo la concentración de impurezas profundas ionizadas no es nula (figura 13) y consecuentemente tampoco lo es la concentración de huecos; no se observa una caída brusca de la ionización del nivel  $E_{T2}$  como sí ocurre con el  $E_{T1}$ . En la región localizada entre los

puntos N y M de la figura 12 se observa como la concentración de huecos no tiende a cero de manera abrupta a medida que se aproxima a la unión. La densidad de estos portadores no es nula por la existencia de dos barreras que impiden el completo desalojo de la carga móvil de esta zona; y el factor de ocupación tampoco se hace cero por la existencia de un número no despreciable de huecos que hace que se llegue a una situación de equilibrio en las interacciones banda de valencia-nivel de impurezas. Como cabía esperar la región N está más compensada puesto que se está trabajando con una muestra más impurificada que en el caso anterior, ha decrecido en tres órdenes de magnitud. A pesar de todo la compensación a esta temperatura no es total debido al pequeño factor de ocupación del nivel  $E_{T1}$ . La compensación de estas muestras deberá tener lugar a temperaturas más bajas donde es esperable que el grado de ionización de este nivel sea mayor. Esta situación puede quedar reflejada en medidas de la capacidad en alta frecuencia con el bloqueo de esta magnitud o en los espectros de DLTS de capacidad con la desaparición del pico asociado al nivel  $E_{T1}$ , que en el caso de no inyectar minoritarios presenta su actividad eléctrica en la región N. A estas temperaturas el límite lo impone la propia geometría de la muestra ya que la zona de carga espacial en la zona N se extiende a toda esta región.

### **1.4.3 EVOLUCIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE CARGA CON LA CONCENTRACIÓN DE CENTROS PROFUNDOS.**

En los dos apartados anteriores se han presentado distribuciones de magnitudes en la unión para dos casos extremos de impurificación con centros profundos. En este se va a exponer con algo más de detalle como evoluciona entre esas dos situaciones extremas una sola de esas magnitudes, la densidad de carga neta, variable que es suficiente para comprender el comportamiento de este dispositivo, puesto que como se ha visto, existe una íntima relación entre todas ellas.





**Figura 14.** Distribución de carga neta en la unión para muestras con diferentes concentraciones de centros profundos.

En la figura 14 se muestra la evolución de la distribución de carga neta en la unión como función de la concentración de impurezas profundas. Todas las curvas se han simulado para una temperatura de 166 K y para tres tensiones de polarización en inversa diferentes. Todas las muestras analizadas tienen el mismo perfil de impurezas básicas, la concentración de centros profundos es la variable que oscila entre los  $4.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y los  $8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Se puede observar como la zona de carga espacial de la región N se comporta idénticamente en las cuatro muestras y es en la región P donde se distinguen unos diodos de otros. En las muestras menos dopadas se observa la compensación de las impurezas básicas por profundas sólo en el extremo de la zona de carga espacial pues es la única zona de la unión donde se contribuye con carga neta y además los centros están ionizados; en el interior de la región de deplexión la carga es debida solo a las impurezas básicas.

A medida que aumenta la presencia de estas impurezas en la unión el punto donde se igualan las concentraciones de impurezas básicas y profundas se aleja del origen (punto S), ello da lugar a que se cree una región del semiconductor cada vez más grande y más distante de la unión donde dominan los centros profundos frente a los no profundos. Como consecuencia aparece una zona de inversión de carga, similar a la de la unión metalúrgica, pero que sin embargo no varía de forma notable al modificar la tensión de polarización, como de hecho sí se produce en la zona próxima a  $x=0$ .

Se evoluciona desde muestras menos dopadas donde la zona de carga espacial se reparte en dos regiones de carga opuesta, negativa y positiva; en muestras algo más dopadas dentro de la región de carga negativa aparece una zona positiva indicativa del dominio de los centros profundos; y por último para muestras muy dopadas aparecen dos regiones independientes donde se invierte la carga, separadas entre sí por una zona de carga neta cero. Sin embargo ahí no se cumple estrictamente la condición de vaciamiento, pues como se ha mencionado en el apartado anterior existe una pequeña cantidad de portadores libres atrapados entre las dos barreras de potencial,

así como carga no nula atrapada por los centros profundos.

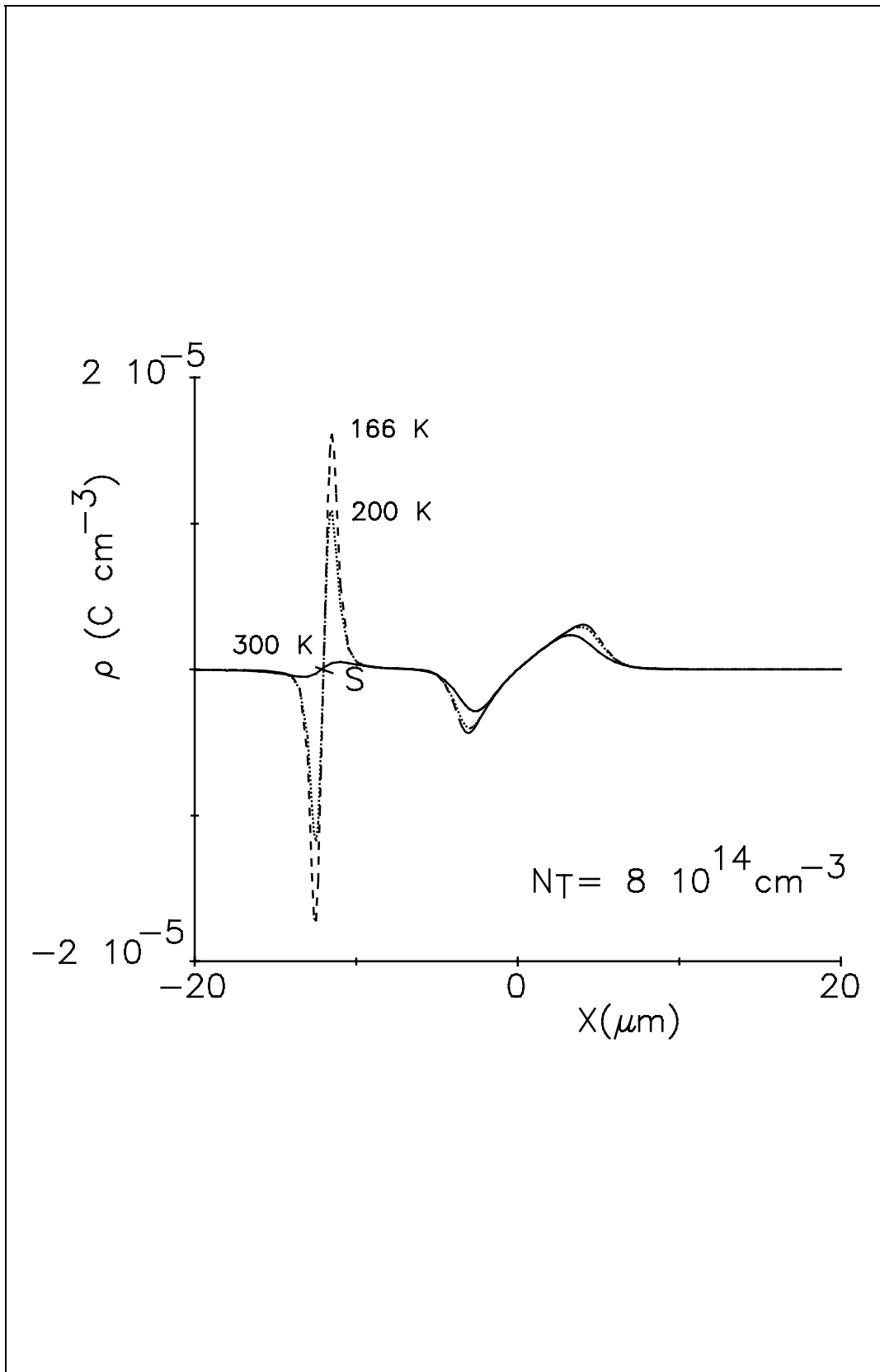
En la figura 14 y para la muestra menos dopada aparecen dos flechas delimitando la zona de carga espacial, la línea discontinua comprendida entre esas dos señales nos indica la forma del perfil de impurezas básicas (únicamente habría que dividir por la carga del electrón). El perfil es claramente gradual, con una pendiente mayor en la zona P respecto a la N. Para las regiones que se están barriendo dentro del dispositivo con la aplicación de tensiones inversas no se puede considerar a esta unión como una estructura P<sup>+</sup>N. Tampoco podríamos aproximar nuestro perfil por uno lineal; sólo para tensiones muy pequeñas, del orden de los 0.2 V, se podría suponer de esta manera.

#### **1.4.4 EVOLUCIÓN DE LAS MAGNITUDES CON LA TEMPERATURA PARA MUESTRAS MÁS DOPADAS.**

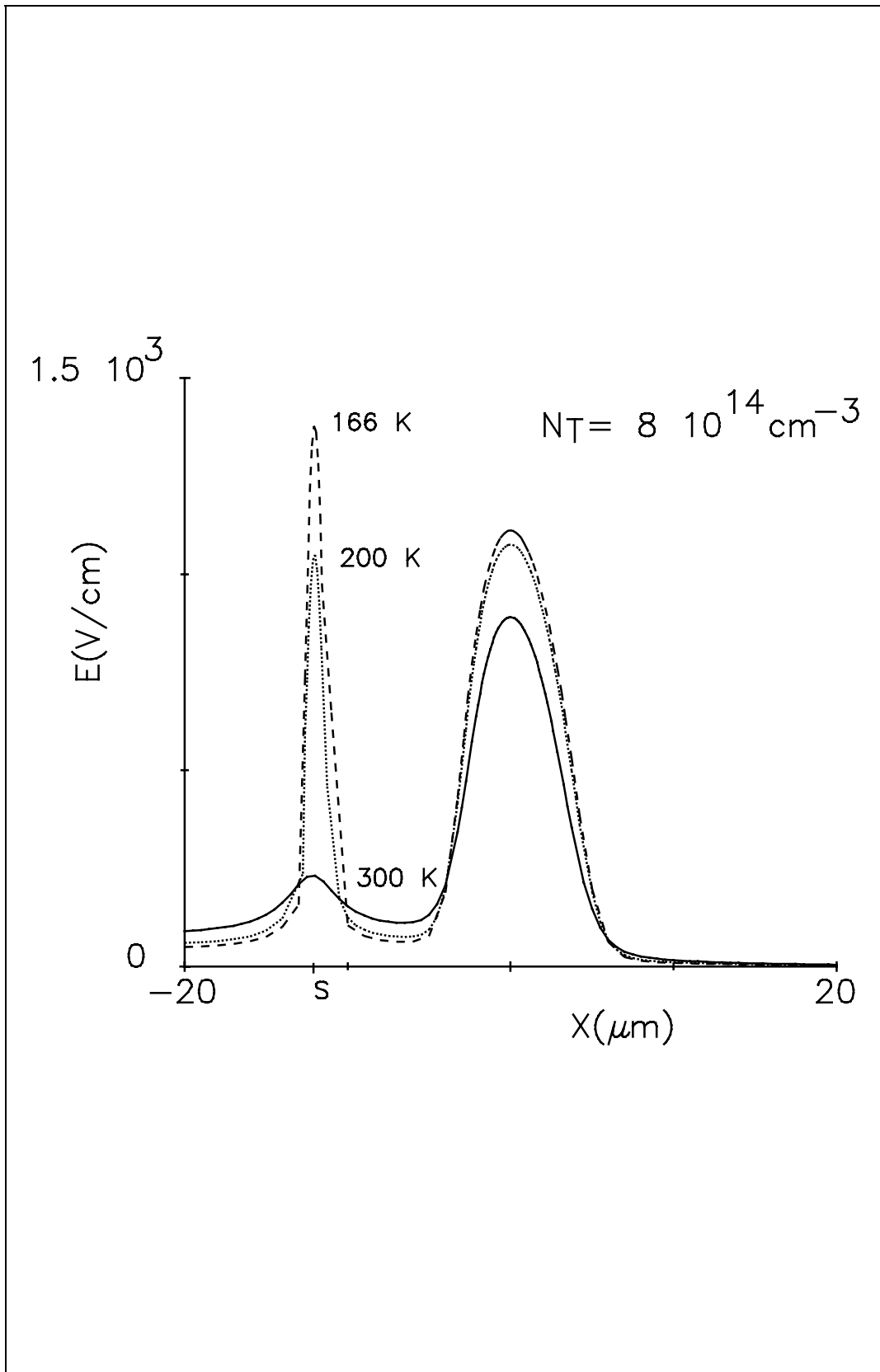
Se ha visto como se comportan las uniones para diferentes concentraciones de centros profundos y para una temperatura fija. Se ha mostrado que los fenómenos que hemos considerado anómalos se dejan sentir con mayor intensidad en las muestras impurificadas con una mayor concentración de centros profundos en general, nuestro programa de simulación no distingue un tipo de impureza particular sino su manifestación en posiciones energéticas dentro de la banda prohibida. Mantendremos ahora fija la concentración de impurezas, tomaremos las muestras más dopadas, y variaremos la temperatura. Es de esperar, antes de hacer ningún tipo de análisis, que la evolución para temperaturas crecientes sea similar a la evolución para concentraciones decrecientes y temperatura fija, pues al aumentar la temperatura, por las características de los niveles que estamos considerando en el interior de la banda prohibida del silicio, la ionización de estos será menor y su influencia en la densidad de carga, o bien en la ecuación de Poisson también menor.

En la figura 15 se muestra la evolución de la densidad neta de carga con la temperatura para una tensión de polarización también fija e igual a 0.2 V, tensión que podríamos considerar también como caso extremo en este tipo de fenómenos. Se muestra claramente como a medida que aumentamos la temperatura los centros influyen cada vez menos. La principal variación se produce alrededor del punto donde se igualan la concentración de centros profundos con poco profundos (punto S), que es el mismo para las tres temperaturas que estamos considerando. Lo que no es igual es el número de impurezas ionizadas, según se puede observar en la figura 17 donde se representa el factor de ocupación de los niveles, variable que realmente afecta a la densidad de carga. A 300 K prácticamente se anula la densidad de carga alrededor de esta zona. En la unión metalúrgica, sin embargo, la variación con la temperatura es la esperada ya que como se ha mencionado anteriormente la contribución a la densidad de carga es debida únicamente a las impurezas básicas:  $\rho=q(N_D-N_A)$ ; se modifican únicamente los extremos de esta zona central pues es ahí donde pueden influir los centros por el cruce del nivel de Fermi con los niveles de impurezas.

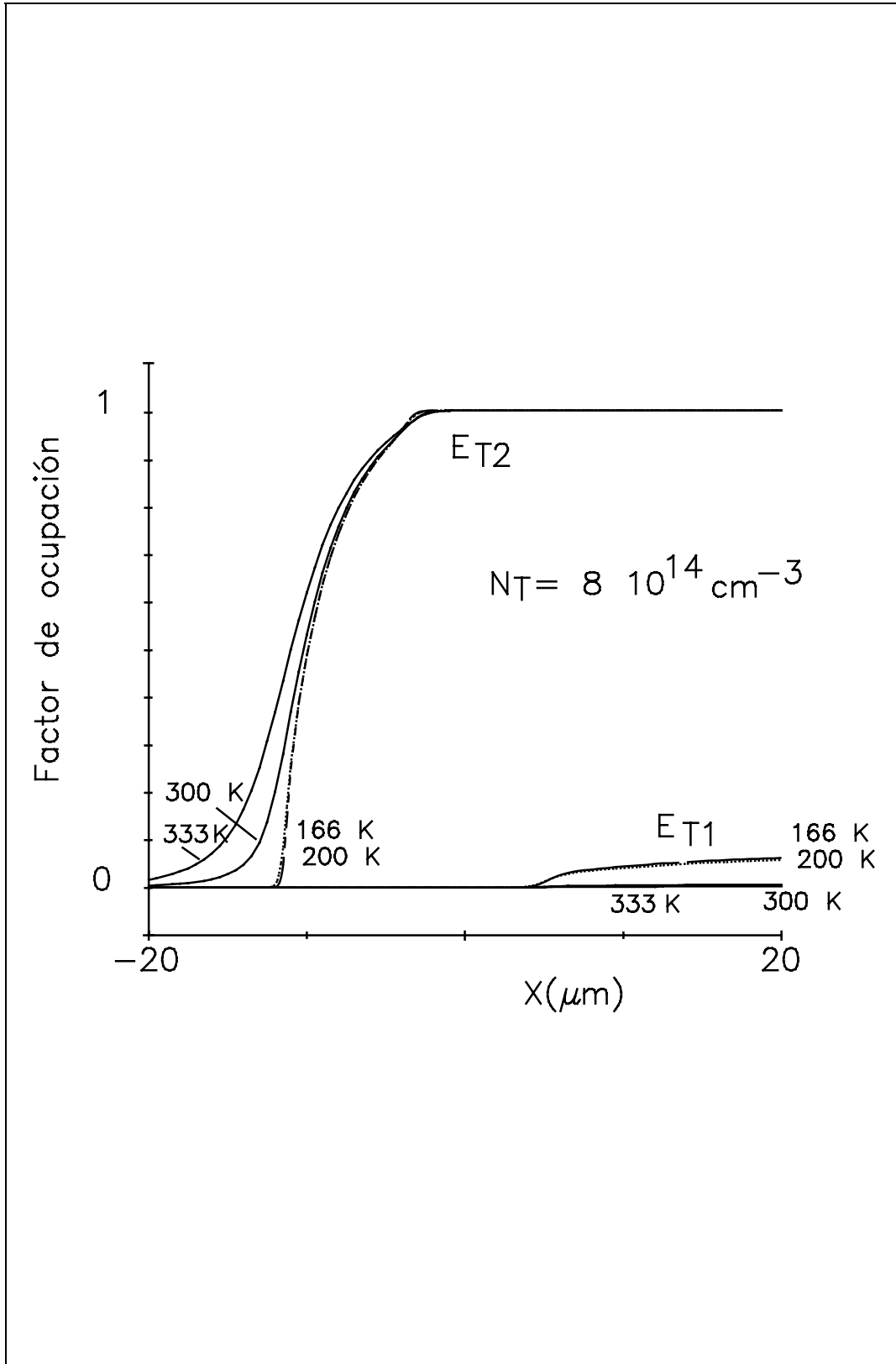
En la figura 16 se muestra la evolución del campo eléctrico para las mismas muestras y condiciones de polarización que en el caso de la densidad de carga. Al disminuir la temperatura, la zona del dispositivo donde presenta mayor variación el campo eléctrico es alrededor del punto de igualdad de concentraciones de impurezas básicas y profundas (punto S). La aparición de este campo con valor elevado en este lugar impide que el campo en el interior crezca. En caso de tener también un punto igual en la región N la variación del campo en  $x=0$  sería prácticamente nula [33]. En nuestras muestras no hay punto de igualdad en esta zona N entre concentración de impurezas básicas y profundas para el caso de concentraciones de centros profundos elevadas ya que  $N_T(x) > N_D(x)$  en cualquier punto de la región N; y para pequeñas concentraciones ese punto está muy próximo a la unión y con las tensiones a las que



**Figura 15.** Evolución de la densidad de carga neta con la temperatura para las muestras más dopadas y para una tensión inversa de 0.2 V.



**Figura 16.** Evolución del campo eléctrico en la unión con la temperatura para las muestras más dopadas y para una tensión inversa de 0.2 V.

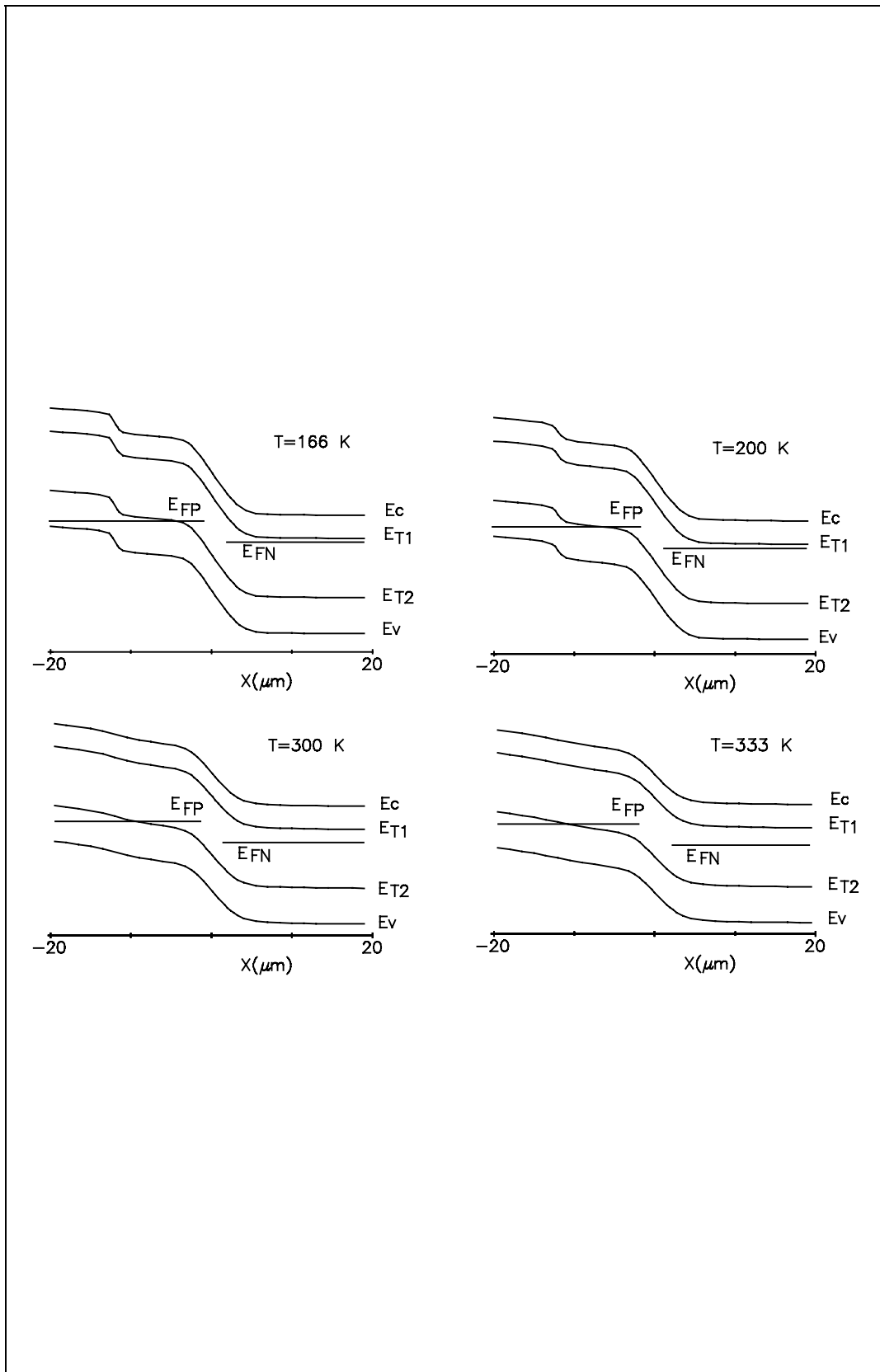


**Figura 17.** Evolución de los factores de ocupación de los niveles de impurezas con la temperatura para las muestras más dopadas y para una tensión inversa de 0.2 V.

se somete a la muestra no nos acercamos a él.

Este máximo mantiene alejados a los portadores de la unión, en este caso huecos, produciéndose una zona cuasivacía de portadores, más ancha cuanto mayor es la concentración de centros profundos. La desaparición de esos máximos a medida que crece la temperatura se debe al cambio en el factor de ocupación de las impurezas como consecuencia del desplazamiento del nivel de Fermi; en la figura 18 se muestra este desplazamiento con la temperatura, así como la curvatura de las bandas correspondientes a las situaciones que estamos considerando, se ha añadido también el diagrama de bandas para una temperatura de 333 K. A bajas temperaturas, es decir donde se ha encontrado la zona cuasineutra en el interior de la región de depleción (comprendida entre los puntos N y M) el nivel de Fermi y el de las impurezas profundas prácticamente coinciden, no se cortan en un solo punto como a altas temperaturas. En realidad la curvatura de las bandas adquiere la forma necesaria para que las impurezas profundas ionizadas compensen casi exactamente a las del dopante y exista además una pequeña concentración de portadores libres en la zona cuasineutra de manera que compense la tendencia de los huecos a penetrar en la zona de carga espacial y el campo eléctrico que los rechaza. Esta situación de equilibrio puede decirse que es consecuencia de un proceso realimentado: si se permitiera el paso de un mayor número de huecos los centros profundos se poblarían aumentando así la carga positiva en el extremo de la zona de depleción y como consecuencia expulsaría de nuevo a los huecos. Si por el contrario penetraran menos huecos, aumentaría en este caso la zona de carga fija negativa alrededor de  $x=0$  y eso ayudaría a atraer más huecos.





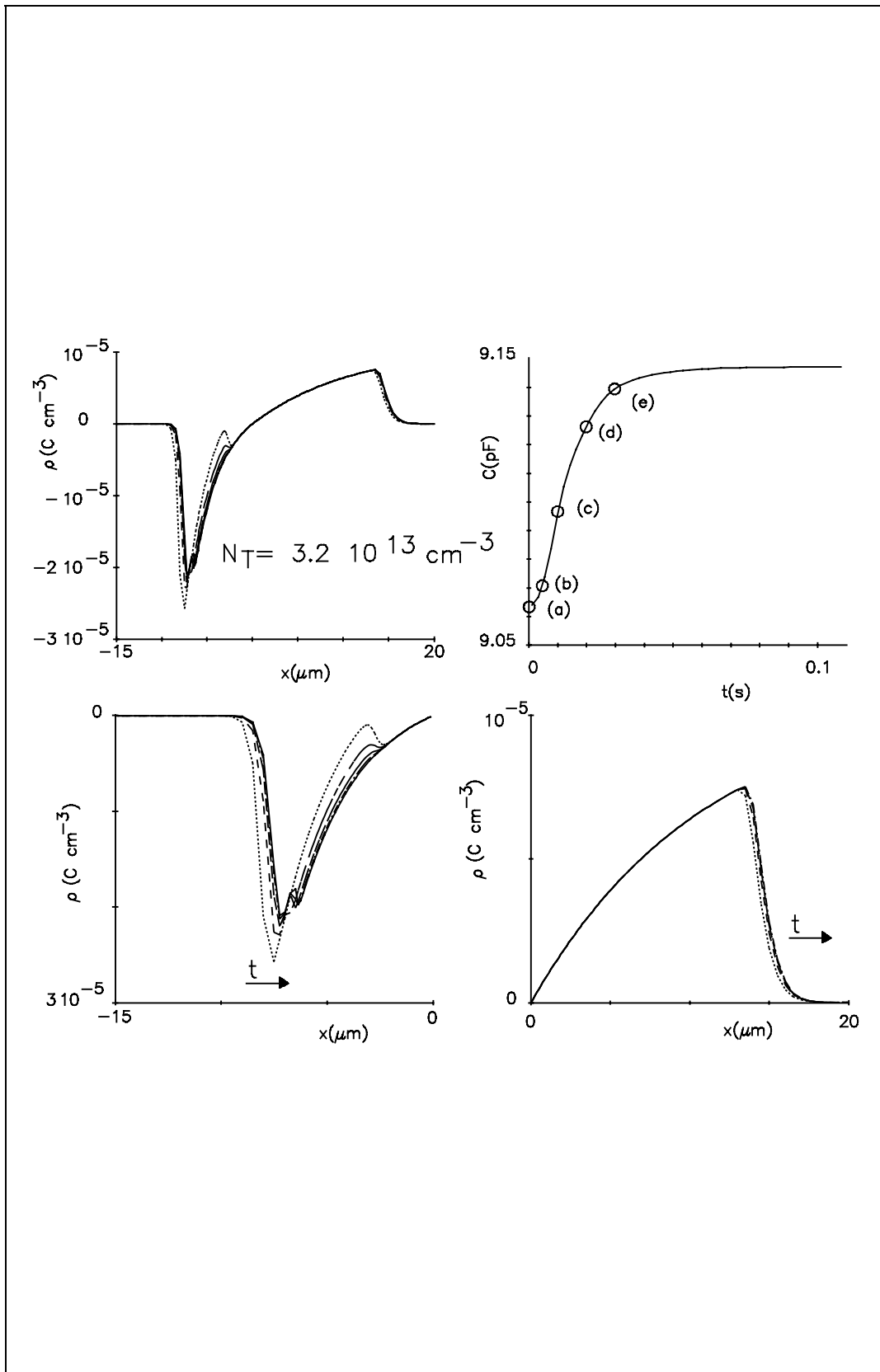
**Figura 18.** Evolución del nivel de Fermi y potencial con la temperatura para las muestras más dopadas y para una tensión inversa de 0.2 V.

#### **1.4.5 COMPORTAMIENTO TRANSITORIO DE LA DENSIDAD DE CARGA NETA.**

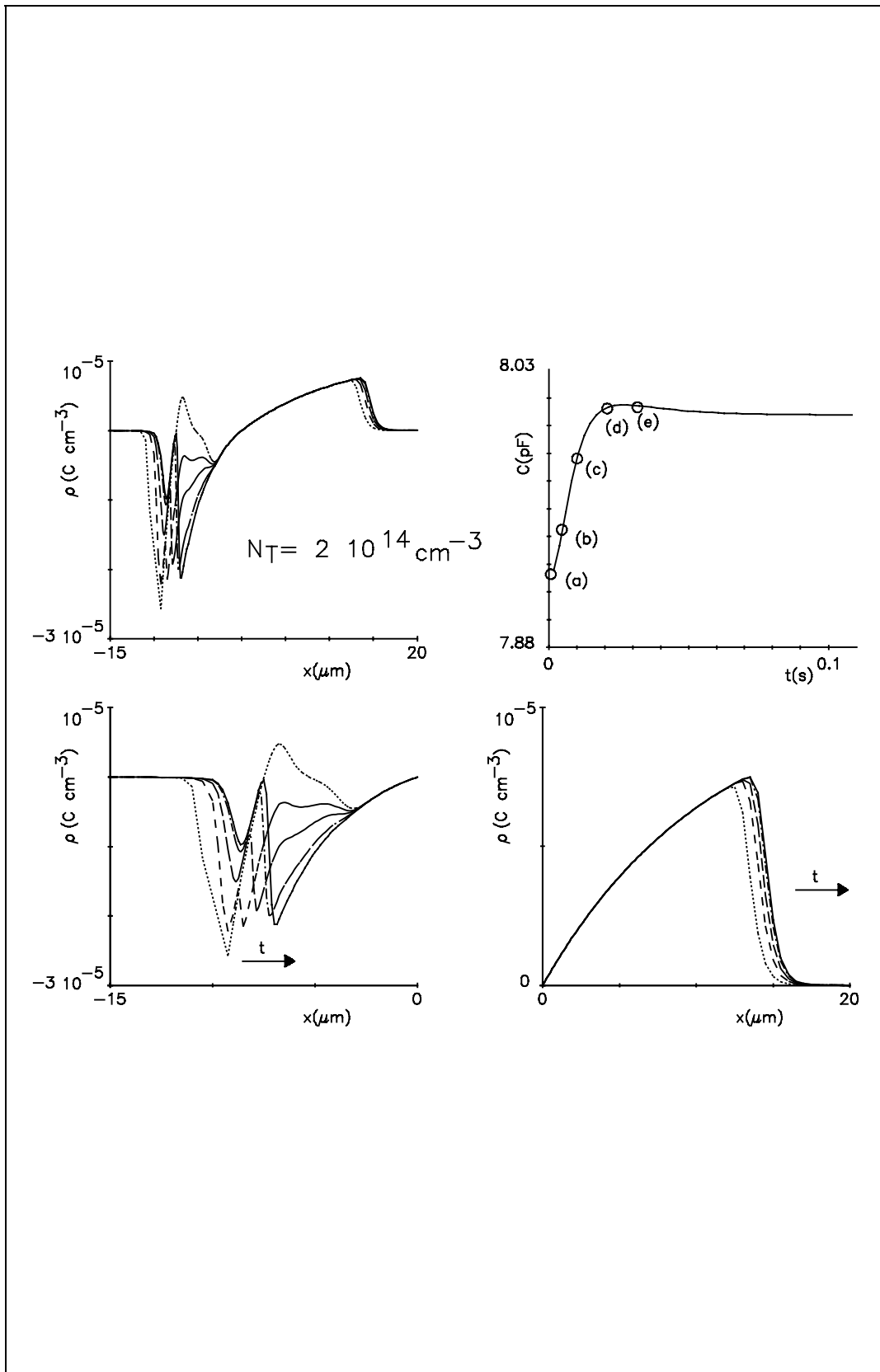
Las situaciones anteriores han permitido explicar el comportamiento de la unión en estado estacionario. Se han analizado las evoluciones de las magnitudes eléctricas en función de variables como la temperatura, la concentración de centros profundos y la tensión inversa aplicada pero siempre bajo condiciones estacionarias. Ello nos permitirá interpretar el comportamiento de unas muestras reales, imponiendo las mismas condiciones durante las medidas experimentales y durante la simulación, y justificar la posibilidad de utilizar o no una serie de técnicas que se venían aplicando a uniones similares a las nuestras.

El comportamiento dinámico de este tipo de muestras ha sido también reproducido mediante simulación, en concreto los transitorios isotérmicos de capacidad asociados a la emisión de los niveles de impurezas. Todos los casos estacionarios expuestos hasta ahora constituyen el primer paso en la interpretación de resultados experimentales; el punto clave es en concreto la congelación de la zona de carga espacial en la región P del diodo. La simulación de la evolución de la carga neta almacenada en la unión a medida que se alcanza la situación de reposo permitirá comprender y ver de manera natural la forma que va adquiriendo este transitorio que calificaremos como anómalo, no por improbable o raro sino por no haber tenido constancia experimental hasta ahora.

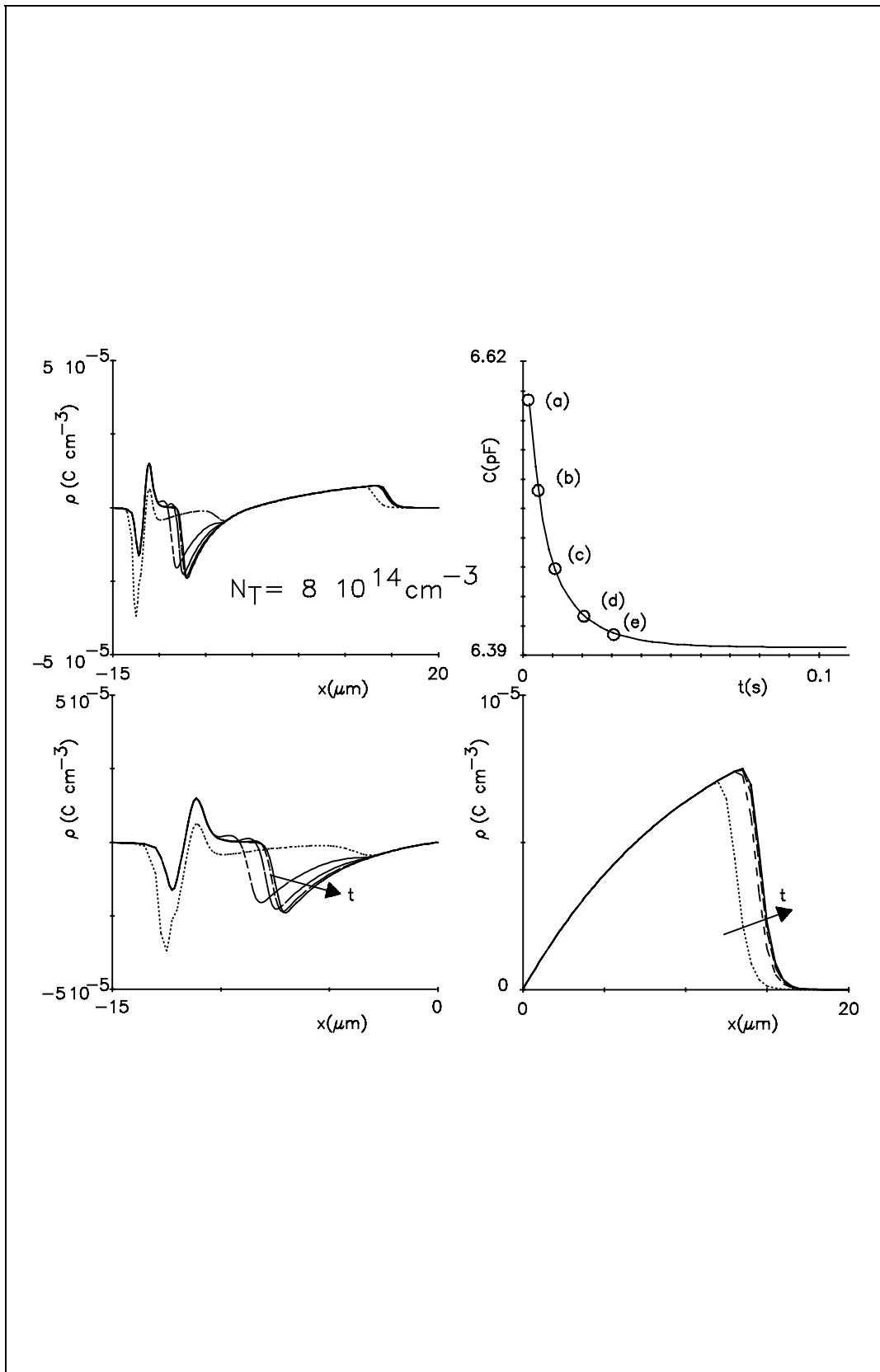
En capítulos posteriores mostraremos transitorios de capacidad medidos sobre muestras reales, en este vamos a adelantar la forma que van a adquirir. Para ello se van a simular tres correspondientes a la misma temperatura, 166 K, pero para muestras con diferente concentración de centros profundos de manera que podamos analizar su influencia en estos procesos de relajación, al igual que se hizo en situaciones estáticas. En las figuras 19, 20 y 21 se representan los transitorios simulados para tres



**Figura 19.** Evolución de la zona de carga espacial y la carga en un transitorio isotérmico de capacidad para muestras poco dopadas.  $T=166\text{ K}$ .



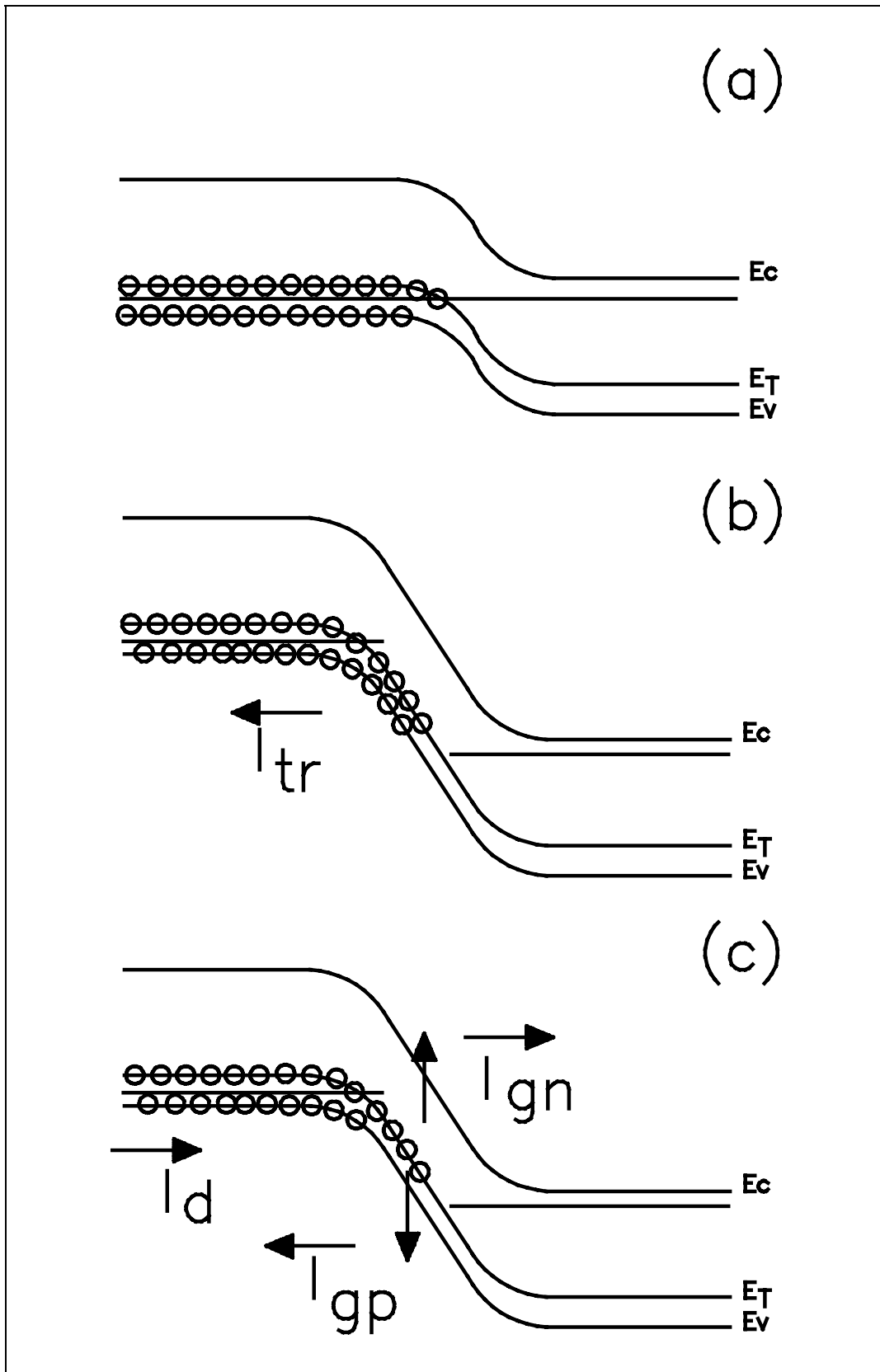
**Figura 20.** Evolución de la zona de carga espacial y la carga en un transitorio isotérmico de capacidad para muestras medianamente dopadas.  $T=166\text{ K}$ .



**Figura 21.** Evolución de la zona de carga espacial y la carga en un transitorio isotérmico de capacidad para muestras muy dopadas.  $T=166 \text{ K}$ .

concentraciones distintas de impurezas  $N_T$ . Sobre ellos se marcan con círculos cinco puntos del transitorio para los cuales se ha calculado la distribución de carga neta en la unión en ese instante, distribución que se representa en las mismas figuras a lo largo de toda la unión (superior izquierda) y en menor escala para las zonas P y N por separado (parte inferior). Estos transitorios son el resultado de aplicar la siguiente secuencia de tensiones a la muestra: en primer lugar se somete a la muestra a una tensión inversa de 0.2 V, se espera que la muestra alcance su estado estacionario, a la vez que se considera el tiempo de captura suficientemente largo, en segundo lugar sometemos a la muestra a una tensión inversa de 9.5 V y se deja evolucionar hacia el equilibrio dejando emitir a los centros con el coeficiente de emisión correspondiente a la temperatura del proceso; en determinados instantes de tiempo se recuperan las distribuciones de carga neta en la unión.

A 166 K el nivel que va a influir tanto en los cálculos, por el grado de ionización que presenta, como posteriormente en las experiencias por la relación coeficiente de emisión-tiempo de respuesta de los aparatos es el nivel  $E_{T2}$ , el que bajo pulsos de mayoritarios emite en la zona P. Por su carácter donador al aplicar una tensión inversa próxima a cero voltios los centros se van a llenar de huecos desde el cruce del nivel de Fermi con el de impurezas hacia la zona neutra P (figura 22a). Al aplicar una tensión inversa elevada se inicia un proceso de relajación que consta de dos transitorios, uno rápido y otro más lento. El transitorio rápido se produce tan pronto se deja de aplicar la perturbación al sistema. Al aparecer de nuevo el campo eléctrico en la zona de carga espacial, los portadores mayoritarios introducidos anteriormente por la propia perturbación son barridos hacia afuera de la zona. La duración de este transitorio suele ser del orden de  $10^{-11}$  s; algunas veces suele ser mayor si la corriente de la unión viene limitada por el circuito externo. El transitorio lento es debido a la emisión de los portadores capturados por el nivel profundo durante la perturbación. Consta de dos componentes: la componente de generación de electrones y/o huecos y la corriente de

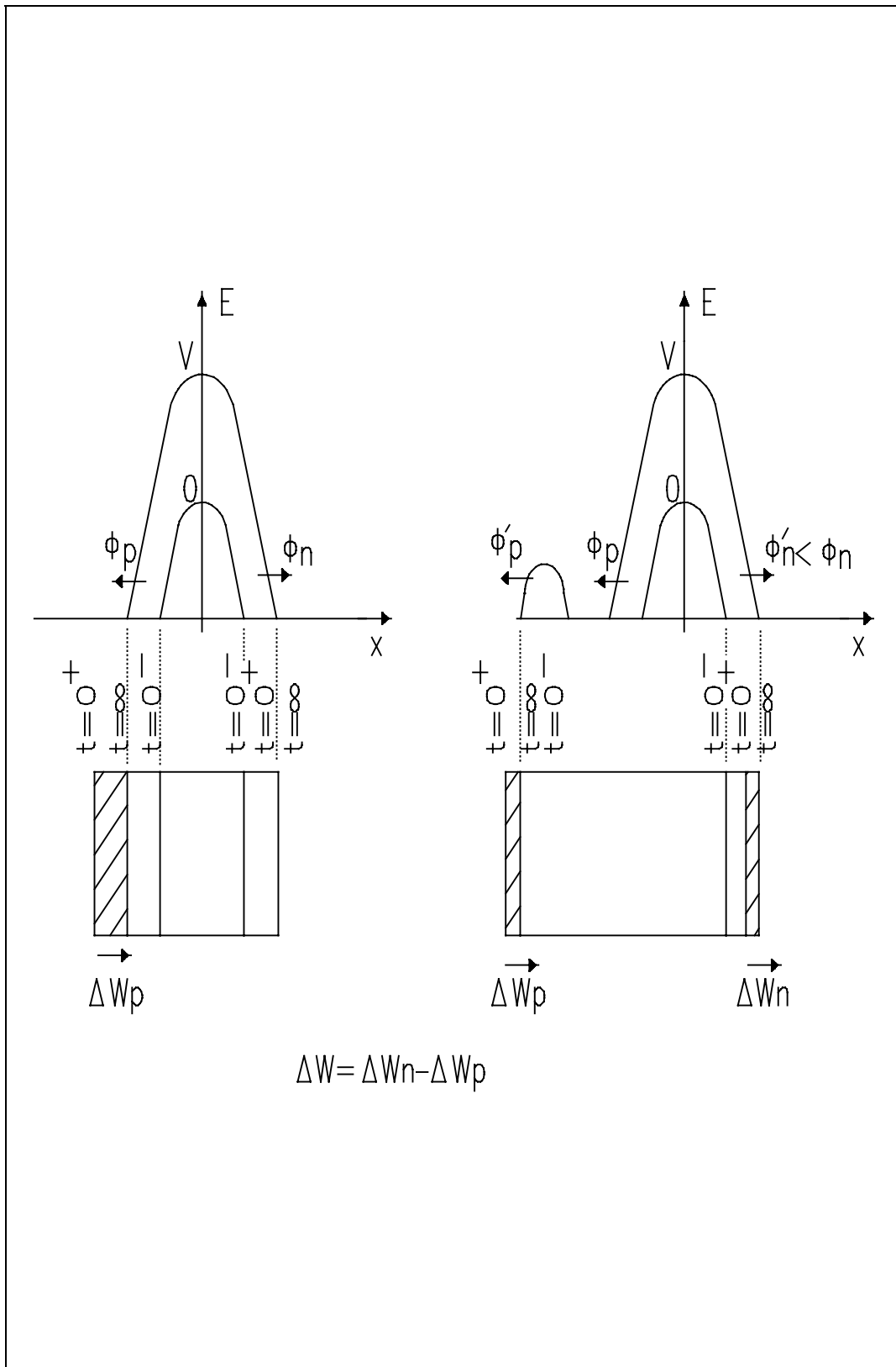


**Figura 22.** Componentes de la corriente a través de una unión PN.  $I_{tr}$  transitorio rápido.  $I_g$  corriente de generación.  $I_d$  corriente de desplazamiento.

desplazamiento debido a las cargas inducidas en las regiones cuasineutras por la variación de la anchura de la zona de carga espacial, provocada a su vez por la emisión de los portadores. En la figura 22 se muestran las dos componentes para una unión PN y un nivel donador situado en la mitad inferior de la banda prohibida. Para que en cualquier instante de tiempo se siga manteniendo la neutralidad de carga de la muestra, si hay emisión de huecos desde los centros en el interior de la zona de carga espacial,  $I_{gp}$ , deberá haber un flujo de huecos desde la zona neutra hacia el interior de la zona de depleción,  $I_d$ , haciendo que esta disminuya en anchura. Una disminución del ancho de la zona de carga espacial se traduce en un incremento de la capacidad de la unión proporcionando un transitorio creciente. Una posible aunque menos probable emisión de electrones desde este centro en la zona N implicaría la variación del extremo de la zona de carga espacial en esta región. Si la condición de neutralidad eléctrica no se cumpliera parcialmente en la zona P de la unión, en toda la estructura sí se debe cumplir y por tanto habría una variación de carga igual y de sentido contrario en la región N. Un exceso de carga positiva en la zona P no compensada por negativa en esa misma región repercutiría en un incremento igual pero de carga negativa en la zona N, el mecanismo para crearla sería un aumento de la anchura de la zona de depleción de la región N. El caso opuesto, es decir un incremento neto de carga negativa en la zona P provocaría uno igual de positiva en la región N, disminuyendo la zona de carga espacial en dicha región.

El comportamiento teórico de las muestras que se están analizando se muestra en la figura 23. En ella se esquematizan dos situaciones correspondientes a muestras con poca y elevada concentración de centros profundos. Se analiza únicamente un nivel, el situado en la mitad inferior de la banda prohibida con carácter donador. Se representa el campo eléctrico para dos polarizaciones inversas, 0 y V voltios. Debajo de esta representación se muestra la zona de carga espacial para las tres situaciones extremas:  $t=0^-$ , la unión está polarizada a cero voltios,  $t=0^+$ , se aplica la tensión inversa





**Figura 23.** Cambio de la carga en los extremos de la zona de carga espacial debido a la emisión del nivel  $E_{T2}$  para muestras poco y muy impurificadas con platino.

V voltios pero el nivel no ha emitido todavía y  $t=\infty$ , cuando se ha alcanzado el estado estacionario.

Para la muestra menos dopada con impurezas profundas al aumentar la tensión inversa de polarización aumenta el campo eléctrico expulsando los portadores libres de los extremos de la zona de carga espacial. Como en la zona P los niveles no han emitido inicialmente, la zona de depleción de esta región debe extenderse más lejos de lo que se obtendría en reposo, situación que se alcanza al emitir el centro. Una variación de la carga del centro por emisión de huecos implica la variación de la anchura de la zona de carga espacial hacia el interior de la unión para que el dispositivo siga estando en estado neutro. Se ha despreciado la posible variación de la anchura de la zona de carga espacial en la región N por emisión de electrones y ajuste de la carga en esa zona. La variación total de la anchura de la zona de carga espacial será debida únicamente a la variación en la región P, decreciendo en su conjunto y por tanto proporcionando a través de un transitorio de capacidad un comportamiento creciente del mismo.

Para la muestra más dopada al aumentar la tensión inversa de polarización también aumenta el campo en  $x=0$  tendiendo a alejar los portadores libres de esta zona. Sin embargo en la región P aparece otra zona con campo eléctrico no nulo que frena al flujo de huecos hacia el exterior de manera que el número total de huecos expulsados fuera de la zona de carga espacial,  $\Phi_p'$ , será menor que en el caso de la muestra menos dopada,  $\Phi_p$ . Si la carga no se puede redistribuir en la zona P necesariamente tendrá que hacerse en la zona N, donde para compensar un flujo menor de huecos tendremos también un flujo menor de electrones hacia el contacto,  $\Phi_n$ , y por tanto una anchura de la zona de carga espacial más pequeña que en el caso anterior. A partir de la aplicación de la tensión de V voltios el nivel  $E_{T2}$  comenzará a emitir provocando una variación de la carga en el interior de la zona de carga espacial de la región P que debería ser compensada en un principio por una variación del ancho de esta zona.

Numéricamente se ha visto que la zona de carga espacial queda bloqueada en la zona P, esto se puede traducir experimentalmente en un bloqueo de las curvas de capacidad en alta frecuencia. La emisión de huecos por parte de los centros crea una carga neta negativa en la zona P que debe ser compensada por un decrecimiento de la zona de carga espacial P y un aumento de la zona de carga espacial N. La variación total del ancho de la zona de carga espacial será la suma de la variación de los dos extremos que según se ha visto uno es positivo y el otro negativo. Dependiendo de quien domine sobre el otro tendremos un incremento o una disminución de la zona de carga espacial y por tanto un decrecimiento o un crecimiento respectivamente del transitorio de capacidad.

Este estudio teórico primario se puede comprobar analizando las figuras 19 a 21. En la figura 19 se presenta un transitorio creciente correspondiente a una muestra poco dopada, el campo eléctrico para esta muestra y estas tensiones puede verse en la figura 7, no existe campo adicional fuera de la zona próxima al origen. Existe variación de la zona de carga espacial en la región P, no produciéndose prácticamente modificación de la anchura de la zona N. El resultado es que se obtiene realmente un transitorio creciente. En la figura 20 para una concentración de centros profundos mayor se observa variación en las dos regiones de la unión. Para tiempos menores domina la zona P hasta que se produce el bloqueo de la misma y entonces la variación de la región N provoca esa caída final en el transitorio de capacidad. En la figura 21 hay variación en el extremo de la zona de carga espacial P entre los tiempos que hemos marcado como (a) y (b). Sin embargo, en el interior de esta zona, la carga varía al emitir los niveles provocando un aumento considerable en el otro extremo de la zona de carga espacial y dando lugar como consecuencia un transitorio completamente decreciente.

Podemos extrapolar este resultado a transitorios isotérmicos de tensión a capacidad constante, pues presumiblemente también presentarán el mismo comportamiento que los de capacidad, ya que pueden ser explicados de la misma forma: en este

caso es la tensión la que tiene que variar para que la zona de carga espacial permanezca constante. Para cualquiera de los dos tipos de transitorios, de capacidad o de tensión, la región de depleción tiende a crecer o decrecer dependiendo de como contribuyan las zonas N y P por separado. Si es un transitorio de tensión deberá evolucionar también de acuerdo a estas tendencias.

Si de forma natural la zona de carga espacial tiende a variar en la zona P, el transitorio de tensión respondería de una determinada manera ante esta modificación para que permaneciera invariable esta región. Si por la existencia de una barrera interna se produce un bloqueo de la zona P, la condición de neutralidad haría que la zona de carga espacial variase en la región N de forma opuesta, con lo que en esta situación, la tensión externa aplicada debería responder ante este cambio de comportamiento también de forma contraria.

Los transitorios isotérmicos en los que previsiblemente no se observe ningún fenómeno extraño son los de capacidad con inyección de minoritarios debidos a la emisión del nivel  $E_{T2}$  en la zona N . La variación de la carga en este centro provoca un aumento de la zona de carga espacial en la región N (ahí no existe bloqueo) obteniéndose un transitorio decreciente; y en términos de la DLTS se debe obtener un pico negativo.

## 2. MONTAJE EXPERIMENTAL. CARACTERIZACIÓN PRIMARIA DE LAS MUESTRAS.

### 2.1 INTRODUCCIÓN

Planteada una situación teórica de la unión, para estudiar, ya de forma experimental, el comportamiento eléctrico de semiconductores fuertemente compensados con centros profundos se han utilizado uniones  $P^+NN^+$  fabricadas conjuntamente en FAGOR y en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid.

Las uniones PN son el constituyente esencial de la mayoría de los dispositivos electrónicos. Es por ello que una descripción completa de esta estructura básica ayuda a comprender la conducta de elementos más complejos. El objetivo que nos marcamos al disponer de estas muestras fue estudiar por un lado, uniones que se consideran abruptas y en la realidad no lo son, y por otro lado observar la influencia de niveles profundos sobre este tipo de uniones. Dentro del proceso de fabricación cabe destacar dos etapas fundamentales que se ajustan a estas dos pretensiones: 1.- obtención de la unión y 2.- difusión de impurezas con distintas condiciones de temperatura; con ello se dispone de una serie de muestras con diferentes concentraciones de centros profundos.

En este capítulo se describen los diferentes pasos del proceso tecnológico que ha sufrido las muestras. Se realiza además una caracterización primaria con el fin de obtener información sobre un conjunto de parámetros básicos, cuyo conocimiento es necesario para abordar un estudio posterior. Como primer parámetro importante presentaremos el perfil de impurezas básicas resultante de este proceso de fabricación.

## 2.2 PROCESO TECNOLÓGICO

Las obleas utilizadas para la preparación de los diodos fueron de silicio impurificado con fósforo con una resistividad comprendida entre 37.5 y 62.5  $\Omega \cdot \text{cm}$ , correspondiente a una concentración de fósforo de  $1.11 \cdot 10^{14}$  y  $6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  respectivamente.

1) Sobre estos sustratos se efectuaron las difusiones laterales  $\text{P}^+$  y posteriormente  $\text{N}^+$  con las impurezas respectivas de boro y fósforo, a una temperatura de unos 1280 °C y durante un periodo de 20 horas cada una de ellas.

Con esto datos se simuló el perfil de impurezas por SUPREM resultando una estructura  $\text{P}^+\text{N} \text{N}^+$  como la mostrada en las figuras 1 y 2.

2) 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  $\text{N}^+$  mediante pintado.
- Secado a 300 °C durante 15 minutos.
- Difusión de Platino en horno de tubo abierto en atmósfera inerte ( $\text{N}_2$ ) a las temperaturas y tiempos indicados en la tabla 1.

### 2.2.1 DISTRIBUCIÓN DE IMPUREZAS BÁSICAS RESULTANTE

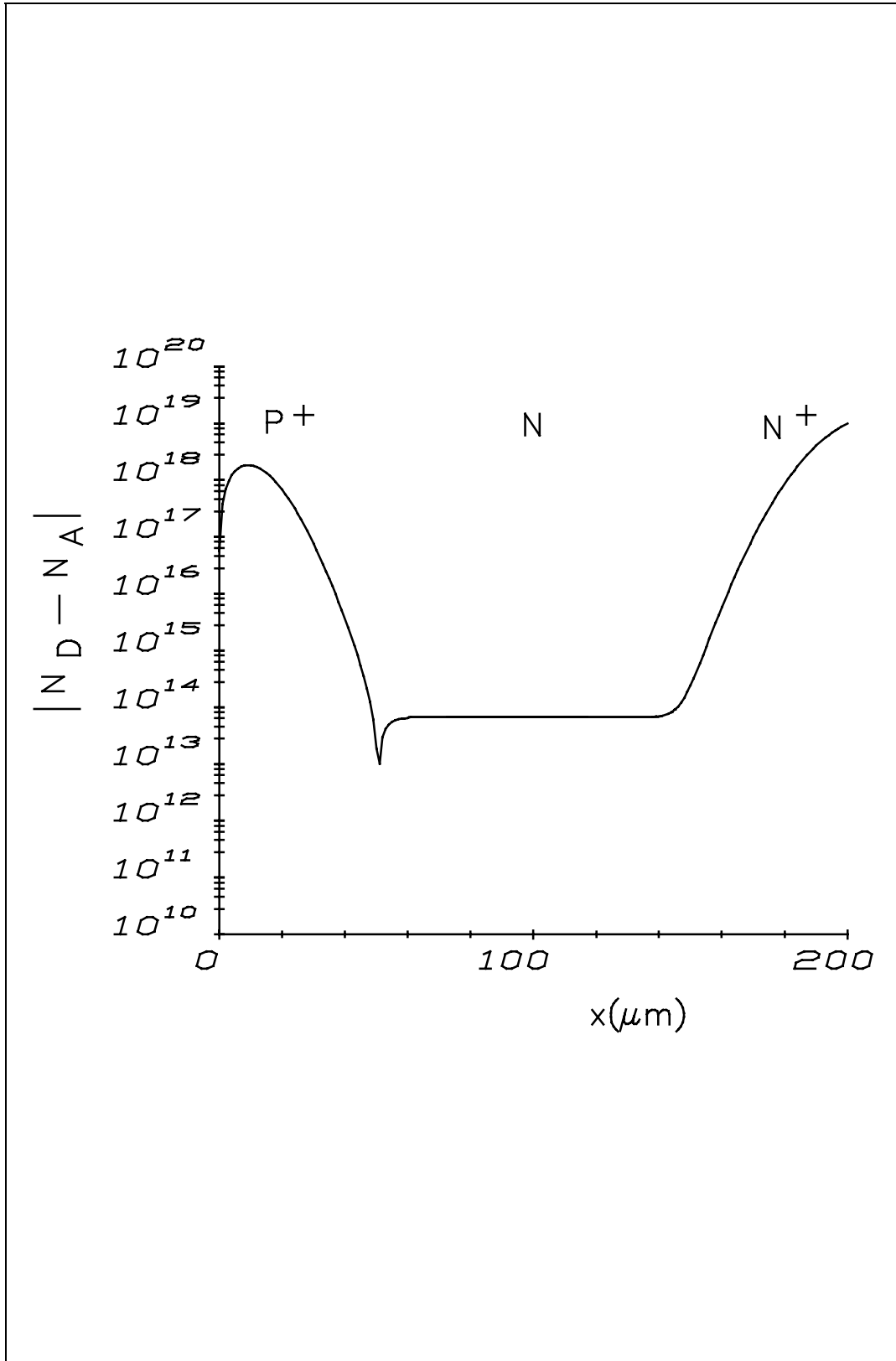
El perfil de impurezas de boro depende fundamentalmente de dos pasos: la introducción en primer lugar de los átomos de esta impureza desde la superficie del silicio durante 20 horas manteniendo la temperatura a 1280°C y otra posterior redifusión de este elemento durante el mismo periodo de tiempo y a la misma temperatura mientras se introduce el fósforo en el otro lateral de la oblea. La redistribución de los átomos de

| Referencia               | T (°C) | t (m)     |
|--------------------------|--------|-----------|
| Pt 606 N <sup>+</sup> 14 | 850    | 1+120+1/2 |
| Pt 609 N <sup>+</sup> 14 | 860    | 1+120+1/2 |
| Pt 610 N <sup>+</sup> 14 | 870    | 1+120+1/2 |
| Pt 617 N <sup>+</sup>    | 880    | 1+120+1/2 |
| Pt 621 N <sup>+</sup> 14 | 890    | 1+120+1/2 |
| Pt 622 N <sup>+</sup> 14 | 900    | 1+120+1/2 |
| Pt 628 N <sup>+</sup> 14 | 910    | 1+120+1/2 |
| Pt 630 N <sup>+</sup> 14 | 920    | 1+120+1/2 |

**Tabla 1**

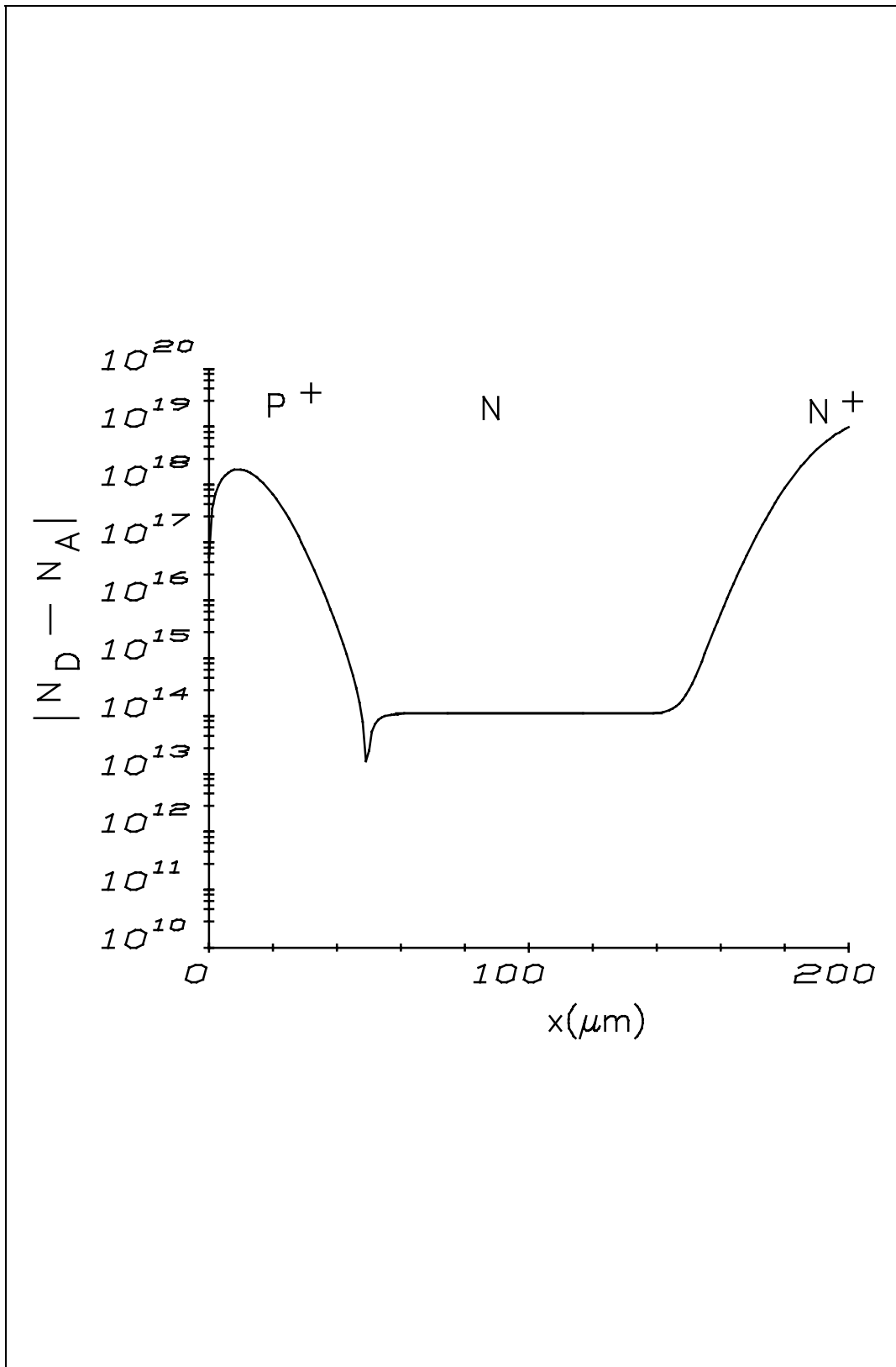
boro durante la difusión de platino apenas tendrá efecto ya que se efectúa durante tiempos menores y a temperaturas más bajas.

Con el fin de obtener el perfil esperado de impurezas básicas de nuestras muestras, hemos realizado una simulación con SUPREM de todos los pasos del proceso tecnológico incluyendo la difusión de platino en las condiciones más extremas de temperatura y tiempo. Como se había previsto, no se obtuvo ninguna variación con respecto a los perfiles simulados antes de esta difusión; en las figuras 1 y 2 se representan la distribución de boro y fósforo al final del proceso para dos sustratos diferentes y en la figura 3 se muestra con más detalle la unión resultante para estos dos casos, se ha disminuido la escala pues en esta región es previsible que se produzca la variación de la zona de carga espacial cuando sometamos a las muestras a la acción de campos eléctricos externos.

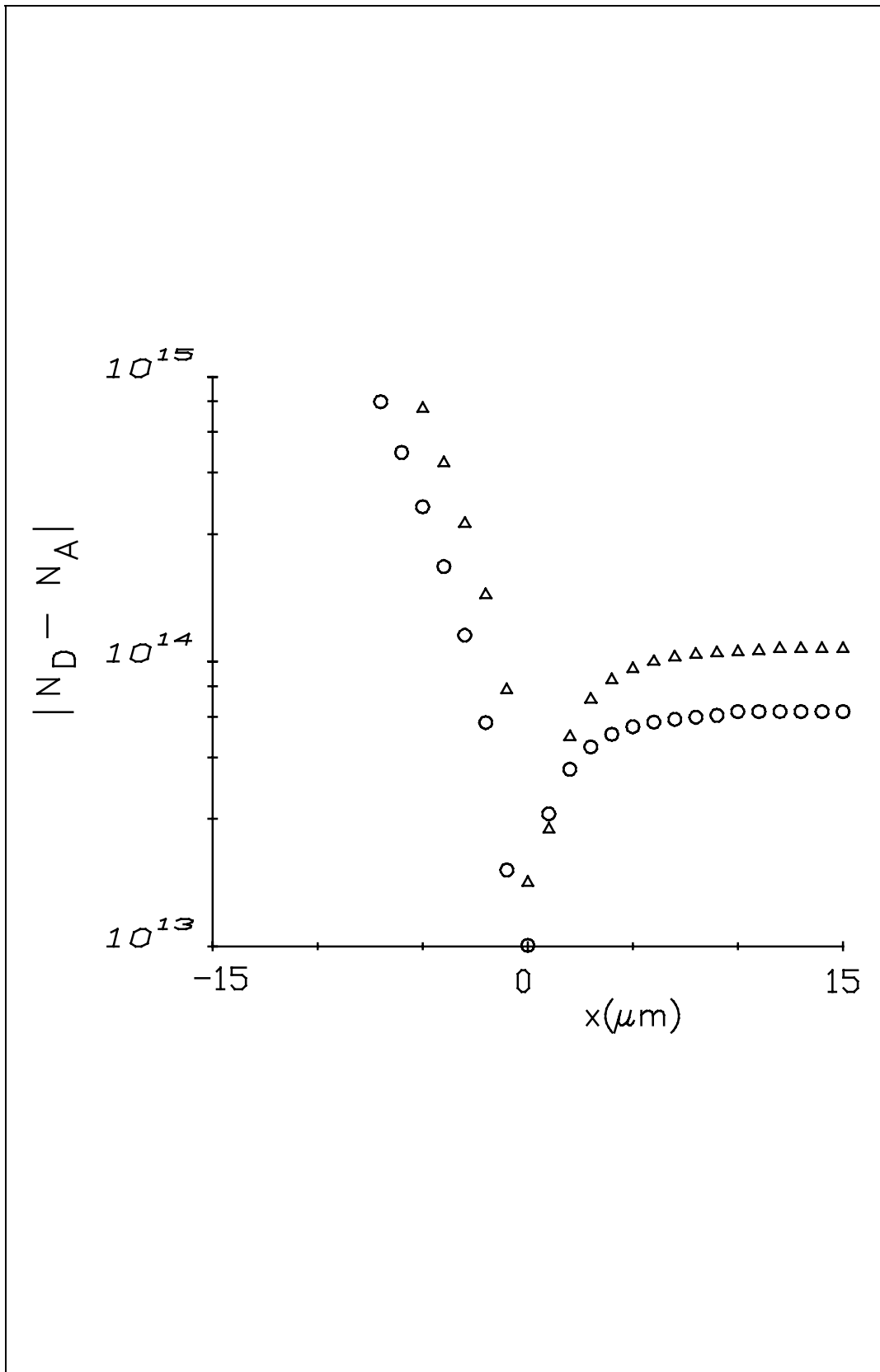


**Figura 1.** Estructura  $P^+NN^+$  obtenida mediante programa SUPREM. Difusiones laterales de boro y fósforo sobre sustrato de silicio tipo N de resistividad 62.5  $\Omega\text{cm}$ .





**Figura 2.** Estructura  $P^+NN^+$  obtenida mediante programa SUPREM. Difusiones laterales de boro y fósforo sobre sustrato de silicio tipo N de resistividad  $37.5 \Omega \text{ cm}$ .



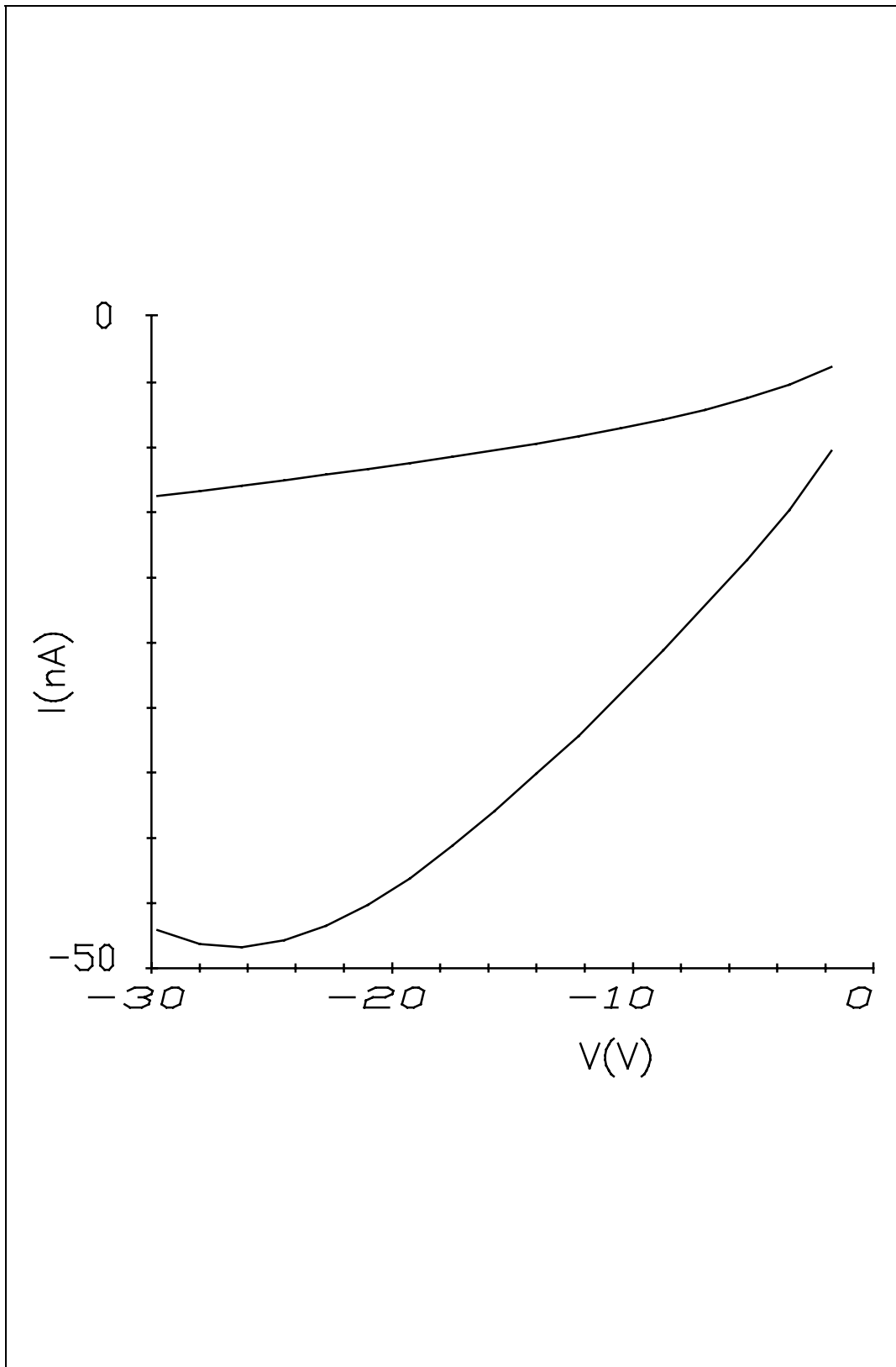
**Figura 3.** Detalle del perfil de impurezas correspondiente a la unión  $P^+N$ . (o) sustrato de resistividad  $\rho = 62.5 \Omega \text{ cm}$ , ( $\Delta$ ) sustrato de resistividad  $\rho = 37.5 \Omega \text{ cm}$ .

## 2.3 CARACTERIZACIÓN EN CORRIENTE. I-V

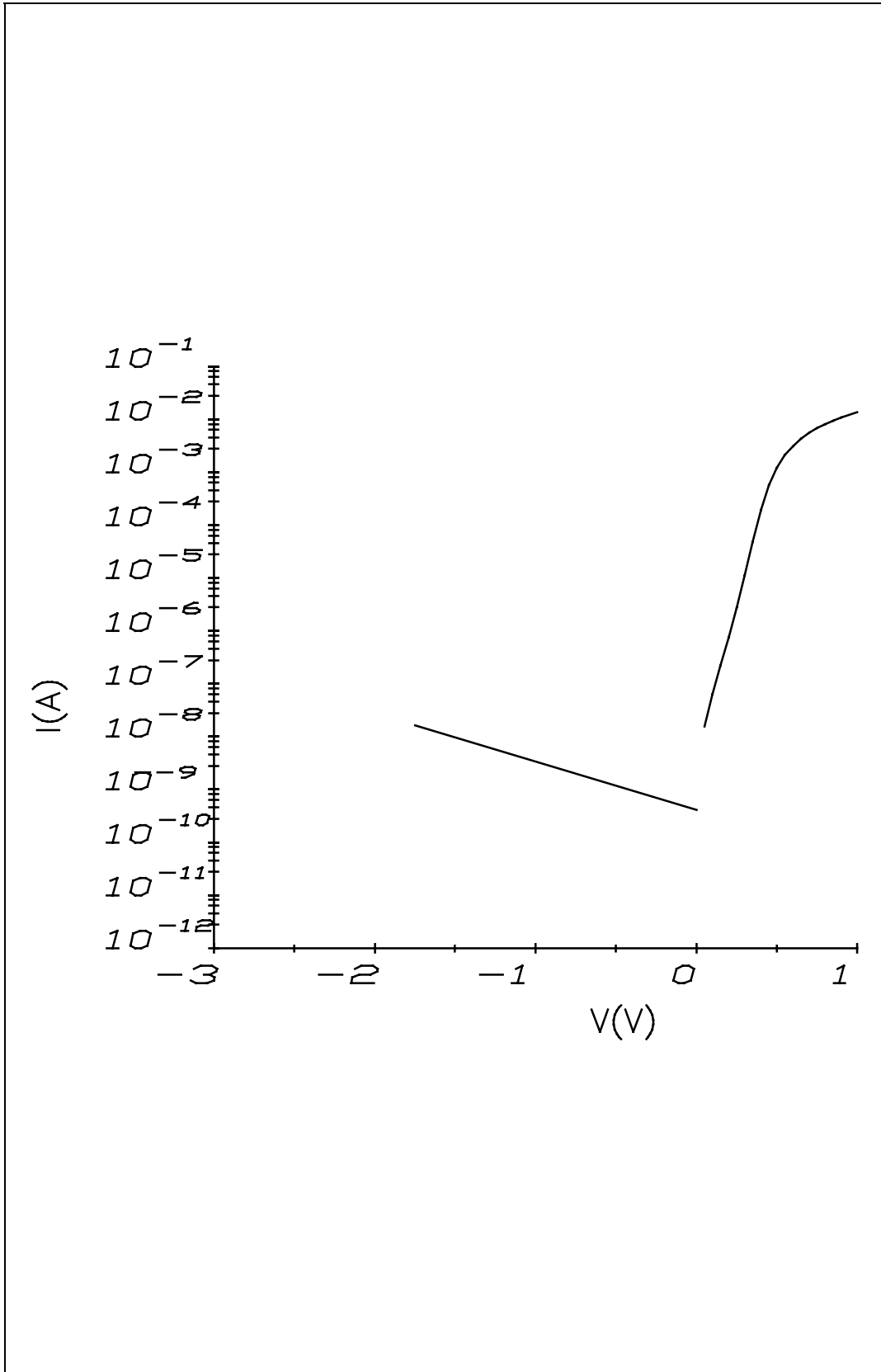
El conjunto de muestras obtenidas fueron caracterizadas en primer lugar mediante medidas corriente-tensión haciendo uso de un analizador de parámetros Hewlett-Packard 4145B. La corriente inversa no se llega a saturar aumentando ligeramente con la tensión aplicada. Se eligieron de cada serie las muestras que mejor comportamiento mostraban. Los diodos presentan una sección cuadrada de área  $2 \text{ mm}^2$ ; el corte de la oblea para separar las diferentes muestras y los contactos eléctricos posteriores pueden dar lugar a fugas de corriente laterales o a resistencias en serie respectivamente.

En los diodos de buena calidad, la corriente inversa a la temperatura ambiente debe ser inferior al  $\mu\text{A}$  y la corriente directa debe alcanzar varios mA bajo una tensión inferior al voltio. En general el diodo debe presentar una variación en su resistencia entre 4 ó 5 órdenes de magnitud al pasar de inversa a directa.

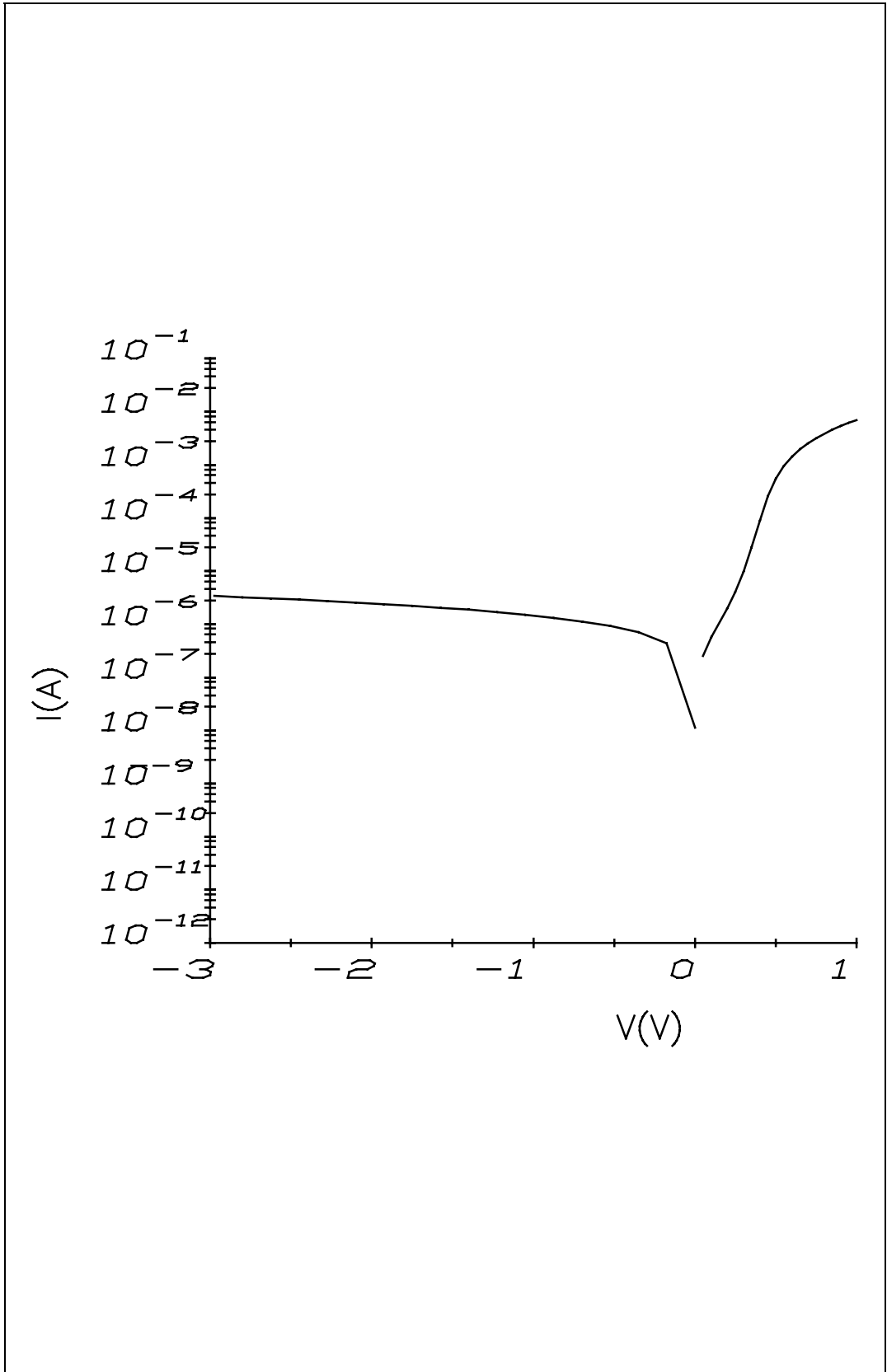
En la figura 4 se muestra la representación de la corriente en función de la tensión inversa aplicada para dos muestras de la misma oblea. Se observa que para la muestra buena esta corriente no supera el valor de  $15 \text{ nA}$ , mientras que para la mala se observa una conductancia más elevada. La figura 5 representa en escala logarítmica la curva I-V para la muestra buena; se puede comprobar la variación de resistencia al pasar de directa a inversa. En la figura 6 tomada para una muestra con fugas, se observa el valor más elevado de la corriente en inverso.



**Figura 4.** Característica corriente tensión bajo polarización inversa para dos muestras de la misma serie.



**Figura 5.** Característica corriente tensión.



**Figura 6.** Característica corriente tensión. Muestra con fugas elevadas.

## **2.4 CARACTERIZACIÓN MEDIANTE TÉCNICAS CAPACITIVAS.**

Los métodos capacitivos son no destructivos, fáciles de poner en práctica, proporcionan resultados rápidos y están bien establecidos al igual que la teoría sobre la que se apoyan. Utilizaremos dos de estas técnicas para obtener un análisis rápido de nuestras muestras. Nos interesa en primer lugar conocer el perfil de impurezas básicas, que aunque obtenido por simulación, es necesario corroborarlo experimentalmente; para ello tomaremos medidas de capacidad en alta frecuencia adquiridas a temperatura ambiente para toda las series de muestras. También es básico el conocimiento del número de niveles energéticos aparecidos en la banda prohibida del silicio por su impurificación con platino; para ello acudiremos a la DLTS aplicada a transitorios de capacidad con inyección y sin inyección de minoritarios, tomada sobre muestras menos dopadas con impurezas profundas pues ahí es donde aseguraremos los resultados de esta técnica [5].

### **2.4.1 CARACTERÍSTICAS C(V). DETERMINACIÓN DE PERFILES DE CONCENTRACIÓN.**

La capacidad en alta frecuencia de la muestra situada en el criostato es medida por un capacímetro BOONTON 72BD (1 MHz de frecuencia controlada por cristal y 15 mV r.m.s. para la señal de medida). La tensión de polarización aplicada a la muestra la suministra una rampa de tensión variable entre 0 y 15 V. La salida puede ser amplificada hasta el rango 0-40 V a través de una fuente regulada de tensión KEPCO.

El método más general para calcular la concentración de impurezas poco profundas es mediante la medida del cuadrado de la inversa de la capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa aplicada V [9], a temperaturas lo suficien-

temente altas como para que las constantes de tiempo de emisión sean mucho menores que los tiempos de medida, de tal forma que los centros profundos no se encuentren en un proceso de relajación térmica. En este método se utiliza la aproximación de vaciamiento. Para el caso de una unión abrupta asimétrica, tomada como la aproximación inicial más sencilla a partir de los perfiles proporcionados por SUPREM, la representación de  $1/C^2$  en función de  $V$  sería una línea recta donde el corte con el eje de abscisas proporcionaría el potencial barrera de la unión y la pendiente la concentración de impurezas en el sustrato. En el caso de tener un perfil gradual lineal, que sería también otra aproximación de la distribución de impurezas, pero esta vez en una región de la muestra localizada muy próxima a la unión, la representación  $1/C^3$  respecto a  $V$  es la que se comporta linealmente.

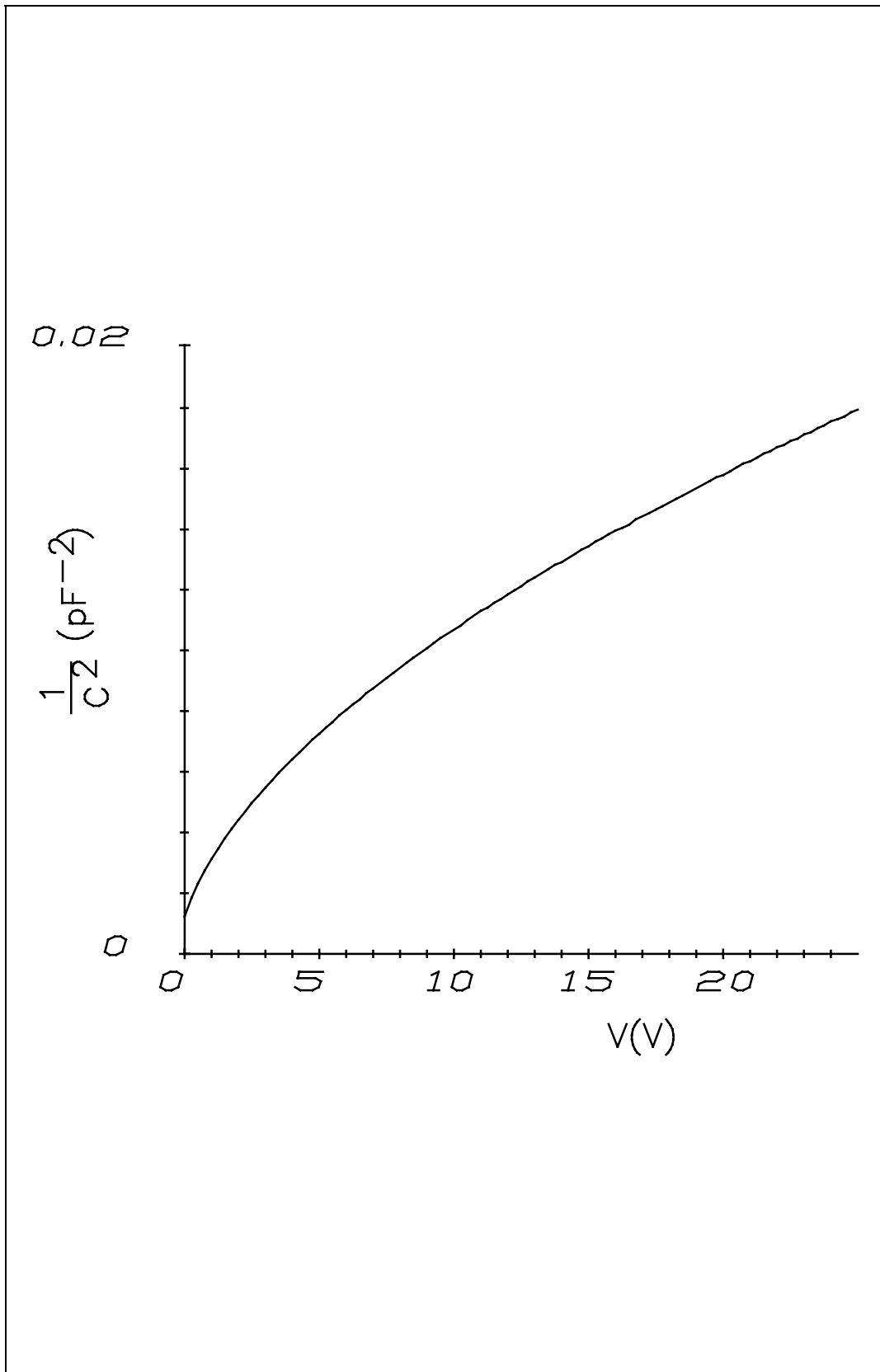
En las figuras 7 y 8 se representan  $1/C^2$  y  $1/C^3$  en función de  $V$ . Como se puede observar claramente ninguna de las representaciones es lineal; nos encontramos por tanto en una situación intermedia entre unión abrupta y unión lineal, con un perfil gradual de pendiente variable con la distancia.

La conclusión principal de este tratamiento es que nos encontramos con una unión gradual y por tanto debemos considerar los dos lados de la unión y no sólo el lado N por estar menos dopado. La respuesta de la muestra a una excitación que provoque una variación en la zona de carga espacial será una señal de la que a priori será imposible determinar que parte de ella proviene del lado N y cual del lado P.

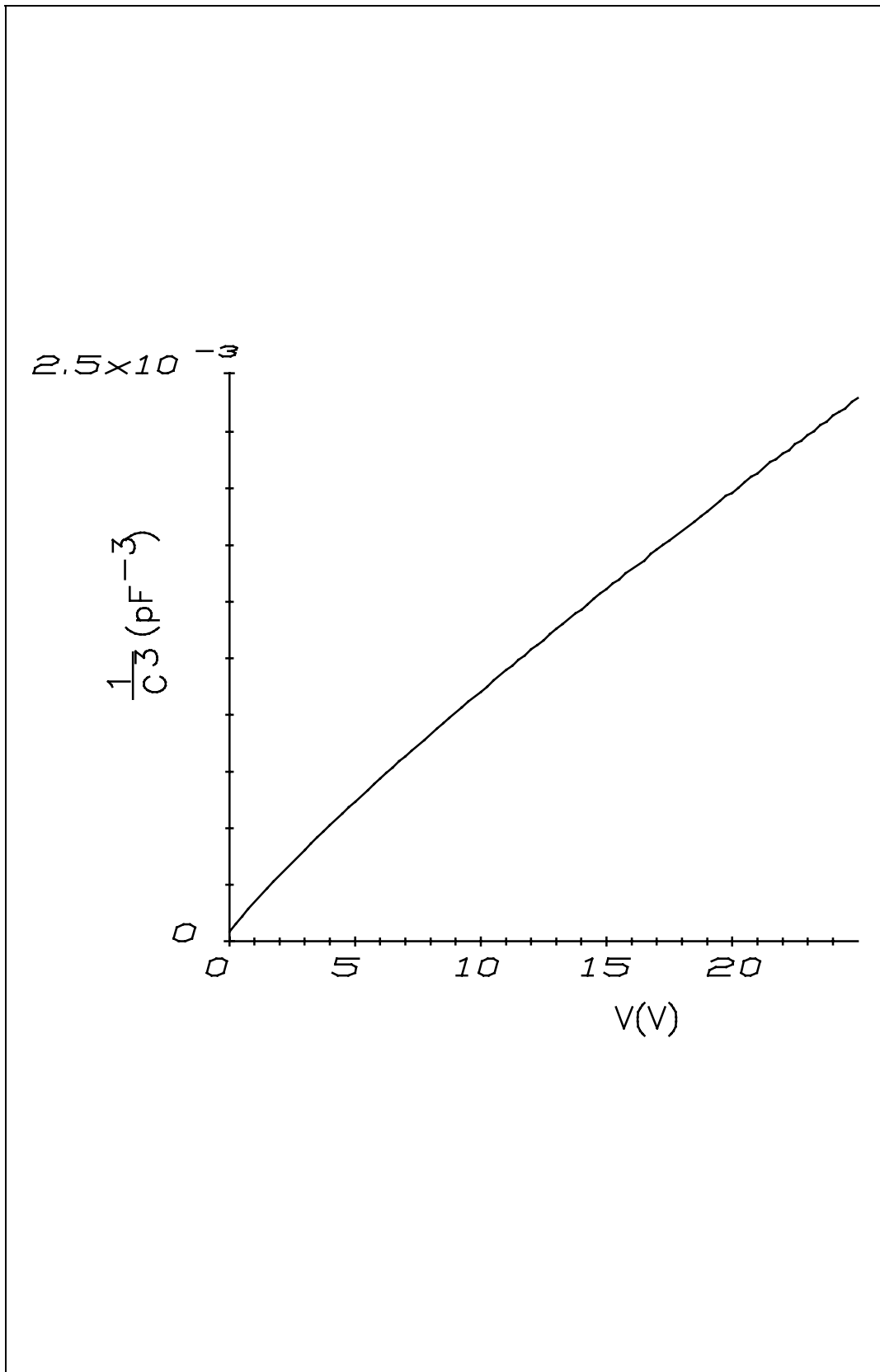
#### **2.4.2 APLICACIÓN DE LAS TÉCNICAS CAPACITIVAS PARA LA OBTENCIÓN DE PERFILES A UNA CURVA C-V TEÓRICA.**

Experimentalmente hemos comprobado la invalidez de las técnicas capacitivas clásicas para calcular el perfil de impurezas a nuestras muestras. Existen dos





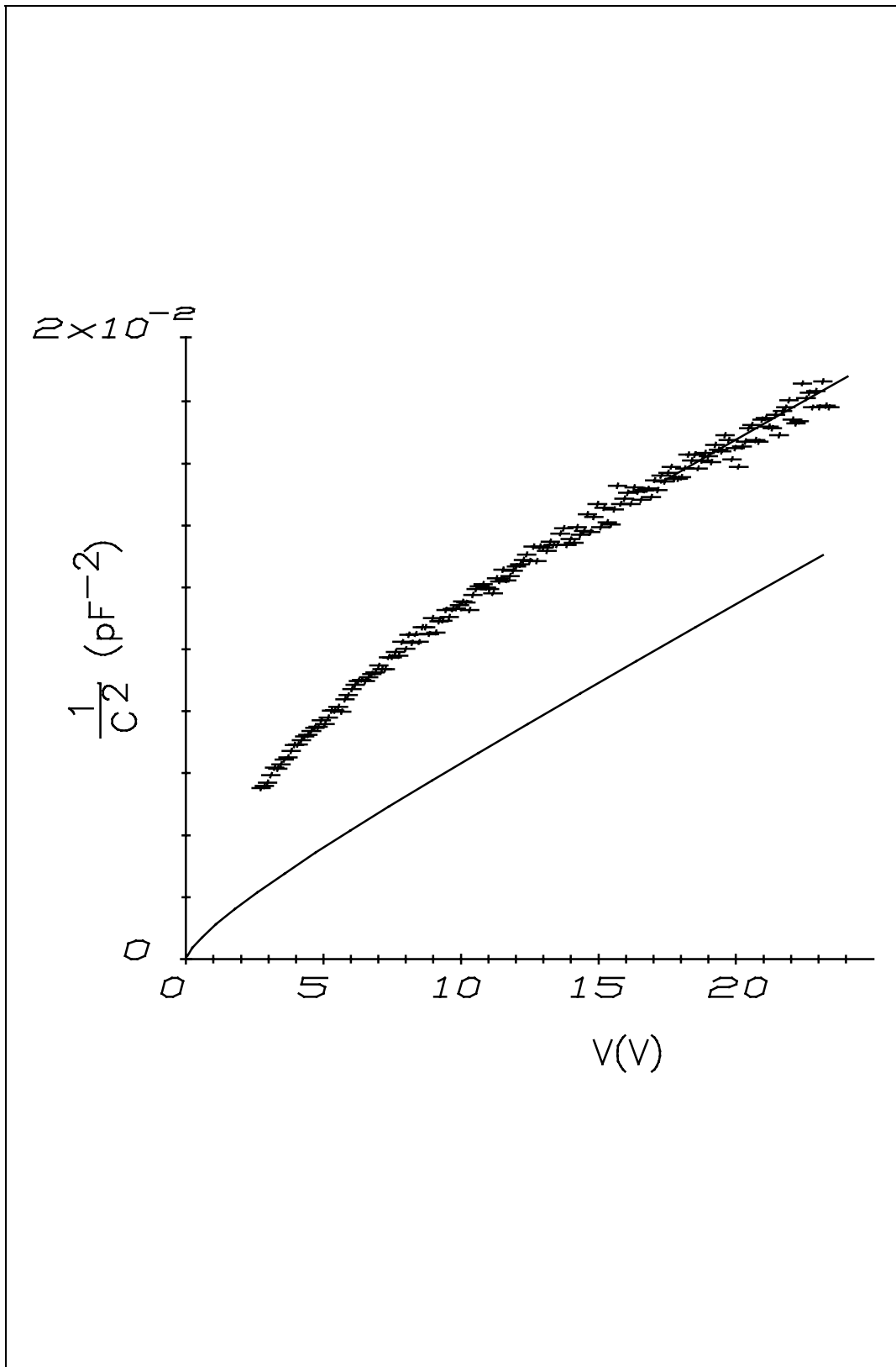
**Figura 7.** Representación  $1/C^2$  en función de la tensión inversa aplicada a la muestra. Temperatura ambiente.



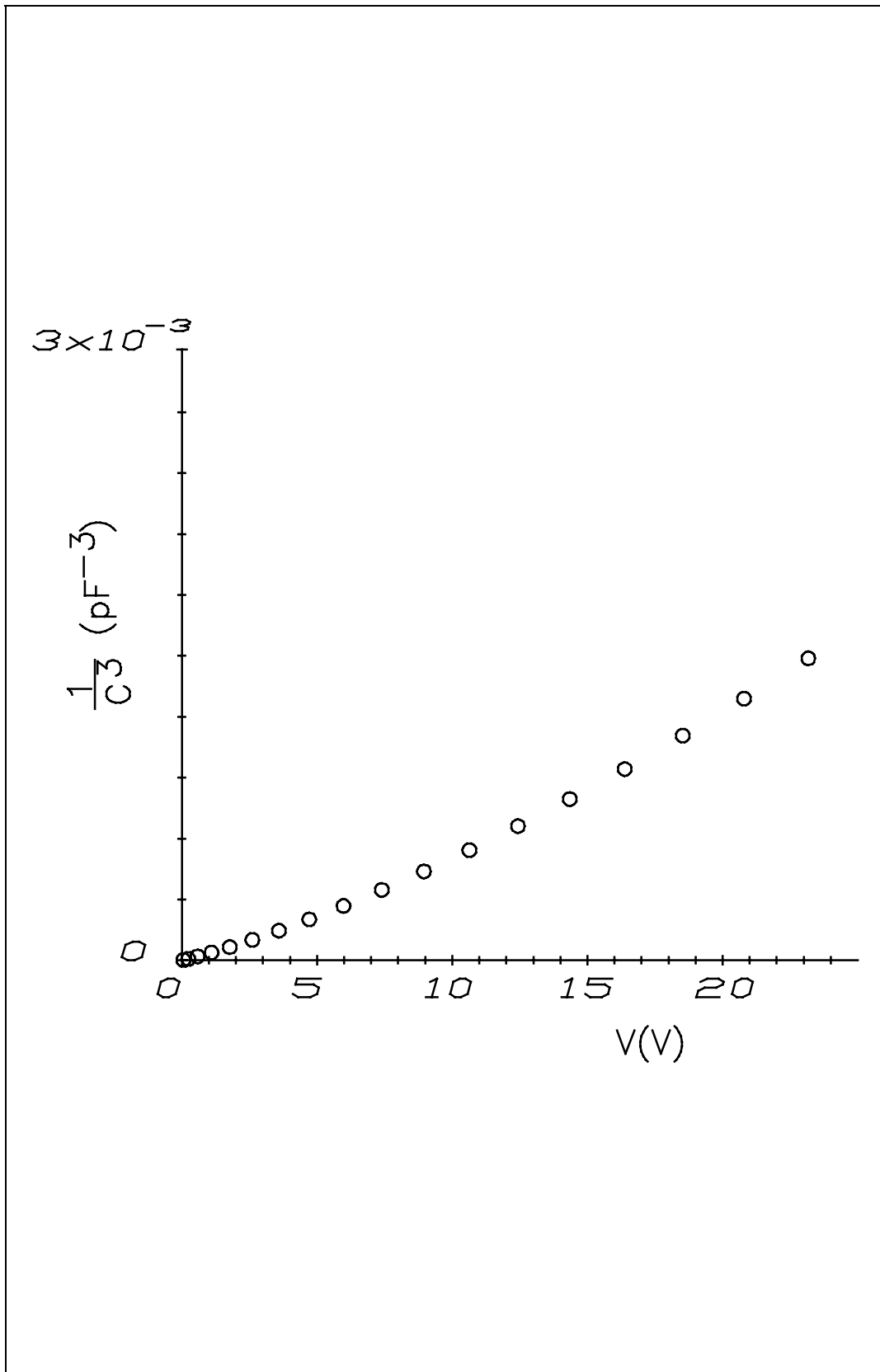
**Figura 8.** Representación  $1/C^3$  en función de la tensión inversa aplicada a la muestra. Temperatura ambiente.

factores que pueden influir en la interpretación de estos resultados: por un lado, la existencia de centros profundos que enmascaran al propio perfil de impurezas básicas y por otro el considerar de forma incorrecta a nuestra estructura como una unión abrupta P<sup>+</sup>N. Para comprobarlo vamos a acudir al perfil obtenido por SUPREM, considerando en primer lugar una unión teórica con este perfil para sus impurezas básicas pero en la que no hay presencia de centros profundos. Con el método para la obtención de la capacidad en alta frecuencia desarrollado en el primer capítulo calcularemos una curva C-V teórica. Con esta curva intentaremos recuperar de nuevo el perfil inicial, para lo que se seguirá el mismo método que para las curvas de capacidad experimentales, es decir, se considerará a la estructura como abrupta y asimétrica, y por lo tanto el perfil que obtendremos será el de la zona N pues la P se considera fuertemente dopada.

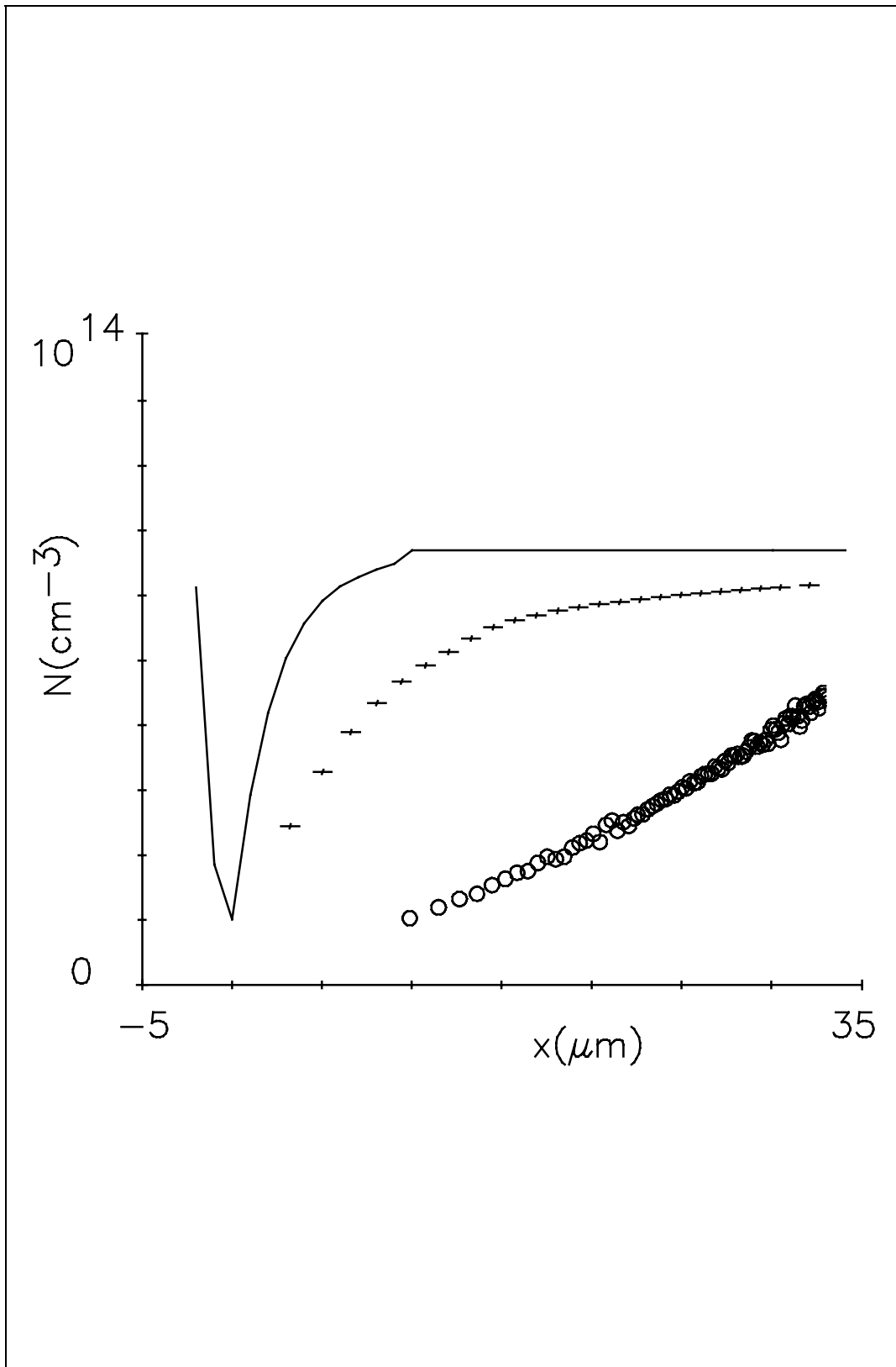
En las figuras 9 y 10 se muestran las representaciones respectivas de  $1/C^2$  y  $1/C^3$  en función de la tensión inversa para las curvas de capacidad teóricas obtenidas a partir de los perfiles de SUPREM. Para el rango de tensiones aplicado la zona de carga espacial no se restringe a zonas próximas a la unión, de manera que se pudiera considerar al perfil como lineal, ya que la representación  $1/C^3$  no lo es, ni tampoco se extiende a zonas alejadas de ella en la que el perfil se pudiera considerar constante, ya que la representación  $1/C^2$  tampoco es lineal. Se llega a la conclusión definitiva, una vez estudiadas curvas C-V experimentales y teóricas, que estas muestras, con un perfil como el que se ha analizado, no se pueden aproximar ni como graduales lineales ni como abruptas asimétricas; tendremos por tanto que acudir a métodos más sofisticados que los ya conocidos para este tipo de uniones. La figura 11 nos reafirma en este comentario: comparamos en ella el perfil de SUPREM (continua) y el calculado a partir de la curva de capacidad teórica, suponiendo la región P fuertemente dopada en comparación con la N (+). Tiende a recuperarse el perfil inicial pero con una ligera diferencia, ya que parte de la zona de carga espacial cae en la región P y no toda en la N como se supone en el modelo. El error se minimiza cuando se apliquen tensiones elevadas.



**Figura 9.** Representación  $1/C^2$  en función de la tensión inversa aplicada. Línea continua: capacidad simulada a partir de perfil de SUPREM; discontinua: curva experimental.



**Figura 10.** Representación  $1/C^3$  en función de la tensión inversa aplicada. La capacidad ha sido simulada a partir de perfil de SUPREM.



**Figura 11.** Línea continua: perfil de SUPREM; (+) perfil obtenido por el método de la derivada para la curva de capacidad simulada a partir del perfil de SUPREM; (o) perfil experimental, método de la derivada.

En las figuras 9 y 11 se introducen también resultados experimentales. En cualquiera de ellas existe una diferencia apreciable entre las curvas medidas y las simuladas a partir del perfil de SUPREM. El segundo de los factores que habíamos mencionado, es decir la existencia de centros profundos, debe afectar también en los resultados experimentales, aunque las muestras sobre las que hemos realizado las medidas son las menos dopadas con platino. La gran diferencia que existe entre los dos perfiles calculados por el método de la derivada para las curvas experimental y teórica tanto en valor como en forma, mostrados en la figura 11, hace pensar que aparte de no contar ya con estas técnicas C-V para determinar el perfil de impurezas tampoco el perfil que nos proporciona SUPREM en regiones próximas a la unión sea el que realmente presentan las muestras. De esta forma, una vez que se concluya con la caracterización primaria de las muestras será prioritario el conocimiento exacto de los perfiles de impurezas debiendo desarrollar otro método distinto de los conocidos hasta ahora.

Todos estos fenómenos no implican que se deseche de manera definitiva a estas técnicas, de hecho se puede observar un detalle importante en la figura 9: la coincidencia de pendientes para tensiones elevadas en la representación  $1/C^2$  en función de V. Cuando aplicamos tensiones altas la anchura de la zona de carga espacial de la unión también es grande, la concentración de electrones en el extremo de la región de transición de la zona N sí se puede considerar despreciable frente a la de huecos en la P, en ese rango de tensiones elevadas podemos por tanto concluir que la pendiente de la representación  $1/C^2$  en función de V nos proporciona el valor de la concentración de impurezas en el sustrato, la misma que la que nos da SUPREM.

A partir de las medidas de la pendiente citadas en el párrafo anterior y para las muestras bajo estudio se obtuvieron dos concentraciones de impurezas básicas en el sustrato N: para la serie Pt617N<sup>+</sup> ( $t_{\text{dif}}(\text{Pt})=880^\circ\text{C}$ )  $N_D=1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  y para el resto de las series  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  que se ajustan a los valores extremos de

resistividad que nos proporcionó el fabricante.

### **2.4.3 DETECCIÓN DE CENTROS PROFUNDOS EN LAS MUESTRAS MENOS DOPADAS CON PLATINO.**

Como se ha mencionado anteriormente las técnicas capacitivas aplicadas a la unión PN se comportan como una poderosa herramienta para la caracterización de centros profundos en semiconductores. Entre ellas la espectroscopía de transitorios de niveles profundos (DLTS) ha sido una de las más ampliamente utilizadas por cuanto nos proporcionan los principales parámetros de esos centros: energía de activación, concentración y sección eficaz de captura. Los métodos de barridos térmicos en general presentaban la ventaja de la rapidez. Sin embargo no nos va a proporcionar resultados diferentes o de mejor calidad de los que se puedan obtener a partir de una colección de transitorios isotérmicos registrados a diferentes temperaturas. Este último método era muy laborioso hace unos años por cuanto se debía seguir un procedimiento enteramente manual, pero ahora con la ayuda de sistemas automatizados, el principal inconveniente que presentaba ha dejado de serlo.

No obstante, en este apartado vamos a utilizar la ventaja que todavía posee la DLTS frente a los transitorios isotérmicos: la rapidez en la detección de centros profundos.

Recordemos en pocas palabras el principio del análisis de la DLTS. Para obtener una señal es necesario partir del nivel en estado estacionario con una polarización  $V_0$ , después se llena el nivel mediante la aplicación de una tensión  $V_1$  durante un intervalo de tiempo  $t_p$ , y finalmente se recupera la polarización inicial  $V_0$ , de manera que los portadores atrapados durante el tiempo  $t_p$  son emitidos desde el nivel a la banda con un coeficiente de emisión  $e$ . En el caso en el que la concentración de impurezas profundas,  $N_T$ , sea despreciable frente a la de poco profundas,  $N_D$ , el



transitorio de capacidad asociado a la emisión de portadores desde el nivel tiene carácter exponencial y viene gobernado por la expresión:

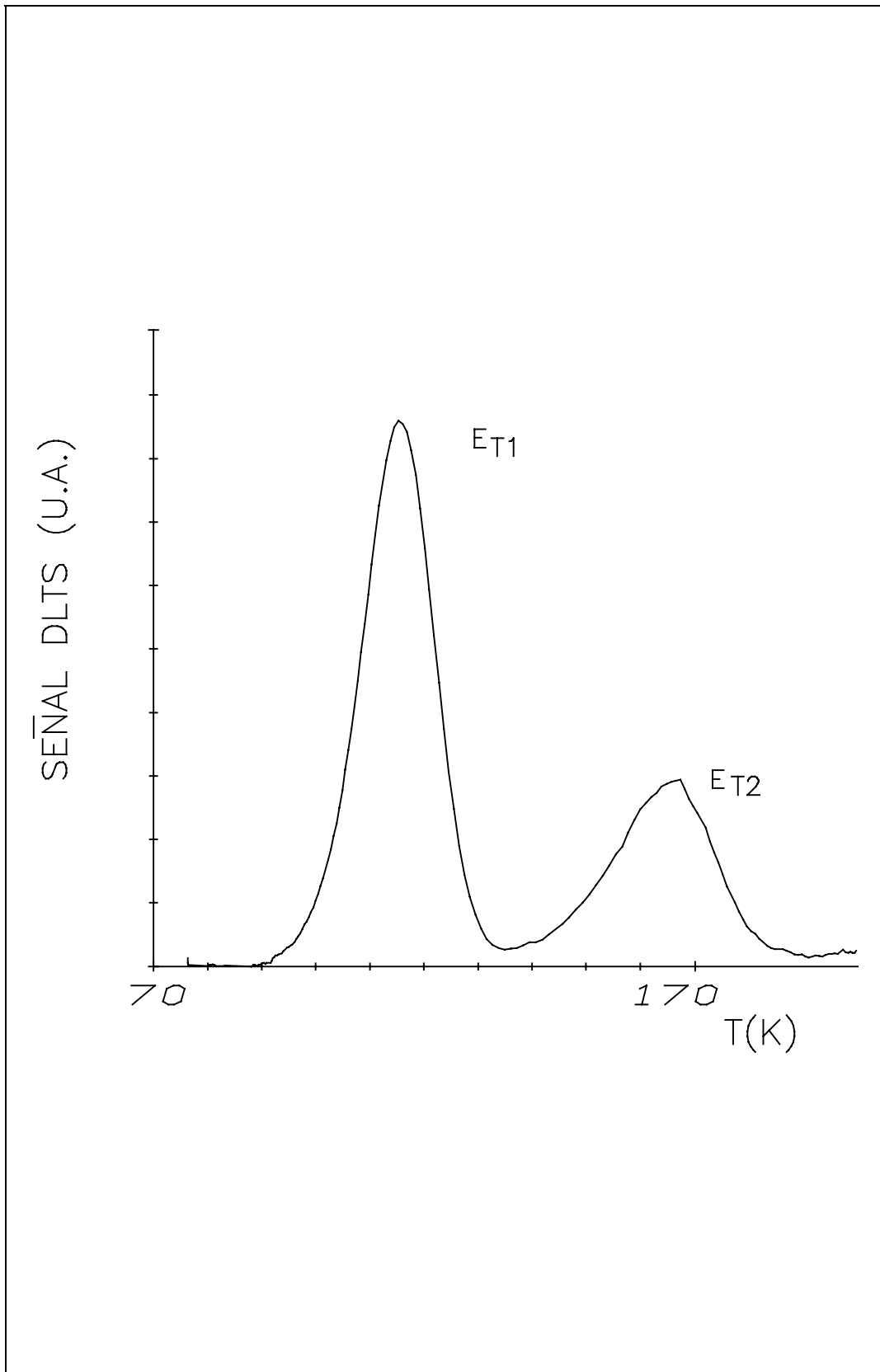
$$\Delta C(t) = \Delta C(0) \cdot e^{-e t}$$

En un barrido de temperatura creciente y para secciones eficaces de captura comparables emitirán primero los centros de energía de activación menor, detectándose un pico para cada uno de ellos a una temperatura que depende del coeficiente de emisión seleccionado por la ventana de DLTS.

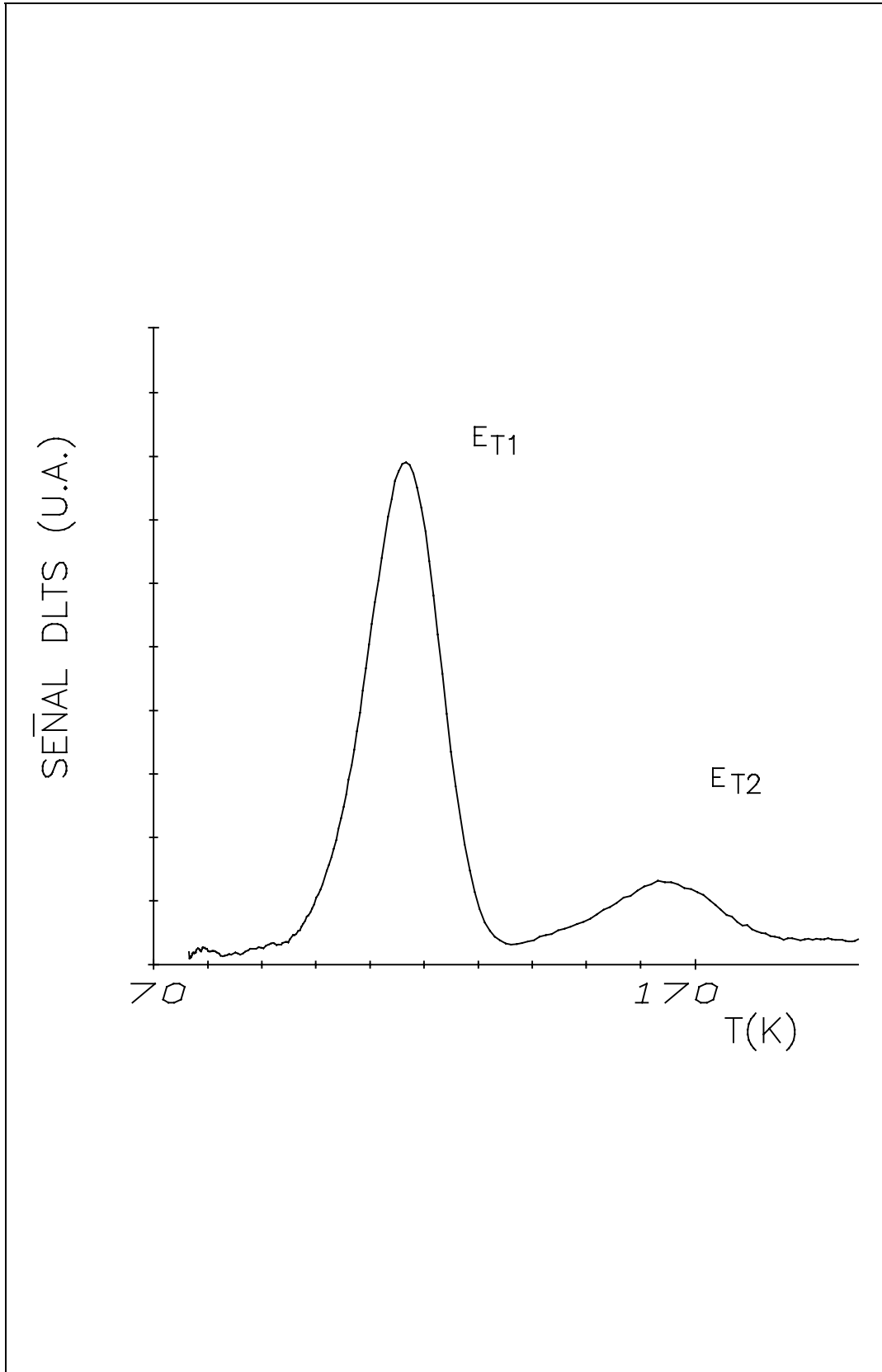
En la figura 12 se muestra un espectro típico de DLTS para las muestras menos dopadas con platino. En esta experiencia, durante la emisión la muestra estaba polarizada a 9.5 V en inversa y durante la captura a 0.2 V también en inversa; la relación entre tiempos de muestreo es de  $k=t_2/t_1=2$ . En estas medidas no se polarizó en directo al diodo con lo cual se observa únicamente niveles que emiten portadores mayoritarios. Se observaron dos picos asociados a dos centros profundos dominantes. Comprobada anteriormente la naturaleza gradual de los perfiles de impurezas básicas, debemos tener en cuenta que tanto los niveles que emiten mayoritarios en la región P como los que lo hacen en el lado N contribuyen a la señal en los procesos de relajación, por lo que de no disponer de más datos no se podría a priori situar cada nivel en el la mitad superior o inferior de la banda prohibida.

Se acepta de manera generalizada que la impurificación de silicio con platino lleva consigo la aparición de al menos dos niveles con energías de activación próximas a  $E_c - E_T = 0.23$  eV y  $E_T - E_v = 0.34$  eV, que están presentes en este sistema Si:Pt según lo reflejado por muchos investigadores [34-52]. Según la mayoría de los trabajos realizados hasta la fecha, el máximo de temperaturas más bajas correspondería al de la mitad inferior de la banda prohibida, y el otro se situaría más cerca de la banda de conducción. Todos estos resultados se irán verificando a través de nuestras experiencias.

En la figura 13 se muestra otro espectro de DLTS de capacidad pero esta



**Figura 12.** Espectro de DLTS de capacidad para muestras menos impurificadas con platino y sometidas a pulsos de mayoritarios.



**Figura 13.** Espectro de DLTS de capacidad para muestras menos impurificadas con platino y sometidas a inyección de minoritarios.

vez incluyendo la inyección de minoritarios, la muestra se excita con pulsos de tensión con valores extremos comprendidos entre 9.5 V en inversa y 0.7 V en directa. La relación entre tiempos de medida es la misma que para el espectro anterior,  $k=2$ . Vuelven a salir dos centros dominantes de mayoritarios pues la señal es positiva, sin embargo la amplitud de estos máximos, que tienen lugar para el mismo valor de temperatura, es menor que en la figura anterior. El análisis de estos espectros lo realizaremos más adelante en un capítulo dedicado a la DLTS y a los fenómenos que en ella se observan cuando variamos la concentración de centros profundos. Lo que nos interesa destacar ahora es el número de centros que introduce el platino en el silicio y las temperaturas a las cuales su actividad eléctrica sea perceptible por nuestros aparatos.

La determinación de la temperatura asociada a cada máximo de DLTS nos permite fijar el rango de temperaturas en el que el nivel se halla completamente ionizado; nos fija las regiones de temperaturas en las cuales cada nivel contribuye o no a la concentración medida en un  $C(V)$ . Por otro lado podremos delimitar los intervalos de temperaturas en los cuales analizar por separado a estos niveles por otras técnicas como puede ser mediante transitorios isotérmicos.

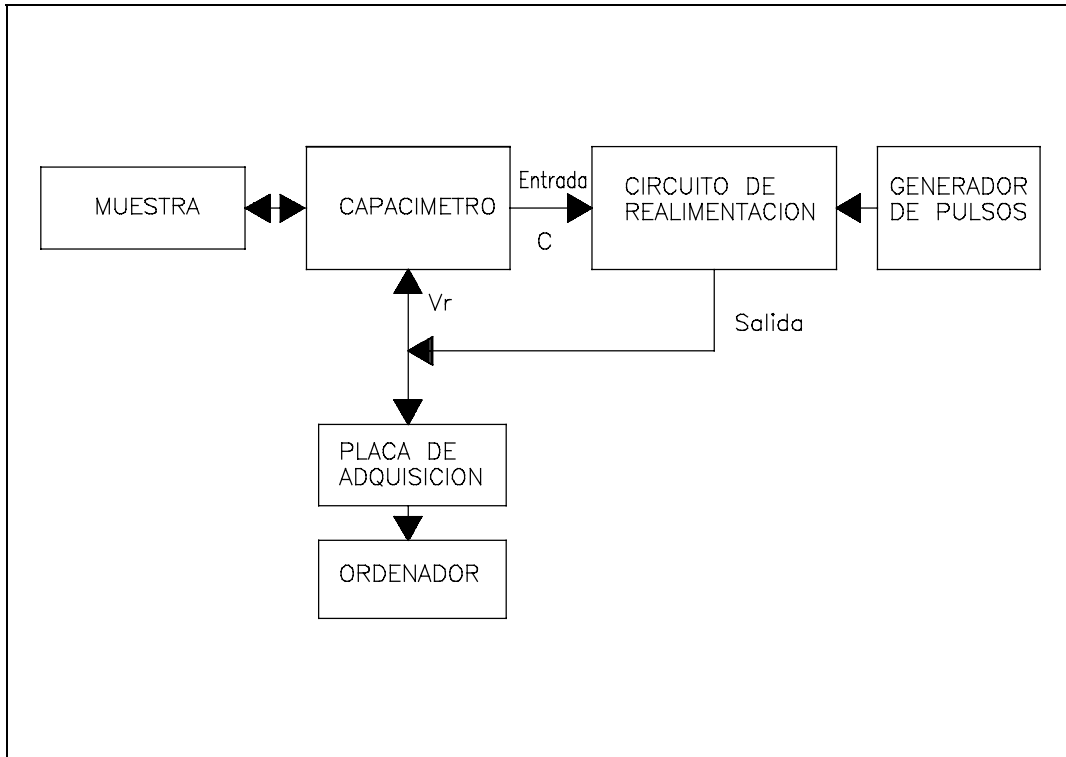
De estos espectros aislados no se puede concluir nada acerca de la posición energética de los centros pues no podemos asegurar en principio que los transitorios sean exponenciales debido a que la muestra posee un perfil gradual y ya hemos asegurado la no exponencialidad para el caso particular de una unión gradual lineal [31,32].

## **2.5 DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE LOS NIVELES PROFUNDOS. TRANSITORIOS ISOTÉRMICOS DE CAPACIDAD CONSTANTE.**

En este apartado vamos a presentar un análisis de transitorios isotérmicos de tensión a capacidad constante con el objeto fundamental de conocer las posiciones energéticas de los niveles profundos en el interior de la banda prohibida del silicio. El principio físico que subyace en esta técnica es el mismo que en aquellas en las que se medía la variación de la capacidad de la unión manteniendo constante la tensión aplicada, como signo externo de una emisión de electrones o huecos causada por una excitación eléctrica u óptica [5]. No obstante es más ventajoso mantener la capacidad constante [53] y medir el cambio en la tensión de polarización inversa que cae en la unión mientras los centros alcanzan su estado de carga estacionario. La interpretación de las medidas por esta técnica son más fáciles, especialmente cuando la concentración de centros profundos es comparable a la de impurezas poco profundas [54]. La razón esencial de esta elección es que la evolución hacia el equilibrio de un unión PN gradual con un centro profundo, reflejado en un transitorio de tensión a capacidad constante, sí tiene carácter exponencial (apéndice 2).

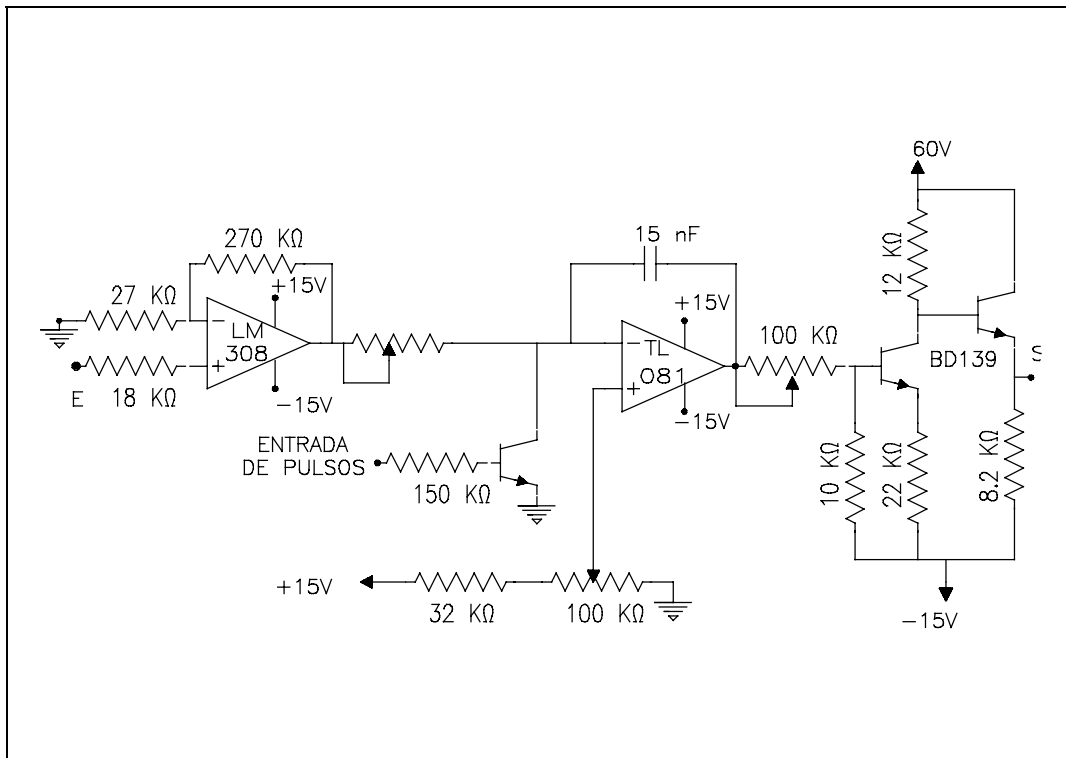
Una vez adquirido un transitorio de tensión a capacidad constante tomado a una temperatura determinada, la idea básica es la construcción de un espectro en el dominio del tiempo en lugar de en el dominio de la temperatura, obtenido simplemente a partir de dicha relajación, es lo que se conoce como espectroscopía de transitorios isotérmicos o análisis de ITS [55,56] (una descripción de esta teoría se puede ver en el apéndice 3). También se encuentran en la literatura trabajos recientes [57] en los que se mide más de un transitorio para conseguir el mismo propósito que con uno solo. Este espectro contendrá la misma información que los de DLTS de capacidad o corriente, aunque de estos últimos no se pueda extraer correctamente por disponer de unas muestras que no cumplen las condiciones necesarias para que estas técnicas sean

aplicables; además garantizamos la termalización de la muestra frente a técnicas basadas en barridos con la temperatura.



**Figura 14.** Diagrama de bloques.

Las medidas de transitorios de tensión a capacidad constante se captaron según el diagrama de bloques de la figura 14 y atendiendo al circuito controlador de la capacidad del diodo que se muestra en la figura 15. El valor de la capacidad del diodo se determina por un medidor de capacidades BOONTON 72BD. La salida del capacitmetro nos proporciona el valor de la capacidad del diodo en un determinado instante. Este valor se introduce en el circuito de realimentación, se amplifica y se compara con el valor que queremos mantener constante, generando a la salida la tensión necesaria que se ha de aplicar a la muestra para que la zona de carga espacial permanezca con la misma anchura. En el bucle se introduce un circuito adicional que permite que el diodo quede cortocircuitado durante la duración del pulso de tensión. El pulso de tensión es enviado por un generador de pulsos. La longitud del pulso determina el tiempo de



**Figura 15.** Circuito de realimentación.

cortocircuito  $\tau$  del diodo, en nuestro caso este intervalo de tiempo es lo suficientemente largo como para asegurar que todos los centros queden ocupados. Inmediatamente después de la aplicación del pulso, el bucle de control regula de nuevo el valor de la capacidad constante del diodo. La polarización del diodo se recoge mediante una placa de adquisición de datos. Este conjunto es capaz de seguir cambios en el diodo con constantes de tiempo de 1 ms como mínimo.

La placa de adquisición de datos en el modelo DASH-16F de Metrabyte; es una placa entrada-salida, analógico digital multifunción de alta velocidad que utiliza un convertidor de 12 bits de aproximaciones sucesivas con un tiempo de conversión de 8  $\mu$ s, lo cual permite poder alcanzar una frecuencia máxima de muestreo de 100 kHz en DMA. Las conversiones se pueden iniciar de tres formas distintas: mediante software, por intervalos temporizadores programables internamente, o directamente a partir de un trigger externo aplicable al convertidor A/D. Al final de la conversión los datos se pueden transferir mediante programa, por interrupción o por DMA.

En nuestro caso se captaron datos por DMA pues al presentarse dos niveles en las muestras, en la relajación hacia el equilibrio tendremos la contribución de los dos, uno más rápido y otro más lento. Para analizarlos por separado interesa captar dentro del transitorio el principio de este, rápido, y la cola del mismo más lento; la densidad de puntos disminuye a medida que nos acercamos al final del transitorio. Los tiempos de adquisición de un transitorio completo variaron entre los 10 ms y los 100 segundos.

### **2.5.1 ANÁLISIS DE ITS.**

Un análisis preliminar de DLTS de capacidad de mayoritarios y minoritarios nos ha permitido encontrar dos centros profundos. Por lo tanto, en la evolución de nuestra muestra hacia el equilibrio tendremos la combinación de dos términos, que en el caso más favorable serán exponenciales. El cálculo de la constante de tiempo asociada a cada centro para cada temperatura sería difícil de obtener; a no ser que estos coeficientes de emisión sean lo suficientemente diferentes (apartado "Separación de los picos de ITS" del apéndice 3) como para poder estudiarlos por separado, es decir, que un centro emita mucho más rápidamente que el otro: en un caso, a bajas temperaturas, mientras uno emite, al otro no le da tiempo de emitir, y a altas temperaturas mientras se está observando la emisión del segundo el primero se ha quedado vacío de portadores mayoritarios y no contribuye en la evolución del transitorio.

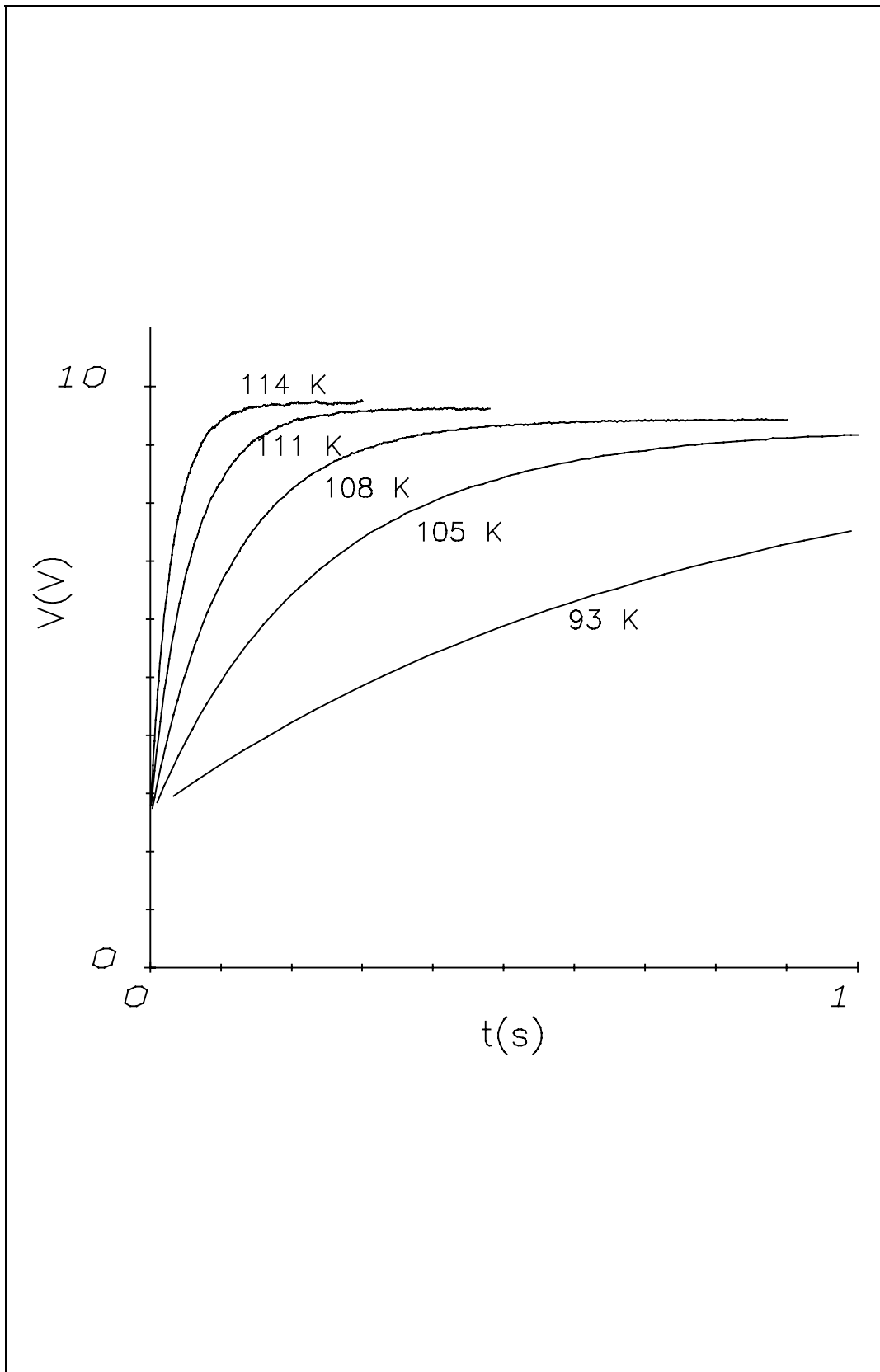
Para comprobar si el transitorio se comporta como una exponencial pura se acudirá al análisis del mismo mediante la técnica ITS. Como ya se ha descrito en el apéndice 3 los picos que se observan en el espectro de ITS deben cumplir unas determinadas condiciones a media altura para considerar el transitorio como exponencial.

Para nuestra muestra se tomaron dos series de medidas de transitorios

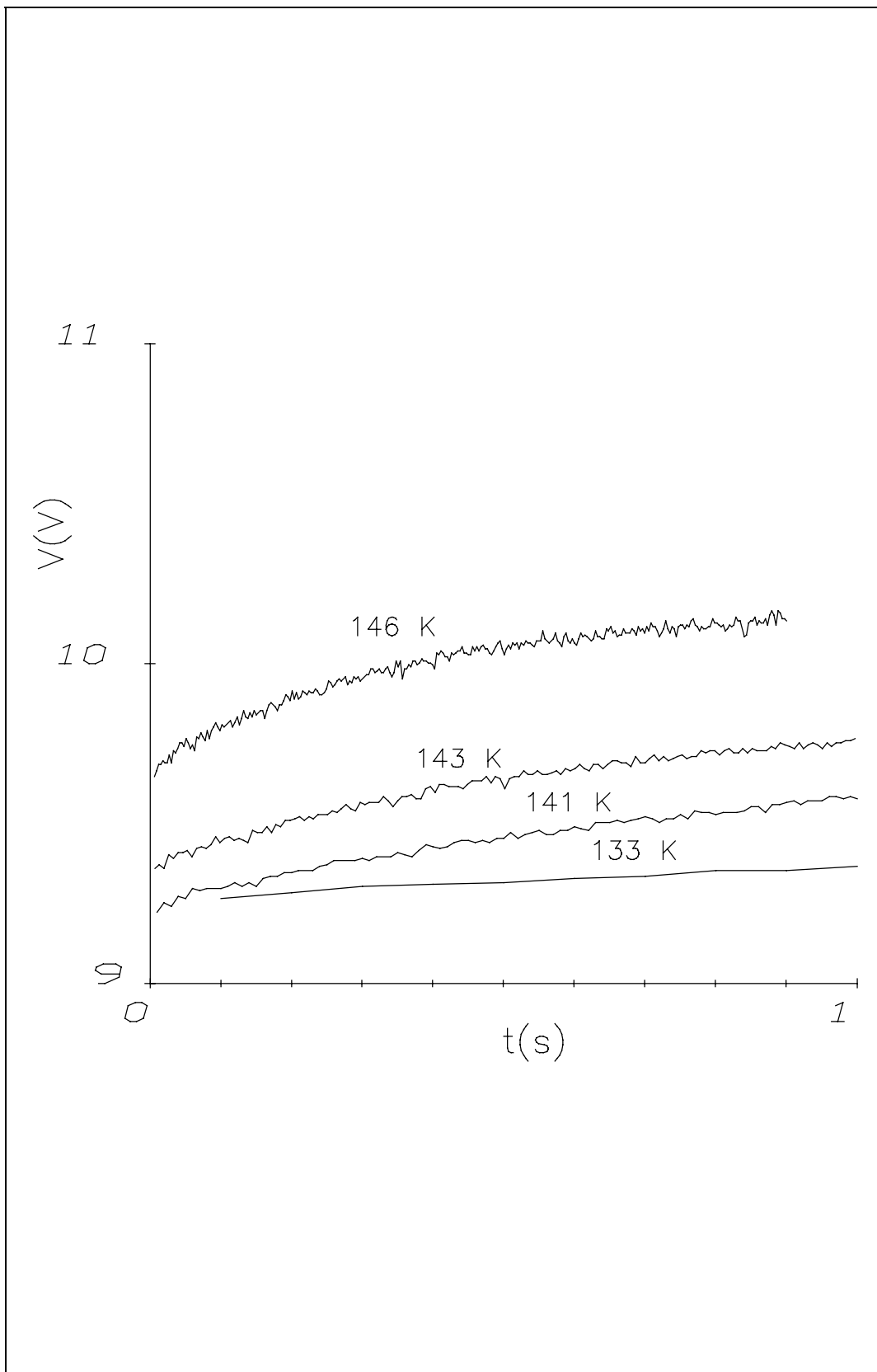


isotérmicos de tensión a capacidad constante,  $V(t,\tau)$ , a distintas temperaturas, (figuras 16 y 17) para un valor grande del pulso de captura,  $\tau \gg n \cdot c_n$  (apéndice 2). Una de las series se tomó en el rango de temperaturas comprendido entre 90 K y 130 K aunque en la figura 16 se muestre un intervalo más reducido; en él se comprobará que uno de los centros se comporta como si no emitiera durante el tiempo de medida, por presentar a estas temperaturas un coeficiente de emisión pequeño frente al del otro centro. La otra serie se tomó en el intervalo de temperaturas: 130 K y 170 K (algunos de estos transitorios se muestran en la figura 17), en este caso la relajación es debida al segundo nivel supuesto que el otro, por presentar un coeficiente de emisión muy grande, ha emitido muy rápidamente y no es captado en la medida. Para una temperatura determinada el coeficiente de emisión de un centro depende de la energía de activación y de la sección eficaz de captura (apéndice 2), es decir un centro emite antes bien si está más cerca de las bandas, de valencia o conducción, dependiendo de en que mitad de la banda prohibida se encuentre o bien si presenta una sección eficaz de captura térmica mayor. En el caso de los niveles creados por el platino en el silicio los valores encontrados en la literatura acerca de las secciones eficaces de captura [6,37,42,47,49] son: del orden de  $5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  para  $\sigma_n$  (nivel  $E_c - 0.22$ ) y del orden de  $10^{-15} \text{ cm}^2$  para  $\sigma_p$  (nivel  $E_v + 0.34 \text{ eV}$ ). Al tener órdenes de magnitud parecidos y dentro del rango de temperaturas en el que vamos a trabajar el centro que emite antes es el que tiene una energía de activación menor, a ese nivel lo vamos a denominar nivel  $E_{T1}$  y al otro centro lo denominaremos nivel  $E_{T2}$ . Este orden de emisión será comprobado al final del capítulo con la construcción del diagrama de Arrhenius.

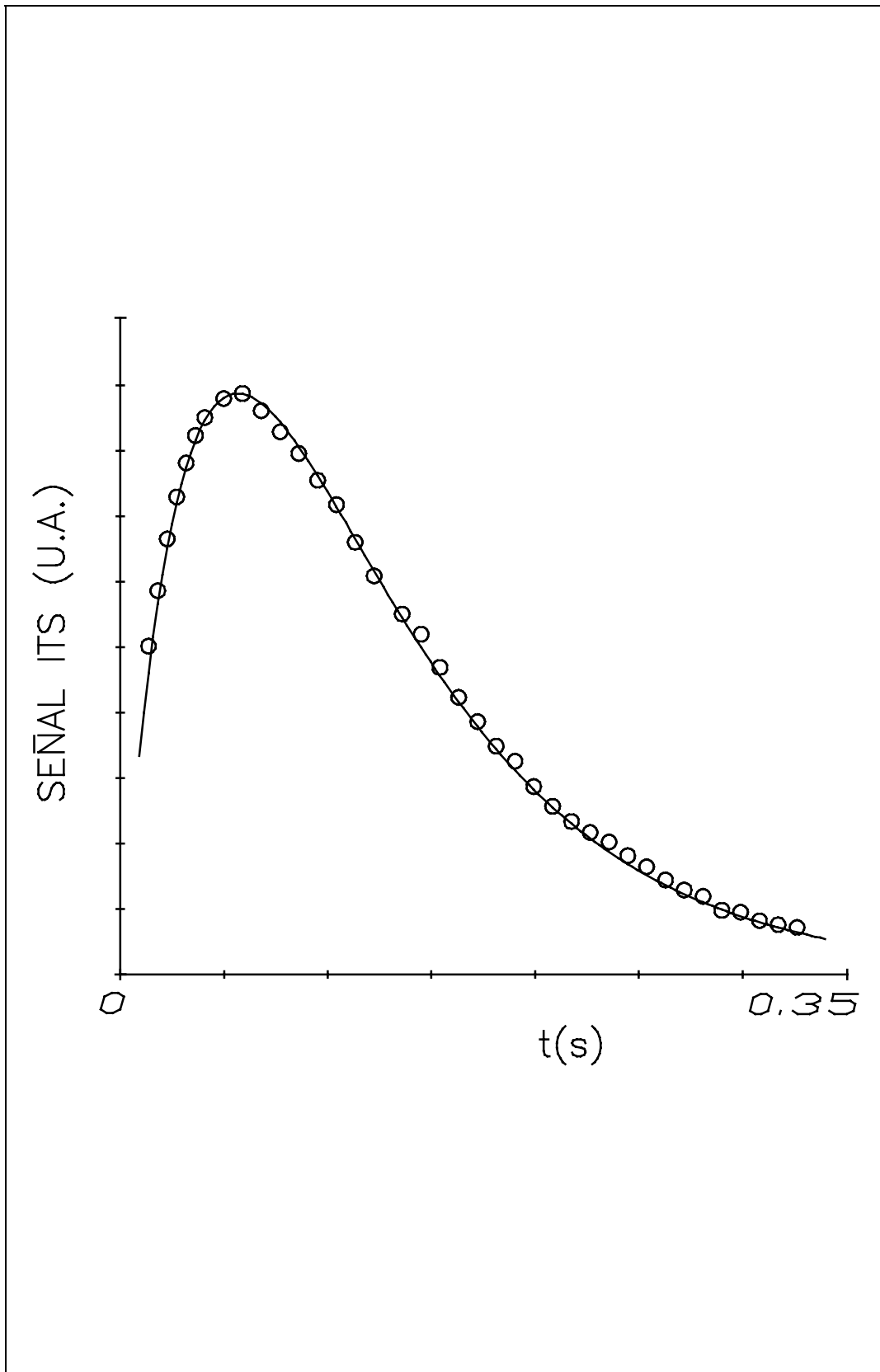
En las figuras 18 y 19 se observan los espectros de ITS correspondientes a dos transitorios isotérmicos obtenidos previamente en cada uno de los intervalos de temperatura mencionados. Superpuestos a ellos se observa el espectro ITS correspondiente a una señal exponencial pura, obtenida teóricamente y con una constante de



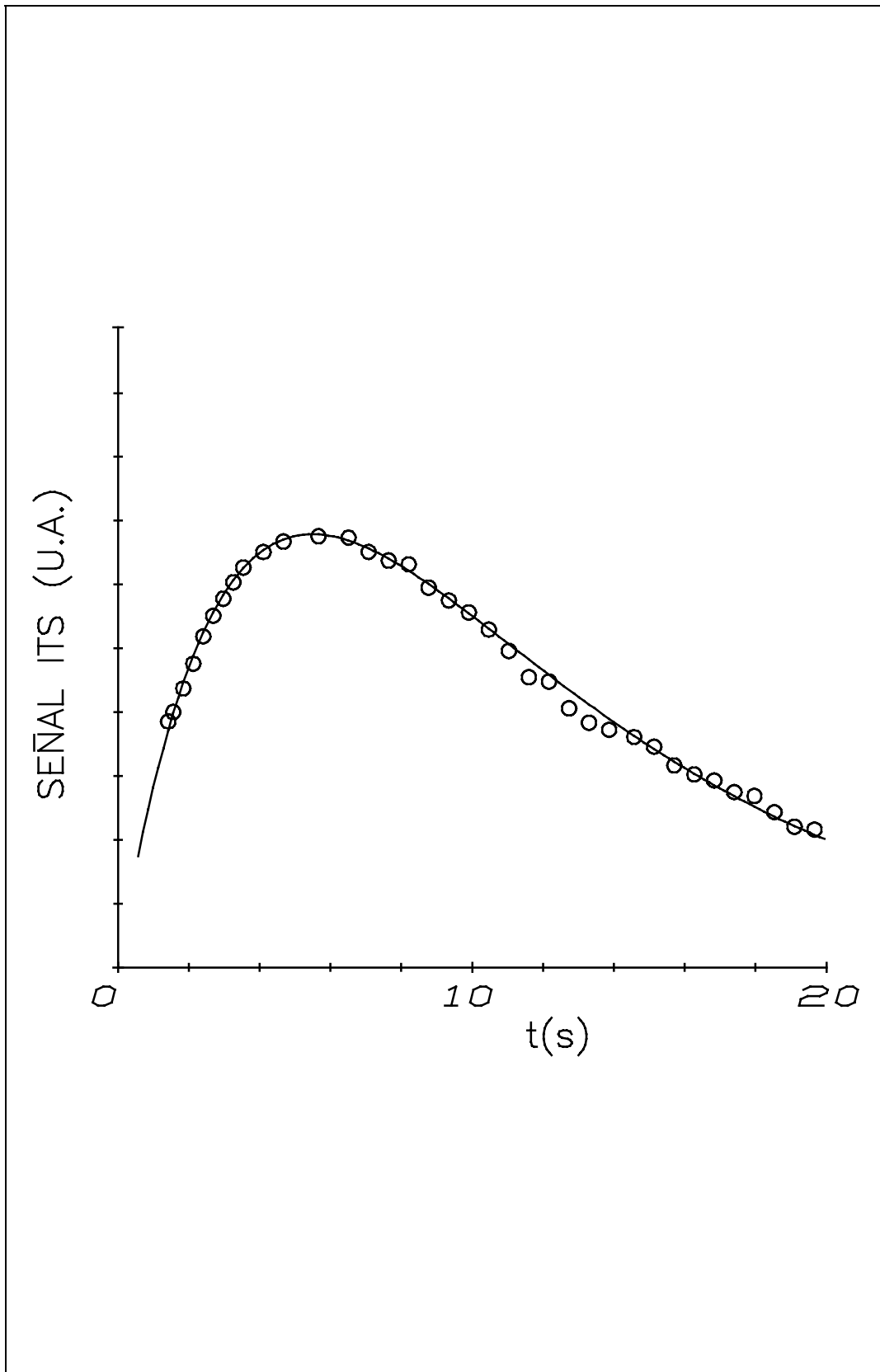
**Figura 16.** Transitorios de tensión a capacidad constante para el análisis del nivel  $E_{TI}$ .



**Figura 17.** Transitorios de tensión a capacidad constante para el análisis del nivel  $E_{T2}$ .



**Figura 18.** Comparación de un espectro de ITS correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T1}$  (o) con uno teórico asociado a una exponencial pura (trazo continuo).



**Figura 19.** Comparación de un espectro de ITS correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T_2}$  (o) con uno teórico asociado a una exponencial pura (trazo continuo).

tiempo igual a la que nos proporciona el máximo de la señal experimental. Como se comprueba de este buen ajuste entre curvas teórica y experimental se puede concluir que los transitorios reales son exponenciales. Cada una de las relajaciones observadas es debida a la emisión de un solo centro, y por tanto de cada uno de ellos podemos obtener una constante de tiempo en función de la temperatura a la que se ha realizado la medida. Este análisis está completamente computerizado de manera que se obtiene rápidamente la colección de pares de valores temperatura-coeficiente de emisión.

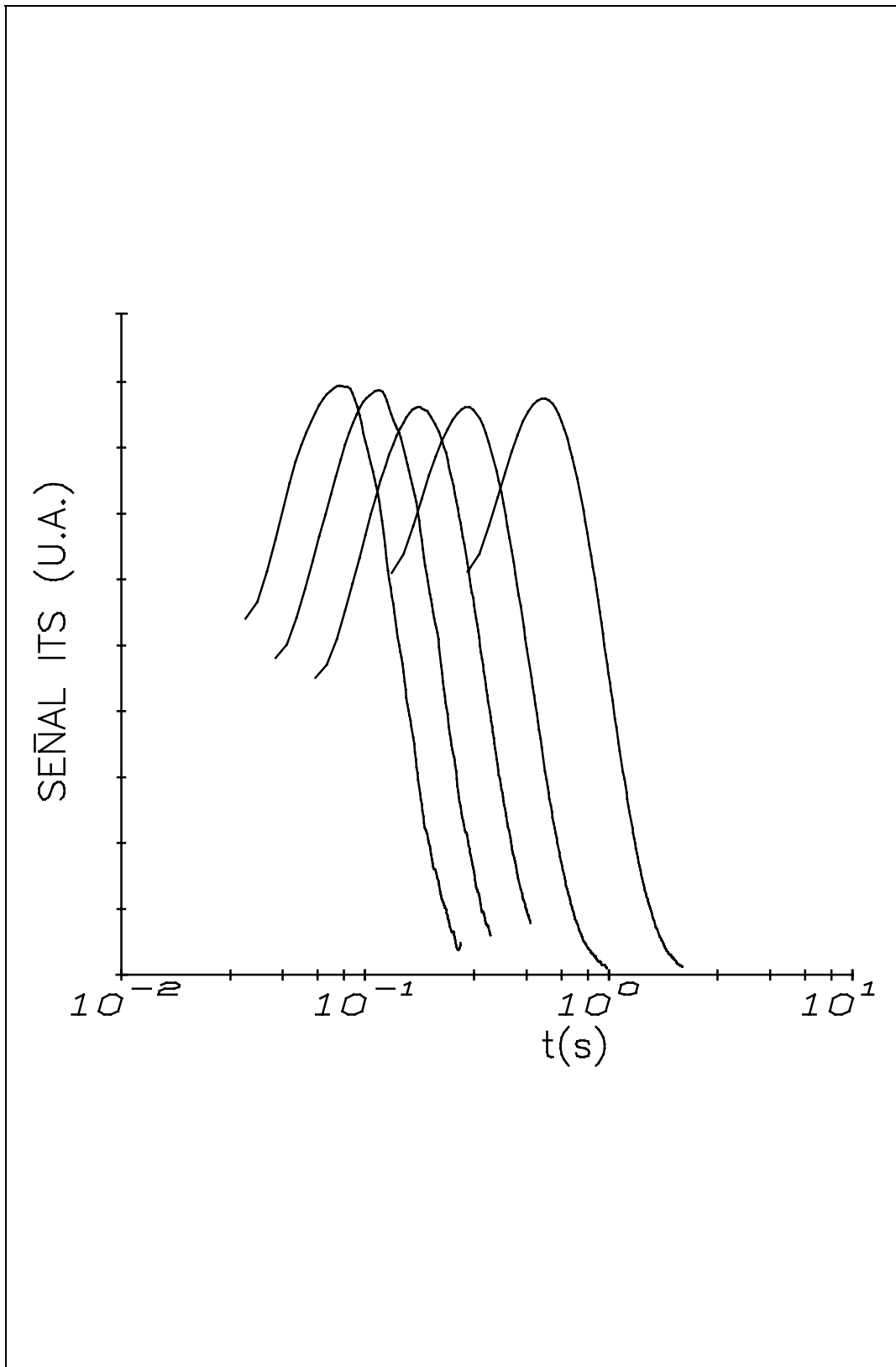
### 2.5.2 DIAGRAMA DE ARRHENIUS

En las figuras 20 y 21 se observan los espectros de ITS correspondientes a los transitorios isotérmicos mostrados previamente en las figuras 16 y 17 respectivamente. Cada serie de medidas nos proporciona una relación entre la constante de emisión  $e_n$  o  $e_p$  de cada nivel en función de la temperatura. La representación  $\ln(e_{n,p}/T^2)$  en función de  $1/T$  es una recta de cuya pendiente obtenemos la energía de activación, y de la ordenada en el origen la constante A de la ecuación:

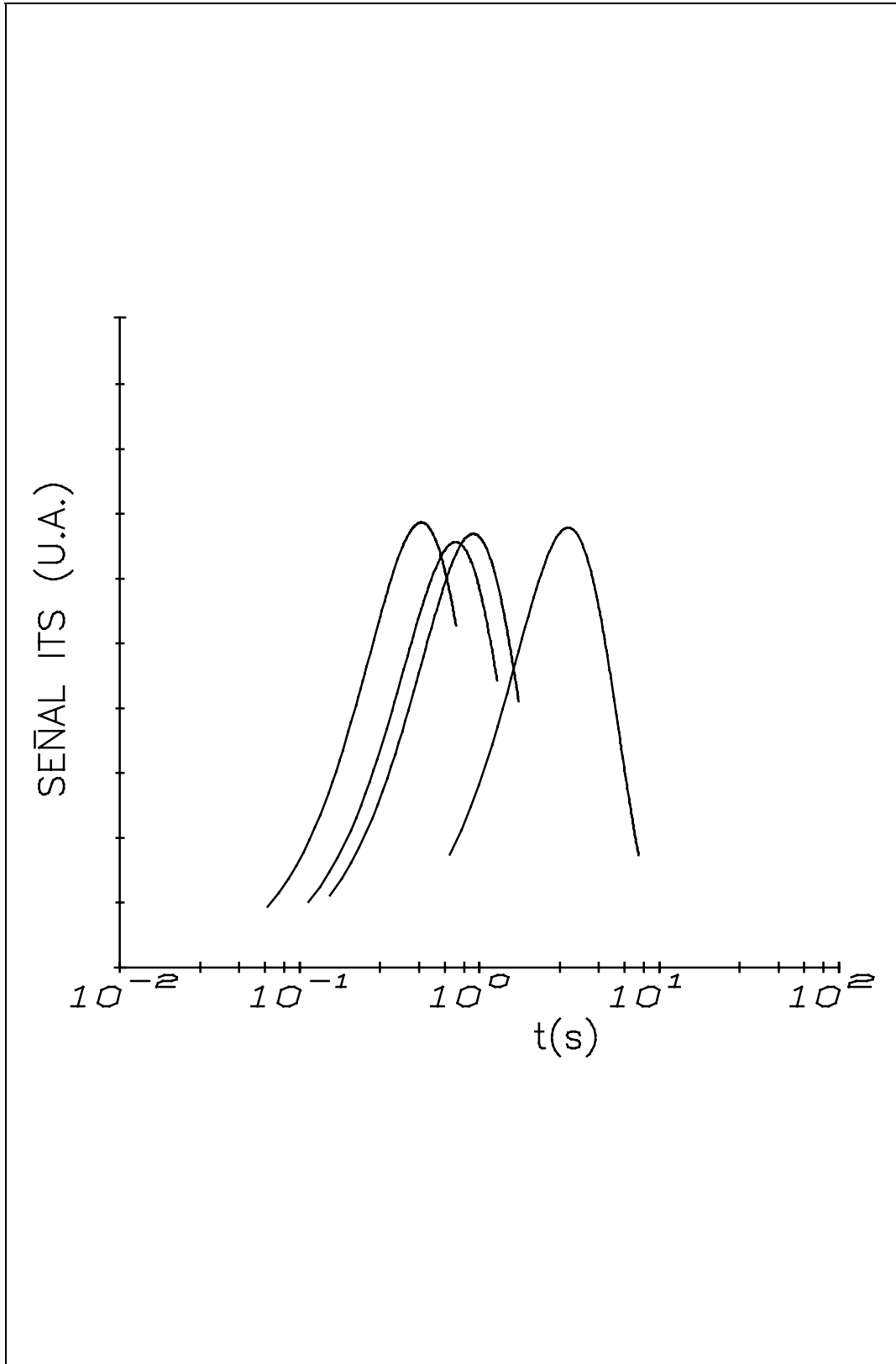
$$\frac{e_{n,p}}{T^2} = A \cdot e^{\frac{-E_A}{KT}}$$

siendo  $E_A = E_c - E_T$  o  $E_T - E_v$ , dependiendo de donde se encuentre el nivel creado por las impurezas, en la mitad superior o inferior de la banda prohibida respectivamente. La posición relativa a los extremos de las bandas no la podemos obtener por la aplicación de este tipo de técnicas a una unión gradual. Sabemos que se producen estos fenómenos, se pueden cuantificar pero no de que región de la unión provienen.

El diagrama de Arrhenius se muestra en la figura 22. Mediante un análisis de mínimos cuadrados obtenemos el valor de las energías de activación y de las constantes A correspondientes a cada representación (tabla 2).

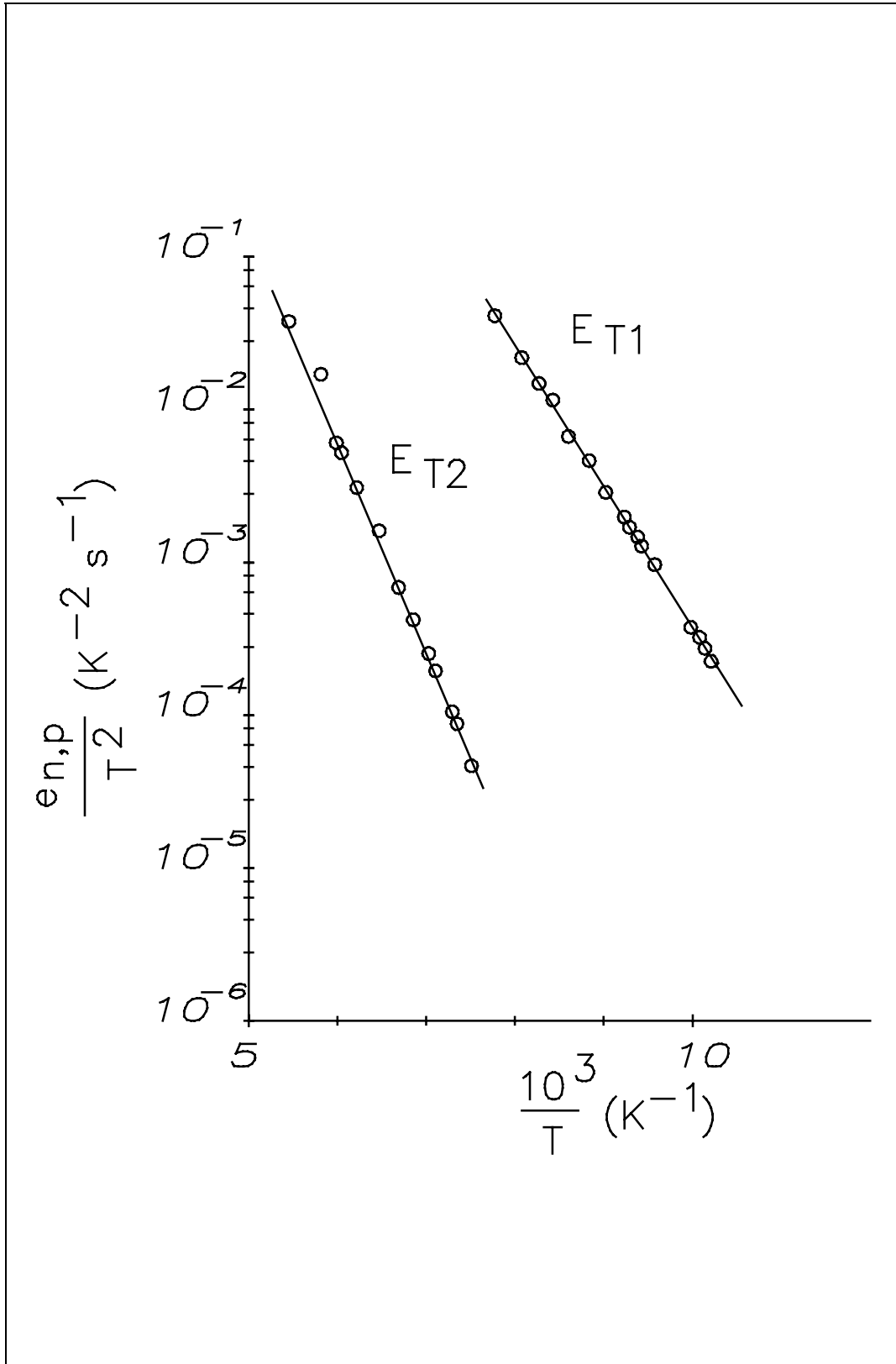


**Figura 20.** Variación con la temperatura de curvas ITS para el nivel  $E_{T1}$  obtenidas de transitorios de tensión a capacidad constante. (De izq. a der. 114, 111, 108, 105 y 93 K)



**Figura 21.** Variación con la temperatura de curvas ITS para el nivel  $E_{T2}$  obtenidas a partir de transitorios de tensión a capacidad constante. (De izq. a der. 146, 143, 141 y 133 K).





**Figura 22.** Diagrama de Arrhenius para los niveles  $E_{T1}$  y  $E_{T2}$  obtenido de los picos de ITS. Las energías de activación calculadas de las rectas son:  $E_{T1}=0.22$  eV y  $E_{T2}=0.34$  eV.

|                | $E_A$ (meV) | $\ln(A)$ |
|----------------|-------------|----------|
| Nivel $E_{T1}$ | 220         | 16.6     |
| Nivel $E_{T2}$ | 340         | 17.8     |

**Tabla 2**

La localización exacta de estos niveles en la banda prohibida del silicio, su carácter eléctrico, así como los perfiles de concentración de impurezas básicas y profundas han sido las variables que no han podido ser determinadas con precisión en este capítulo, en el que se ha realizado una caracterización de las muestras exclusivamente experimental. La obtención de estas variables así como la confirmación de resultados previos se hará atendiendo a un método combinado numérico-experimental que se detalla a continuación.

### 3. MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE PERFILES DE IMPUREZAS.

#### 3.1 INTRODUCCIÓN

Para la caracterización de dispositivos semiconductores, el conocimiento de la distribución de átomos de impurezas en el material semiconductor, es decir su perfil, es un dato fundamental. Las propiedades eléctricas de un dispositivo se pueden determinar claramente conociendo el perfil de impurezas; además, el conocimiento de esta distribución nos permite comprobar los procesos de fabricación. Por citar un caso particular el crecimiento epitaxial de elementos de los grupos III-V en aplicaciones optoelectrónicas centra su atención en la producción de uniones PN perfectamente localizadas, y con densidades de impurezas similares en ambos lados de la unión. No pretendemos en este capítulo entender mejor el comportamiento de difusión de átomos dopantes cerca de la unión sino facilitar una herramienta para la obtención de la distribución de impurezas.

Las medidas eléctricas son un método atractivo y no destructivo que permiten determinar el perfil de impurezas. Indudablemente, el método eléctrico más generalizado es el de la capacidad-tensión o método C-V descrito inicialmente por Schottky [58] y que ha sufrido una gran variedad de modificaciones [59,60]. Según este método, la capacidad en pequeña señal correspondiente a la zona de carga espacial de una unión se mide en función de una tensión inversa de polarización aplicada. El perfil de impurezas se puede encontrar fácilmente sin más que acudir a una simple fórmula.

Aunque este método es conceptual y experimentalmente directo, presenta una serie de inconvenientes que dificultan o incluso imposibilitan la interpretación de resultados experimentales, entre otros:

1. Los datos adquiridos experimentalmente deben ser diferenciados

numéricamente dando lugar a un ruido considerable [61];

2. Se utiliza la aproximación de deplexión para interpretar los resultados, con el consiguiente error en la determinación de perfiles no abruptos [62,63];

3. La presencia de impurezas que crean niveles profundos con su propio perfil influye en los resultados de forma indistinguible respecto de las impurezas básicas, a menos que se repita el proceso a varias temperaturas;

4. El perfil de impurezas está limitado a las regiones donde varía la zona de carga espacial, no se puede acercarse a la unión metalúrgica (cero voltios) ni alejarse mucho de ella por el límite de la ruptura por avalancha en el material semiconductor cuando el campo eléctrico excede el valor del campo de ruptura.

Esto último es inherente a la propia naturaleza de la medida C-V pudiéndose evitar si se acude a otros métodos de medida, como el de la resistencia de la zona de carga espacial por avalancha propuesto por Glover y Tantraporn [64].

Hasta ahora se han realizado esfuerzos por aplicar esta fórmula a situaciones más generales. Se han tratado casos particulares por diferentes autores, entre otros Kennedy y O'Brien que propusieron una corrección por el error cometido con la aproximación de deplexión [65]; Bartelink que expone pero no detalla una relación entre el perfil de impurezas y los datos C(V) donde no utiliza la aproximación de deplexión [66]; Wilson [67] y Blacksin [68] que describen métodos iterativos que implican una solución repetitiva de la ecuación de Poisson; en otros se incluyen la determinación numérica de perfiles de impurezas en dos dimensiones a partir de medidas C(V) [69] y, en fin, otros que afinan más al calcular numéricamente transitorios de capacidad y corriente para uniones arbitrarias con centros pero que no llegan a interpretar resultados experimentales anómalos que tienen lugar en este tipo de uniones [70,71].

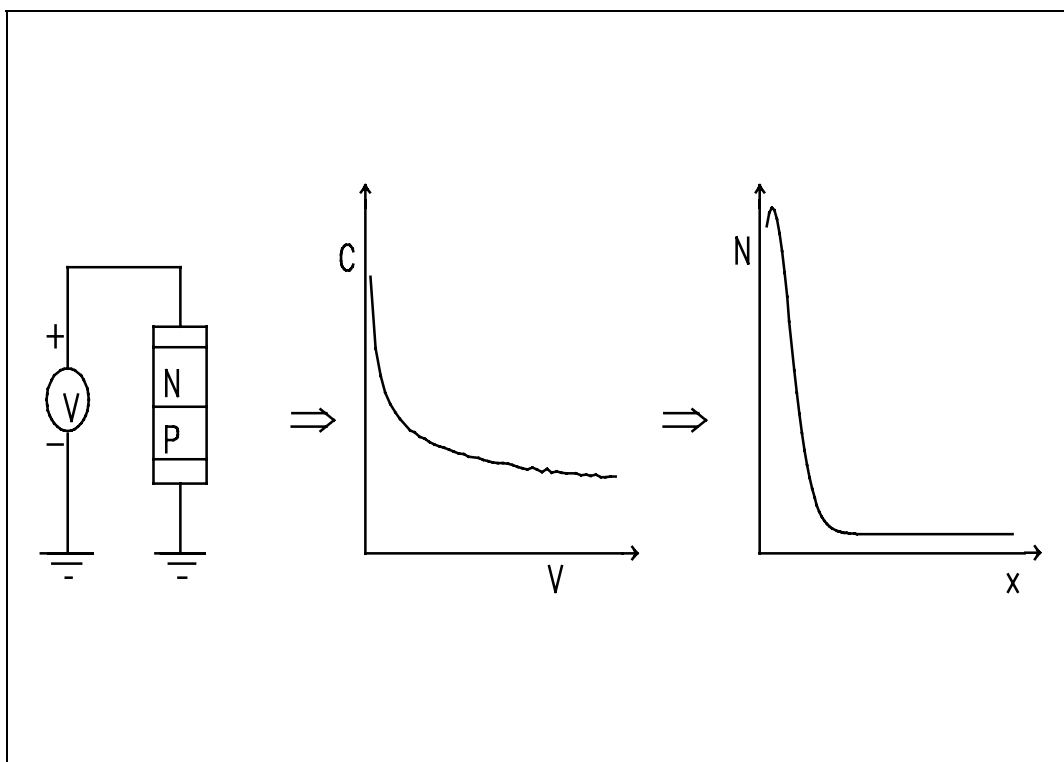
Como hemos elaborado un método que permite calcular numéricamente la capacidad en alta frecuencia para cualquier tipo de unión (capítulo 1) vamos a plantearnos el modo de obtener el perfil de impurezas para nuestras muestras por

comparación entre las curvas experimentales y las numéricas. El uso de este método comparativo e indirecto nos permite una determinación no destructiva de los perfiles, en contraste con métodos como el decapado progresivo de una unión [72], la espectroscopía de masas mediante iones secundarios (SIMS) [73], la espectroscopía túnel de barrido sobre uniones abiertas [74], medidas de 'Spreading Resistance' [75,76], caracterización química [77,78] o reconstrucción de un perfil implantado mediante múltiples implantaciones iónicas [79,80], que necesariamente conducen a la destrucción de la oblea.

Se pueden modelar muchos problemas físicos mediante una o más ecuaciones diferenciales que describen una magnitud mensurable como función de propiedades del material y de unas condiciones de contorno. En otras ramas de la ciencia [81,82], dichas ecuaciones han servido de base para extraer valores de parámetros a partir de medidas experimentales. En la física de dispositivos semiconductores, la aplicación de estos métodos se ha visto restringida a la extracción de parámetros aplicables a unos modelos determinados de transistores [83].

Para obtener el perfil de impurezas por este mecanismo hay que seguir el siguiente procedimiento. Se mide la capacidad en alta frecuencia como función de la tensión inversa aplicada al dispositivo. Estas medidas pueden ser simuladas mediante la solución directa de la ecuación de Poisson y el cálculo de la integral de la capacidad (capítulo 1) con un perfil de impurezas adecuado y con unas condiciones de contorno. Por lo tanto, las variables que hay que ajustar y calcular son la concentración de impurezas y la capacidad de la unión respectivamente: mediante el tratamiento numérico de la ecuación de Poisson con unas determinadas condiciones de contorno se debe obtener el perfil de impurezas desconocido que reconstruya los valores de los datos experimentales. De esta forma se obtiene la solución inversa a la ecuación de Poisson.

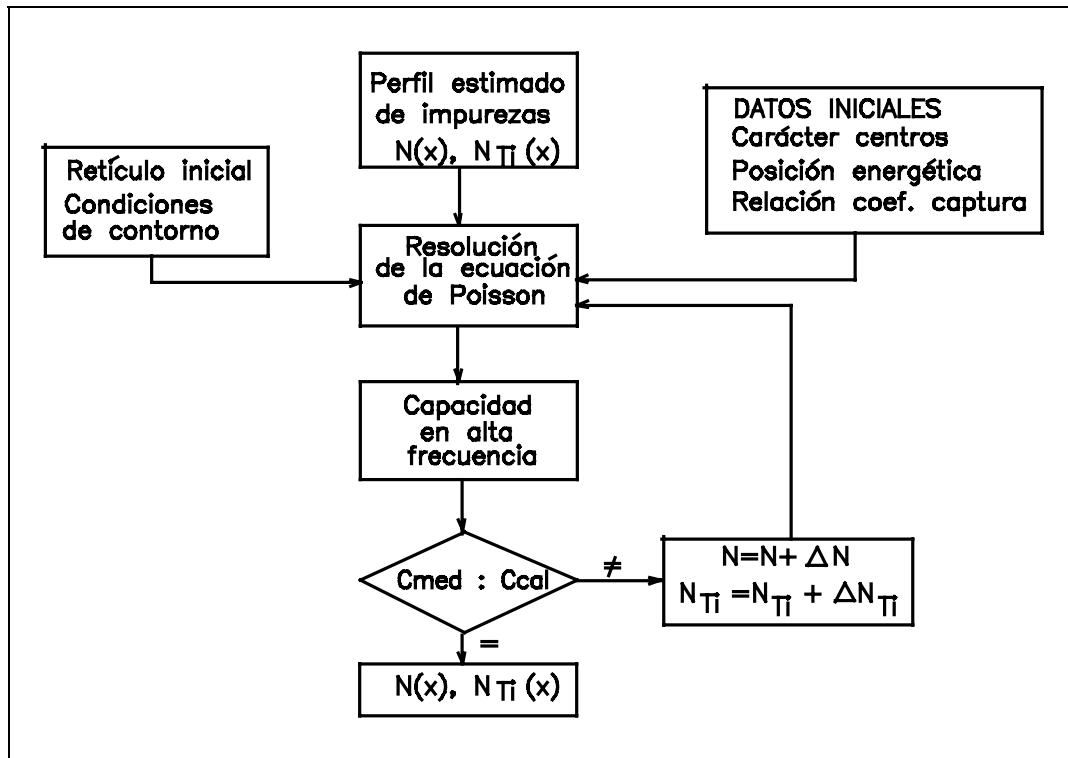
En la figura 1 se muestra gráficamente el principio de la determinación del perfil de impurezas por el procedimiento que citamos.



*Figura 1. Principio de determinación del perfil de impurezas.*

### 3.2 PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

En un capítulo anterior se mostró la imposibilidad de obtener en nuestras muestras los perfiles de impurezas a partir de medidas experimentales de la capacidad en alta frecuencia y a altas temperaturas. El interés por conocer perfectamente los perfiles de impurezas para posteriormente explicar el comportamiento de la unión ante otro tipo de excitaciones nos ha llevado a simular una unión gradual con centros profundos. En primer lugar se han analizado los resultados obtenidos hasta el momento (energías de activación de los centros y concentración de impurezas básicas en el sustrato) junto con los trabajos realizados por otros autores con muestras de silicio impurificadas con platino. El siguiente paso será la determinación exacta del perfil de



**Figura 2.** Método iterativo para el cálculo de perfiles de concentración a partir de curvas experimentales de capacidad en alta frecuencia.

impurezas poco profundas a partir de medidas de capacidad en alta frecuencia y altas temperaturas, superiores a ambiente, y realizadas sobre toda la serie de muestras. Para

la obtención de los valores de los perfiles de impurezas profundas es necesario también la captación de curvas de capacidad en alta frecuencia pero a temperaturas inferiores a la ambiente como se comprobará más adelante. Las citadas concentraciones de impurezas profundas y poco profundas se obtuvieron para toda la serie de muestras mediante un proceso iterativo elaborado por ordenador (figura 2): se calcula numéricamente una curva de capacidad-tensión para una distribución de impurezas teórica y se compara posteriormente con las curvas experimentales, si hay desacuerdo obliga a modificar el perfil de impurezas y repetir el mismo procedimiento hasta que se alcance el ajuste.

Como resultado de la simulación se han obtenido otras magnitudes eléctricas distintas de la capacidad que caracterizan a la unión PN, y que nos han

permitido, además de reproducir las medidas experimentales, explicar el comportamiento de esta estructura en función de la temperatura y de la tensión aplicada a la muestra.

### 3.2.1 PARÁMETROS INICIALES

Hasta ahora se ha detectado la presencia de dos niveles de impurezas asociados al platino cuyas energías de activación se han obtenido mediante medidas de transitorios isotérmicos de tensión a capacidad constante: 0.22 eV y 0.34 eV respecto a la banda más próxima.

Se desconocen parámetros como el carácter de los centros y su posición en la mitad inferior o superior de la banda prohibida ya que se trabaja con muestras que presentan un perfil gradual. Como suposiciones iniciales partiremos de resultados obtenidos en otros trabajos, la mayoría de ellos realizados sobre uniones Schottky [50] o asimétricas [48,49,51]: al nivel  $E_{T1}$  lo sitúan a 0.22 eV debajo de la banda de conducción y le asignan carácter aceptador y al nivel  $E_{T2}$  a 0.34 eV por encima de la banda de valencia y con carácter donador. Estas consideraciones serán también comprobadas al comparar nuestros resultados con las medidas experimentales. No se dispone tampoco del valor de los coeficientes de captura de electrones y huecos para cada uno de los niveles. La expresión que aparece en la ecuación de Poisson es la relación entre ambos coeficientes  $c_p/c_n$ , que para valores comprendidos entre  $10^{-4}$  y  $10^4$  no altera los resultados numéricos obtenidos [31,32]. Por ello se ha preferido igualar este cociente a la unidad.

La muestra se considera unidimensional, las distancias entre los contactos metálicos y la unión metalúrgica se toman iguales para la zona N y para la P con un valor  $W_n=W_p= 100 \mu\text{m}$ . Esta región abarca con creces la posible variación de la zona de carga espacial al aplicar una tensión inversa sobre el diodo y se ajusta además con la geometría de las muestras.



Los parámetros estadísticos del silicio: anchura de la banda prohibida, densidad efectiva de estados y concentración intrínseca de portadores se tomaron de unas expresiones de Selberherr [84] que se detallan en el apéndice 1.

Los parámetros externos son la tensión de polarización y la temperatura a la cual se quiere obtener la curva capacidad-tensión.

### 3.2.2 FACTORES DE OCUPACIÓN DE LOS CENTROS.

El objetivo de todo este proceso es, como se ha mencionado anteriormente, la determinación de los perfiles de impurezas tanto profundas como poco profundas. En este caso son tres las distribuciones incógnita y por lo tanto necesitaremos al menos tres curvas de capacidad-tensión tomadas a diferentes temperaturas. Para la elección de las temperaturas a las cuales se deben realizar las medidas y posteriormente la simulación es necesario determinar los intervalos donde la concentración de niveles profundos ionizados va a ser importante comparada entre sí y con la concentración de impurezas poco profundas. Una representación primaria de la evolución del factor de ocupación con la temperatura puede ser aclaratoria.

Consideremos un semiconductor de silicio tipo P con una concentración de impurezas aceptadoras poco profundas  $N_A$ , en el que existen, además, impurezas donadoras que crean un nivel profundo situado en la mitad inferior de la banda prohibida con una concentración  $N_T$ . El grado de ionización de estos centros,  $N_T^+/N_T$ , depende de la temperatura y de la posición del nivel de Fermi o de la concentración de huecos:

$$\frac{N_T^+}{N_T} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E_T}{KT}}} = \frac{1}{1 + \frac{N_v}{p} e^{\frac{E_v - E_T}{KT}}} \quad (1)$$

El valor de este cociente se obtiene introduciendo esta expresión en la ecuación de

neutralidad:

$$p + N_T^+ = N_A^- + n \quad (2)$$

En el rango de temperaturas de trabajo las impurezas poco profundas van a estar todas ionizadas y el semiconductor no ha entrado todavía en la región intrínseca por lo que con estas dos condiciones se puede obtener el valor de la concentración de huecos:

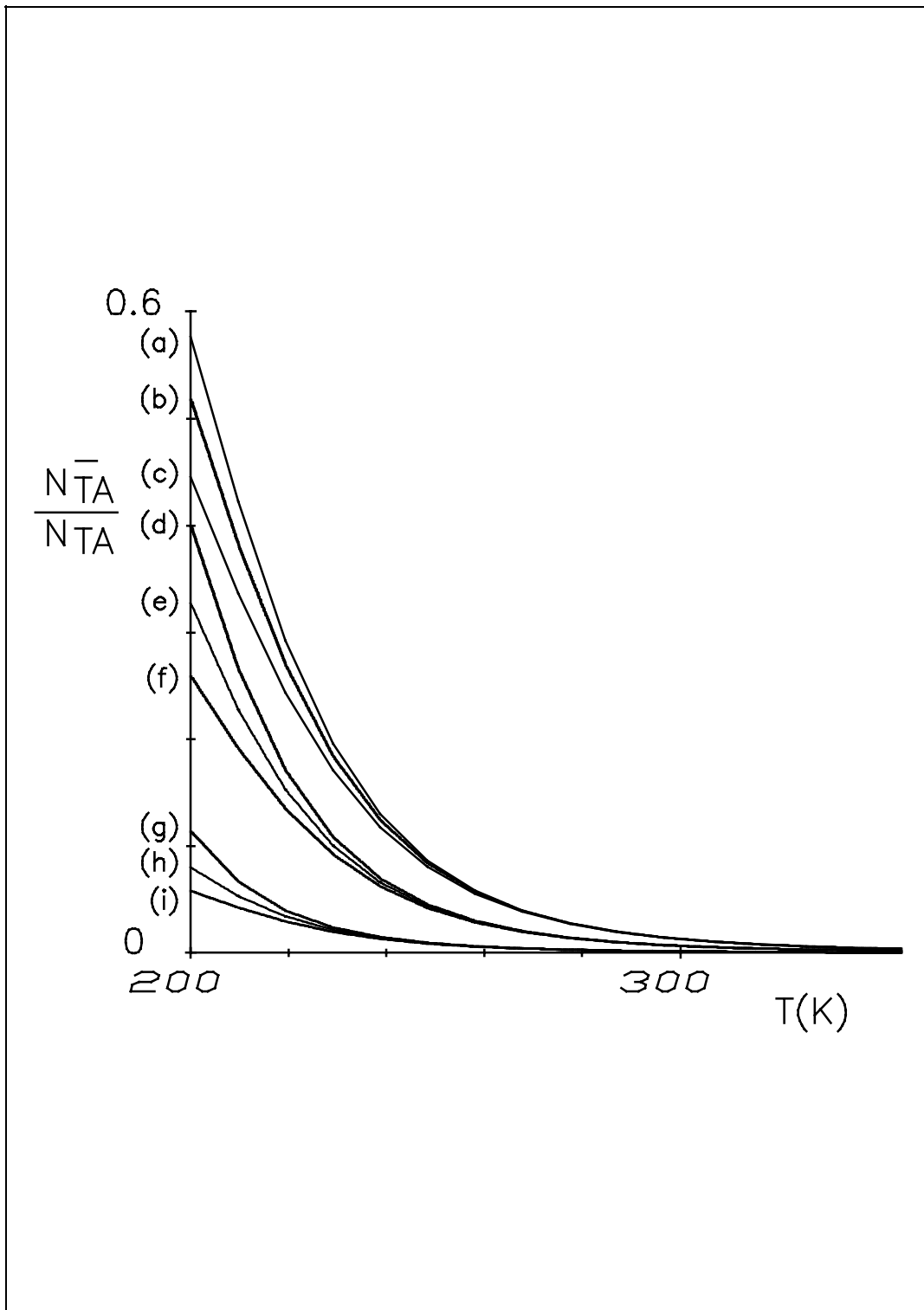
$$p = \frac{N_v e^{\frac{E_v - E_T}{KT}} + N_T - N_A}{2} \left( -1 + \sqrt{1 + 4 \frac{N_A N_v e^{\frac{E_v - E_T}{KT}}}{(N_v e^{\frac{E_v - E_T}{KT}} + N_T - N_A)^2}} \right) \quad (3)$$

Introduciendo el valor de p en la expresión (1) podemos obtener el valor del factor de ocupación o el número de impurezas profundas ionizadas.

El caso particular de semiconductor tipo N con centros profundos aceptadores que crean un nivel en la mitad superior de la banda prohibida es inmediato sin más que cambiar huecos por electrones y las referencias a la banda de valencia por la banda de conducción.

El caso experimental que estamos planteando es el siguiente: dos niveles profundos de energías de activación  $E_c - E_{TA} = 0.22$  eV y  $E_{TD} - E_v = 0.34$  eV; una unión PN, donde el sustrato tipo N presenta una concentración de impurezas donadoras básicas del orden de  $5 \cdot 10^{13}$  y  $1.2 \cdot 10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$  y una transición gradual entre las regiones P y N. Para abarcar todas las posibles situaciones que esperamos se den en las muestras se han supuesto semiconductores aislados P y N con impurezas básicas de  $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$  y  $10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$  y para los niveles profundos respectivos unas concentraciones también de  $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$  y  $10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$ .

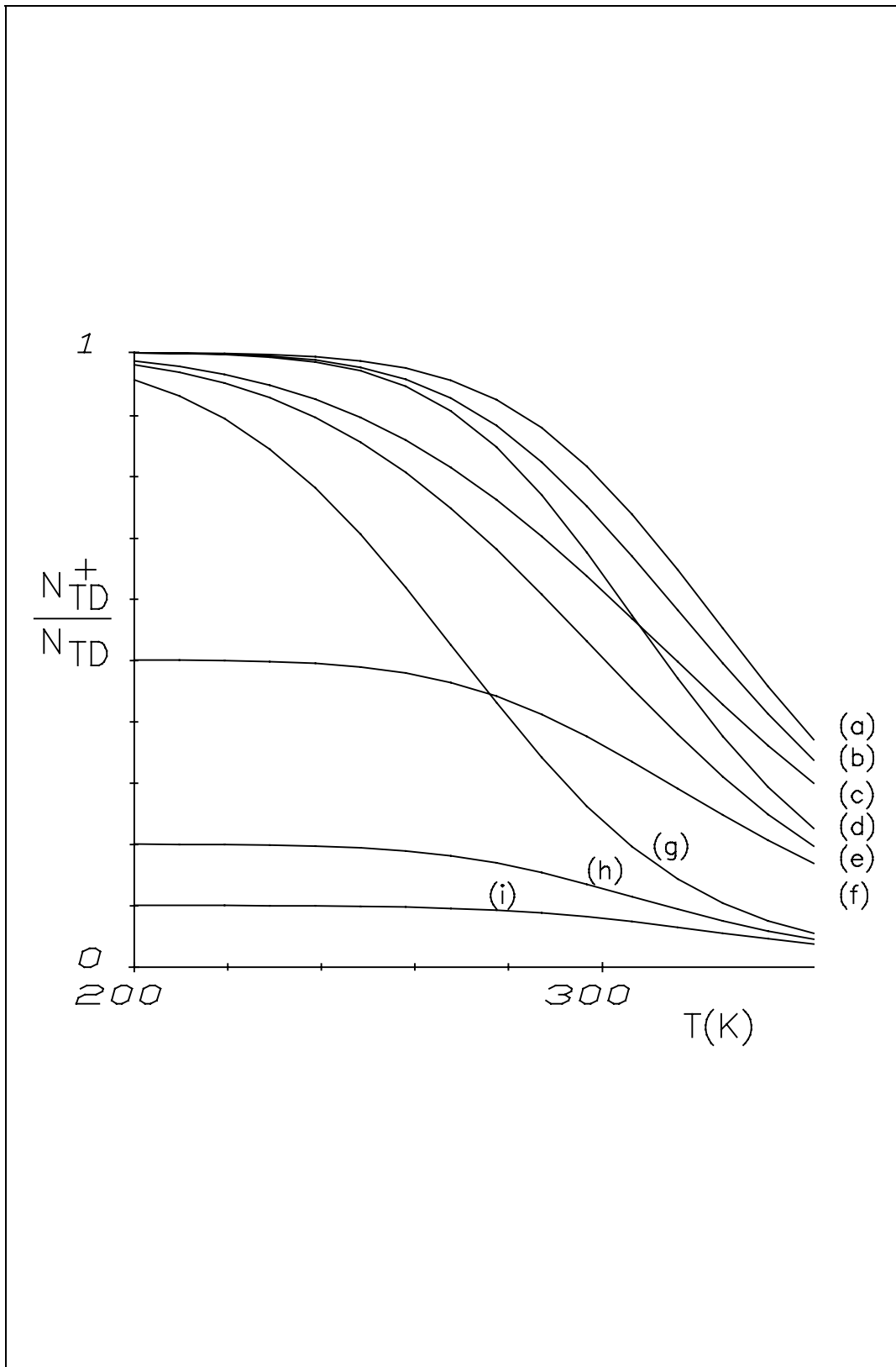
En la figura 3 se muestra la concentración relativa de impurezas



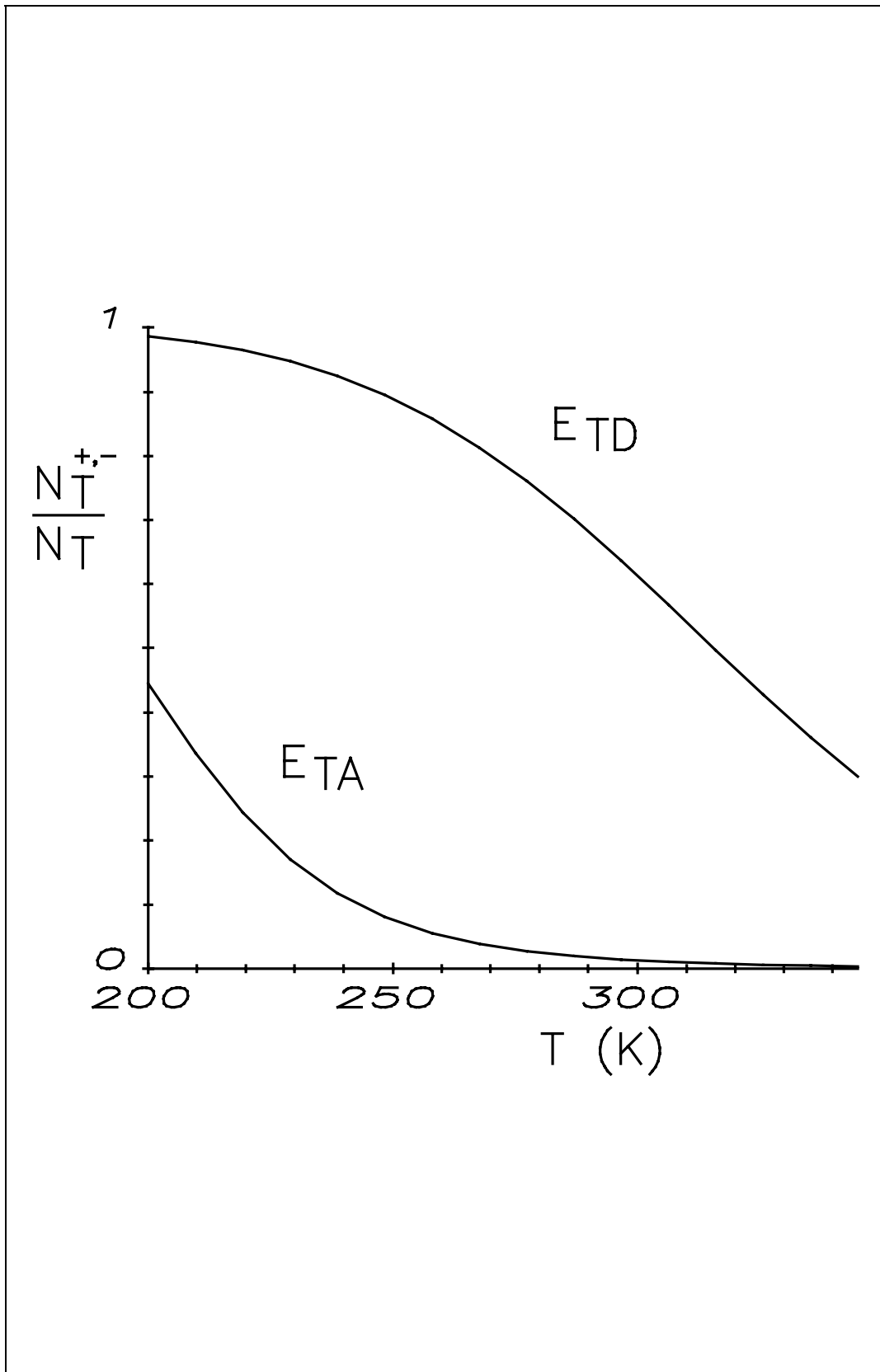
**Figura 3.** Concentración relativa de impurezas profundas ionizadas en un semiconductor tipo N para diferentes concentraciones de impurezas profundas y no profundas en función de la temperatura.

ionizadas para la muestra tipo N e impurezas profundas aceptadoras situadas en un nivel de energía  $E_c-E_{TA}=0.22$  eV en un intervalo de temperaturas comprendido entre 200 K y 345 K. Se han considerado los siguientes pares de valores ( $N_D(\text{cm}^{-3})$ ,  $N_{TA}(\text{cm}^{-3})$ ), de arriba a abajo: a) ( $10^{14}$ ,  $10^{13}$ ), b) ( $10^{14}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), c) ( $10^{14}$ ,  $10^{14}$ ), d) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $10^{13}$ ), e) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), f) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $10^{14}$ ), g) ( $10^{13}$ ,  $10^{13}$ ), h) ( $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), i) ( $10^{13}$ ,  $10^{14}$ ). Se observa claramente como en la región de temperatura ambiente, en cualquiera de estas situaciones, los centros se hallan en estado neutro y por lo tanto no van a influir a la hora de interpretar las curvas de capacidad en alta frecuencia; no se va a producir por tanto la compensación de las impurezas básicas.

En la figura 4 se muestra la concentración relativa de impurezas ionizadas para la muestra tipo P e impurezas profundas donadoras situadas en un nivel de energía  $E_{TD}-E_v=0.34$  eV, en el mismo intervalo de temperaturas que el caso anterior y para los mismos pares de valores de impurezas básicas-profundas ( $N_A(\text{cm}^{-3})$ ,  $N_{TD}(\text{cm}^{-3})$ ), de arriba a abajo: a) ( $10^{14}$ ,  $10^{13}$ ), b) ( $10^{14}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), c) ( $10^{14}$ ,  $10^{14}$ ), d) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $10^{13}$ ), e) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), f) ( $5 \cdot 10^{13}$ ,  $10^{14}$ ), g) ( $10^{13}$ ,  $10^{13}$ ), h) ( $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ), i) ( $10^{13}$ ,  $10^{14}$ ). Para esta muestra la ionización de los centros a temperatura ambiente es menor del 50 % para todos los casos. En cualquiera de las dos situaciones disminuye la ionización de las impurezas a medida que decrece la concentración de los dopantes básicos y aumenta la de centros profundos. La única diferencia entre ambos niveles, como se puede ver, es la distancia energética a la banda más próxima. En la figura 5 se pueden comparar entre sí la ionización de los dos niveles (caso (c)). Esta forma de evolucionar con la temperatura nos permite distinguir tres zonas de interés, con el objetivo de la medida de curvas de capacidad en alta frecuencia: 1) a temperaturas por encima de la ambiente un nivel se halla prácticamente neutro y el otro ionizado a la mitad, 2) a temperaturas próximas a 200 K el segundo está completamente ionizado y el primero está comenzando a tener importancia con respecto a las impurezas básicas, 3) por último a temperaturas inferiores a 200 K los dos centros se van a encontrar ionizados. Se elegirá por tanto



**Figura 4.** Concentración relativa de impurezas profundas ionizadas en un semiconductor tipo P para diferentes concentraciones de impurezas profundas y no profundas en función de la temperatura.



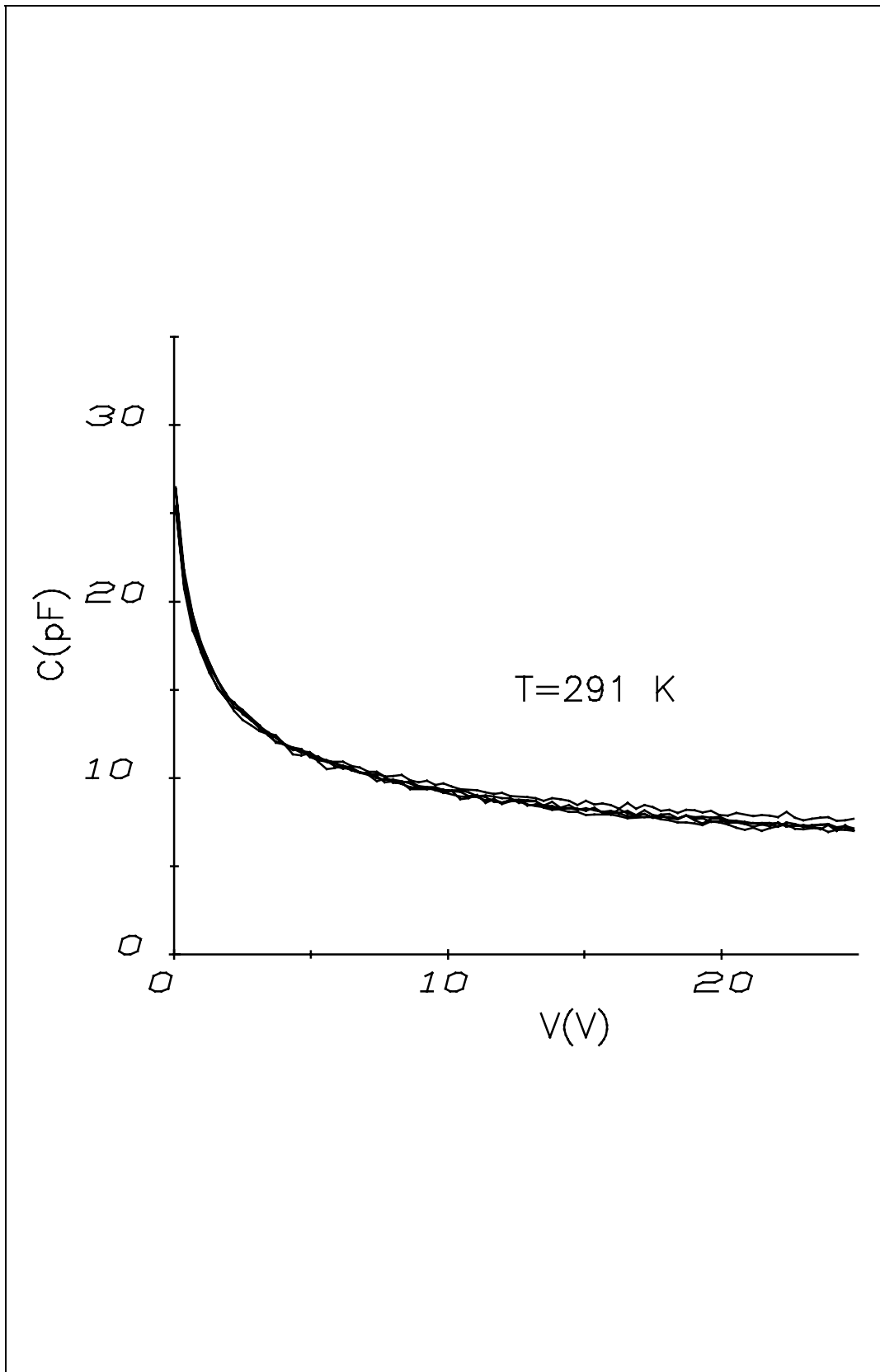
**Figura 5.** Comparación de las concentraciones relativas de impurezas ionizadas en función de la temperatura correspondientes a los dos niveles anteriores.

la zona de temperaturas superiores a ambiente para obtener el perfil de impurezas básicas, y como disponemos de una serie de muestras con distintas densidades de centros profundos, aquellos que presenten una concentración menor permitirán una determinación más fina de este perfil. Posteriormente trabajaremos a temperaturas próximas e inferiores a 200 K para la caracterización de los niveles profundos.

### **3.3 DETERMINACIÓN DEL PERFIL DE IMPUREZAS BÁSICAS. CURVAS CAPACIDAD-TENSIÓN A TEMPERATURA AMBIENTE**

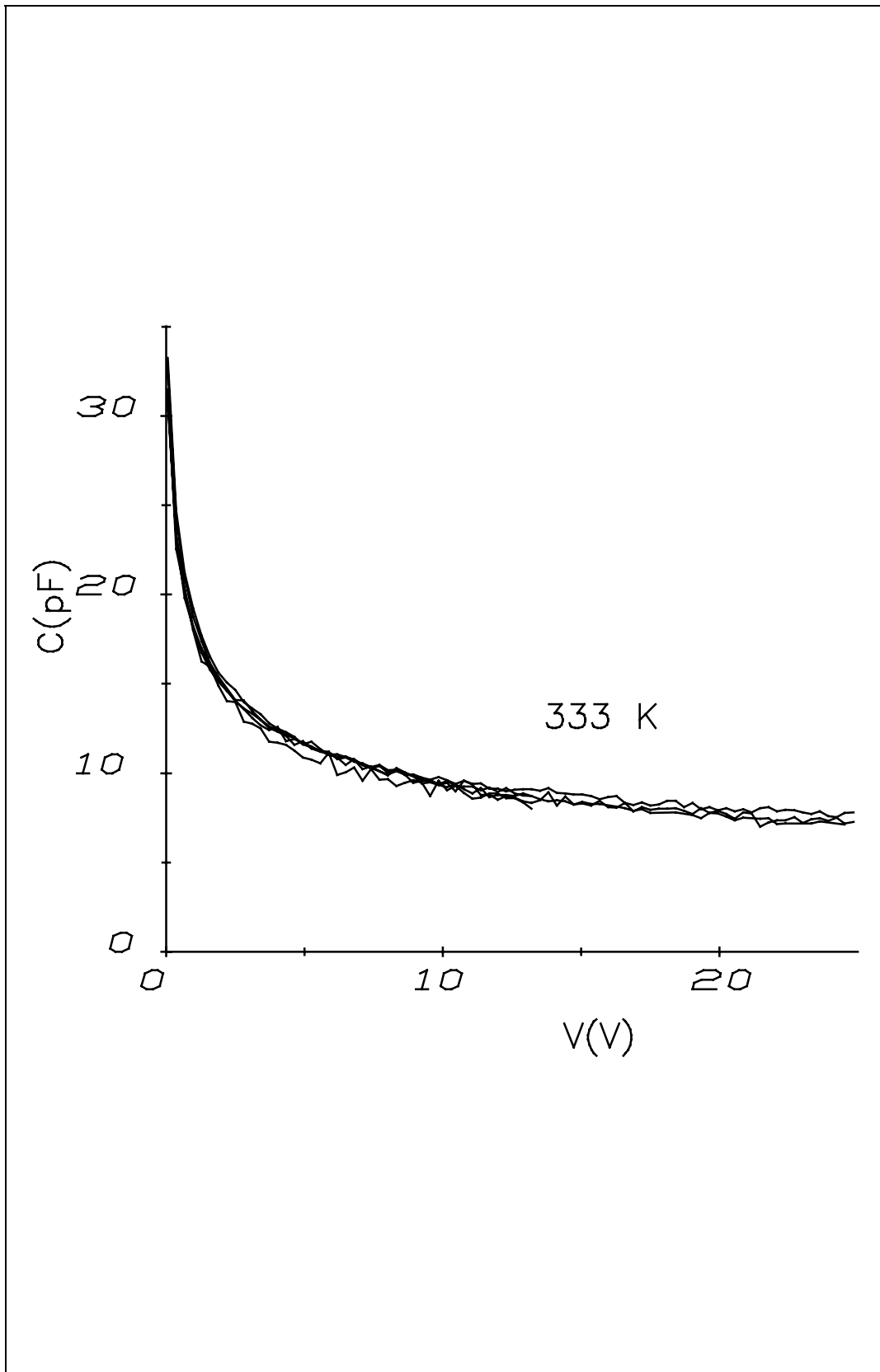
Se ha obtenido una primera estimación de la evolución del factor de ocupación con la temperatura para los niveles detectados. Este estudio nos ha conducido a medir curvas de capacidad en alta frecuencia a temperatura ambiente y superiores a ella con el fin prioritario de obtener los perfiles de impurezas básicas. En las figuras 6 y 7 se muestran las curvas C-V para toda la serie de muestras con sustrato de resistividad  $62.5 \Omega \cdot \text{cm}$  y temperatura de difusión de platino variable. Las medidas se realizaron a dos temperaturas, 291 K y 333 K, el margen de tensiones está comprendido entre los 0 V y los 25 V en inversa. En cada grupo de curvas hay una ligera dispersión de las mismas, estas diferencias son dependientes de la temperatura a la que se ha difundido el platino en cada muestra, es decir, de la concentración de este elemento.

La influencia de los centros profundos sobre la medida de la capacidad al pasar de una temperatura a otra se puede observar en la figura 8. Las dos curvas están referidas a una misma muestra, adquiridas a las dos temperaturas anteriores. Para tensiones elevadas, es decir cuando nos extendemos a zonas de carga espacial mayores son coincidentes. En esas regiones, como trabajamos con una estructura asimétrica, la zona de carga espacial cae en la zona menos dopada, es decir la N y ya hemos podido comprobar que en ella la influencia de los centros profundos aceptadores es despreciable. En regiones próximas a la unión, cuando polarizamos cerca de cero voltios, los

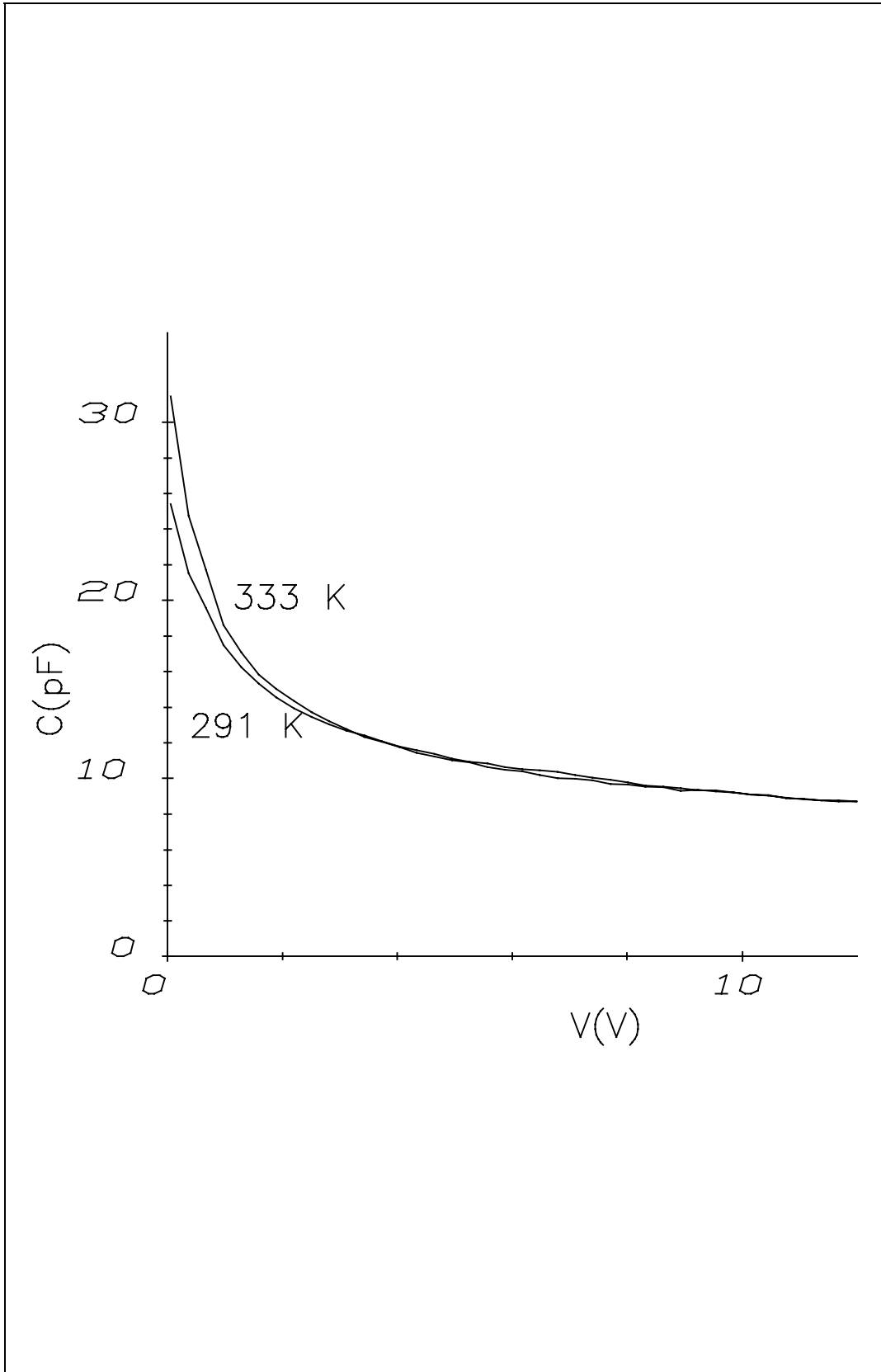


**Figura 6.** Capacidad en alta frecuencia para toda la serie de muestras con sustrato de resistividad  $62.5 \Omega \text{ cm}$





**Figura 7.** Capacidad en alta frecuencia para toda la serie de muestras con sustrato de resistividad  $62.5 \Omega \text{ cm}$



**Figura 8.** Variación de curvas de capacidad en alta frecuencia para una misma muestra a altas temperaturas.

centros profundos donadores van a hacerse notar, estos se muestran eléctricamente activos en la región P. En este intervalo de tensiones la zona de carga espacial sí se reparte en ambas regiones.

Dado que a medida que aumenta la temperatura la ionización de los centros disminuye y que, como se observa en la figura 7, la diferencia entre las curvas de capacidad para muestras con concentraciones de platino distintas es prácticamente inapreciable, las medidas a la temperatura de 333 K nos van a permitir encontrar el perfil de impurezas básicas. Se atenderá al procedimiento expuesto en el esquema de la figura 2 pero considerando la concentración de centros profundos despreciable; para ello hemos de partir de un perfil inicial y de forma iterativa encontrar la mejor distribución cuya curva C-V numérica se ajuste con las curvas experimentales.

Como punto de partida se tomó el perfil calculado por SUPREM. Este perfil se ajustó en la zona N y en la P por sendos tramos exponenciales de manera que al programa se le proporcionan expresiones analíticas. Estas dos exponenciales son:

$$N_D - N_A = N_{D_\infty} \left( 1 - e^{-\frac{x}{\lambda_N}} \right) \quad (4)$$

para la zona N y

$$N_D - N_A = N_{A_0} \left( 1 - e^{-\frac{x}{\lambda_P}} \right) \quad (5)$$

para la zona P.

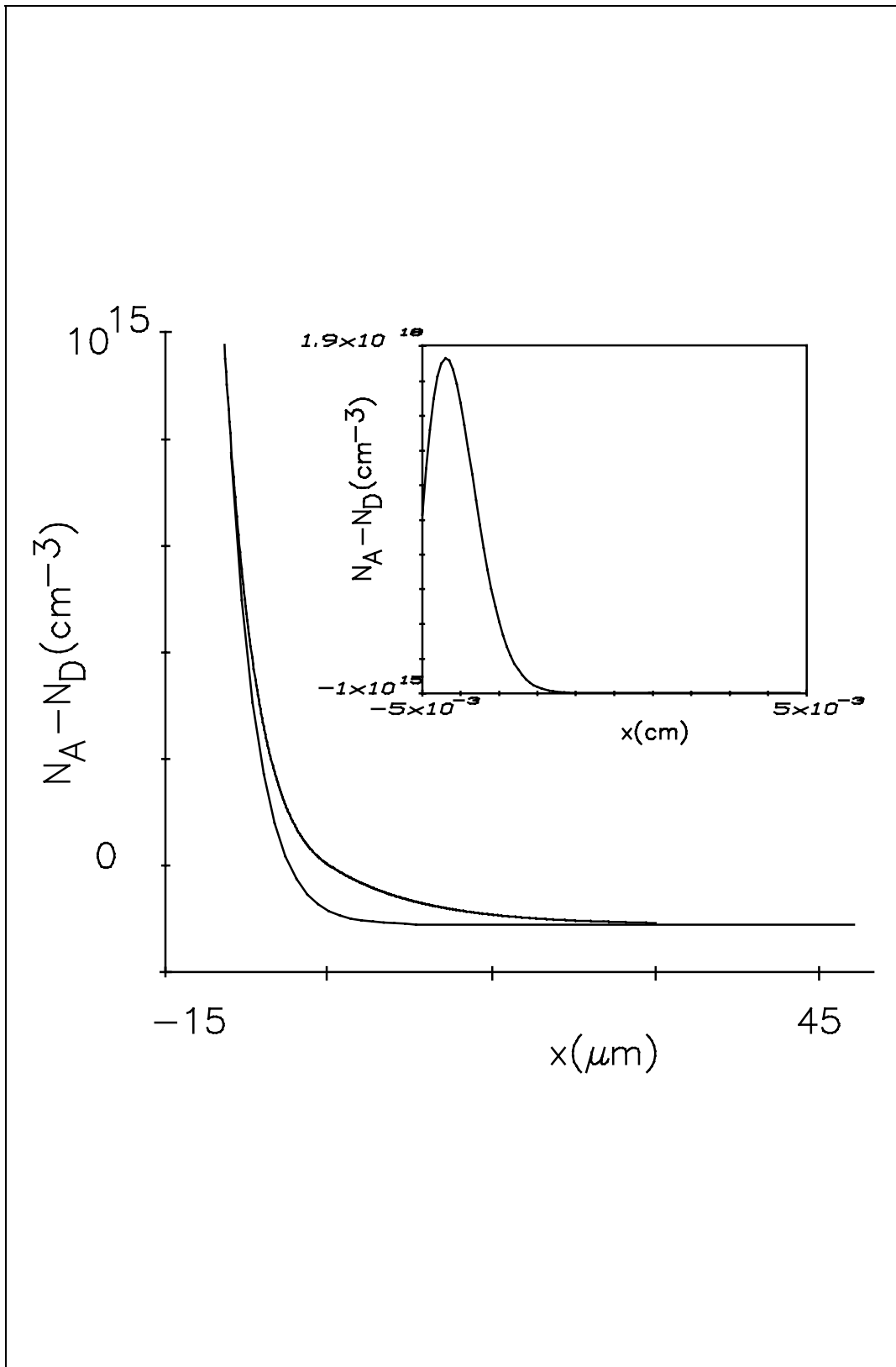
En estas expresiones aparecen cuatro variables  $\lambda_n$ ,  $\lambda_p$ ,  $N_{D_\infty}$  y  $N_{A_0}$ ; el ajuste por mínimos cuadrados del perfil de SUPREM mediante estas dos expresiones nos proporcionó esos cuatro parámetros para dos conjuntos de muestras con diferente concentración de impurezas en el sustrato. En el proceso iterativo, para calcular el perfil real, no se modificarán todas necesariamente después de cada iteración, tres de ellas las fijaremos con condiciones de contorno. La región de la unión que más influye en la capacidad es la situada alrededor de la unión metalúrgica por lo que vamos a centrarnos

en las variaciones del perfil en esta zona. Vamos a considerar como perfil válido para las zonas alejadas de la unión el que nos proporciona SUPREM, esas regiones vienen caracterizadas, en la zona N, al ser constante la concentración, por el valor del parámetro  $N_{D\infty}$ , que para los dos tipos de sustrato de que disponemos es, según el ajuste por mínimos cuadrados:  $6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  ó  $1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ; y en la P al ser el perfil rápidamente variable por el valor  $\lambda_p$ , que también para los dos tipos de muestras el ajuste del perfil de SUPREM en la zona P por una exponencial nos da  $3.1 \text{ }\mu\text{m}$  y  $2.9 \text{ }\mu\text{m}$  respectivamente. Estos dos parámetros quedan fijos ya durante el proceso. En el origen se impone la continuidad de las dos expresiones anteriores y de sus derivadas. La continuidad de las ecuaciones 4 y 5 está garantizada y la de sus derivadas obliga a que

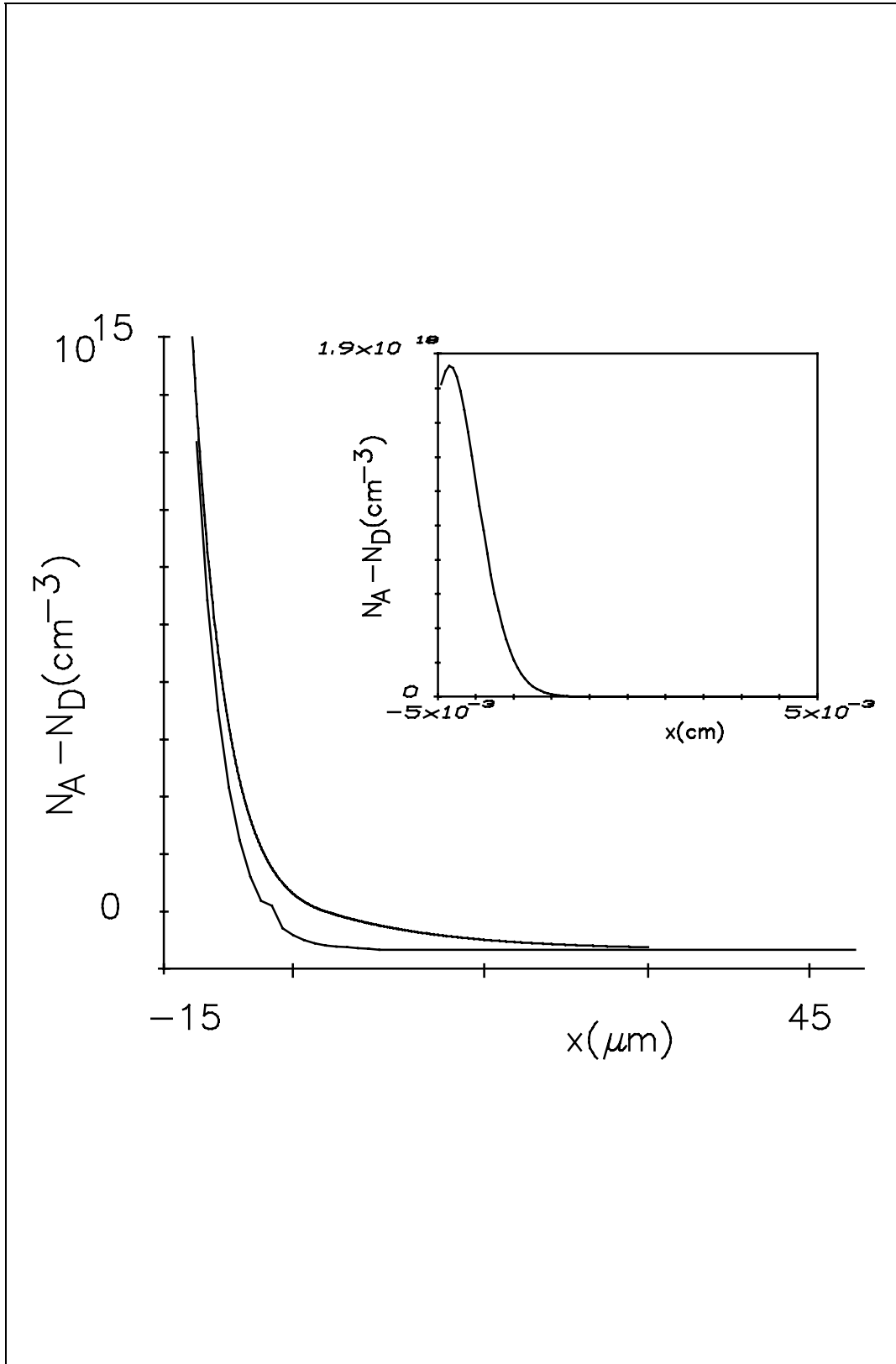
$$N_{A_0} = -N_{D\infty} \frac{\lambda_P}{\lambda_N} \quad (6)$$

Así pues queda un único parámetro como variable, se elige el  $\lambda_N$ , que es el que nos da información sobre la pendiente del perfil en la zona N cerca de la unión, y el  $N_{A_0}$  se expresa en función de éste. Como resultado de este proceso iterativo, cuyo fin fue ajustar las curvas de capacidad-tensión experimentales medidas a 333 K mediante curvas simuladas por ordenador, se obtuvo: para muestras de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\lambda_N=11 \text{ }\mu\text{m}$ , y para sustratos  $N_D=1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\lambda_N=7.8 \text{ }\mu\text{m}$ .

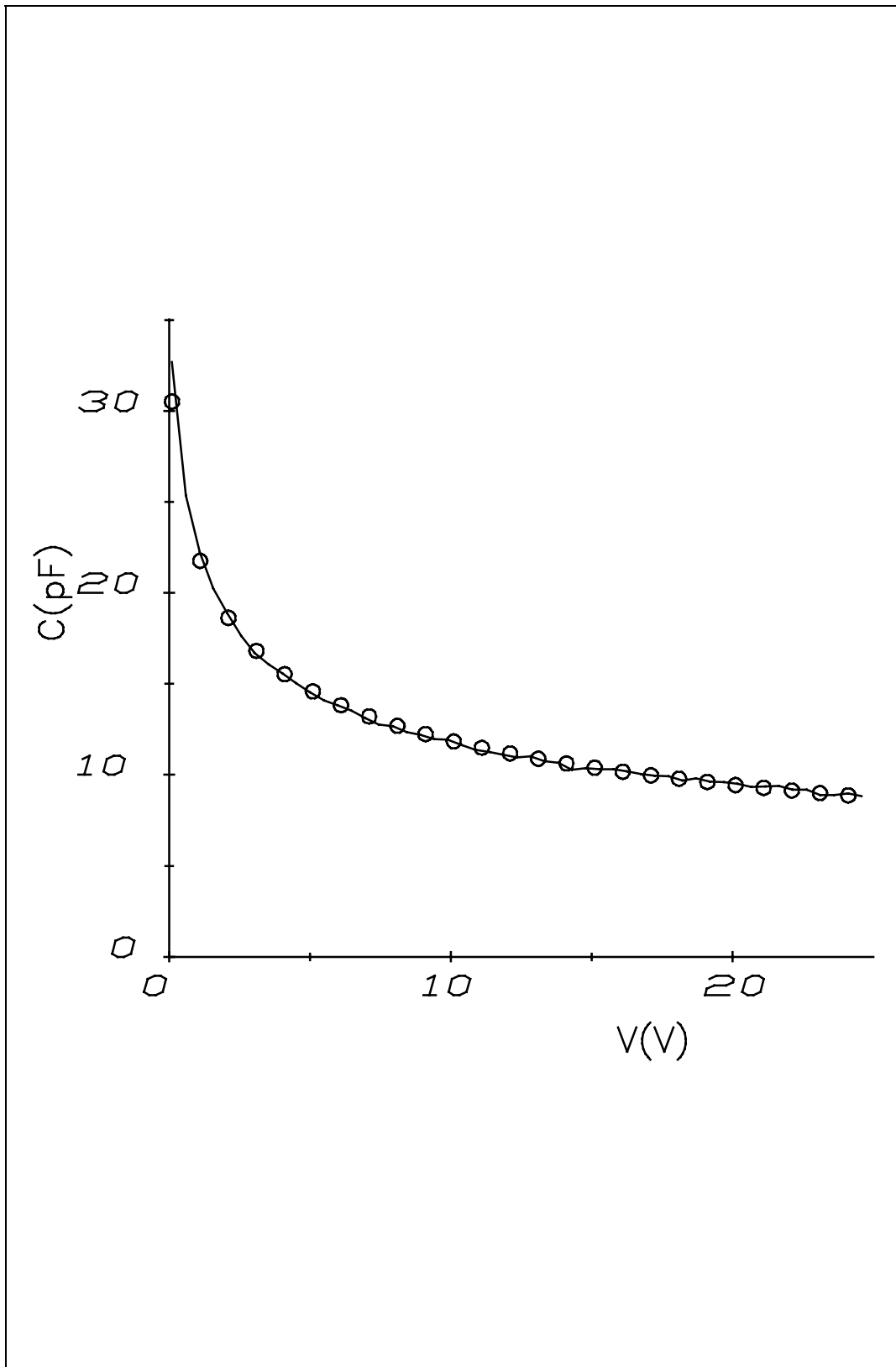
Los perfiles de impurezas básicas completos, así obtenidos, para estos dos tipos de muestras se observan en las figuras 9 y 10 respectivamente. En las dos nuestro perfil calculado se muestra a la derecha del perfil obtenido por SUPREM. Se detalla también en un recuadro superior los mismos perfiles extendidos ya a toda la muestra. Se puede ver como a grandes escalas ambos se superponen aunque si reducimos la misma y nos centramos en regiones próximas a la unión nuestro perfil obtenido es algo más suave, menos abrupto que el que nos proporciona SUPREM.



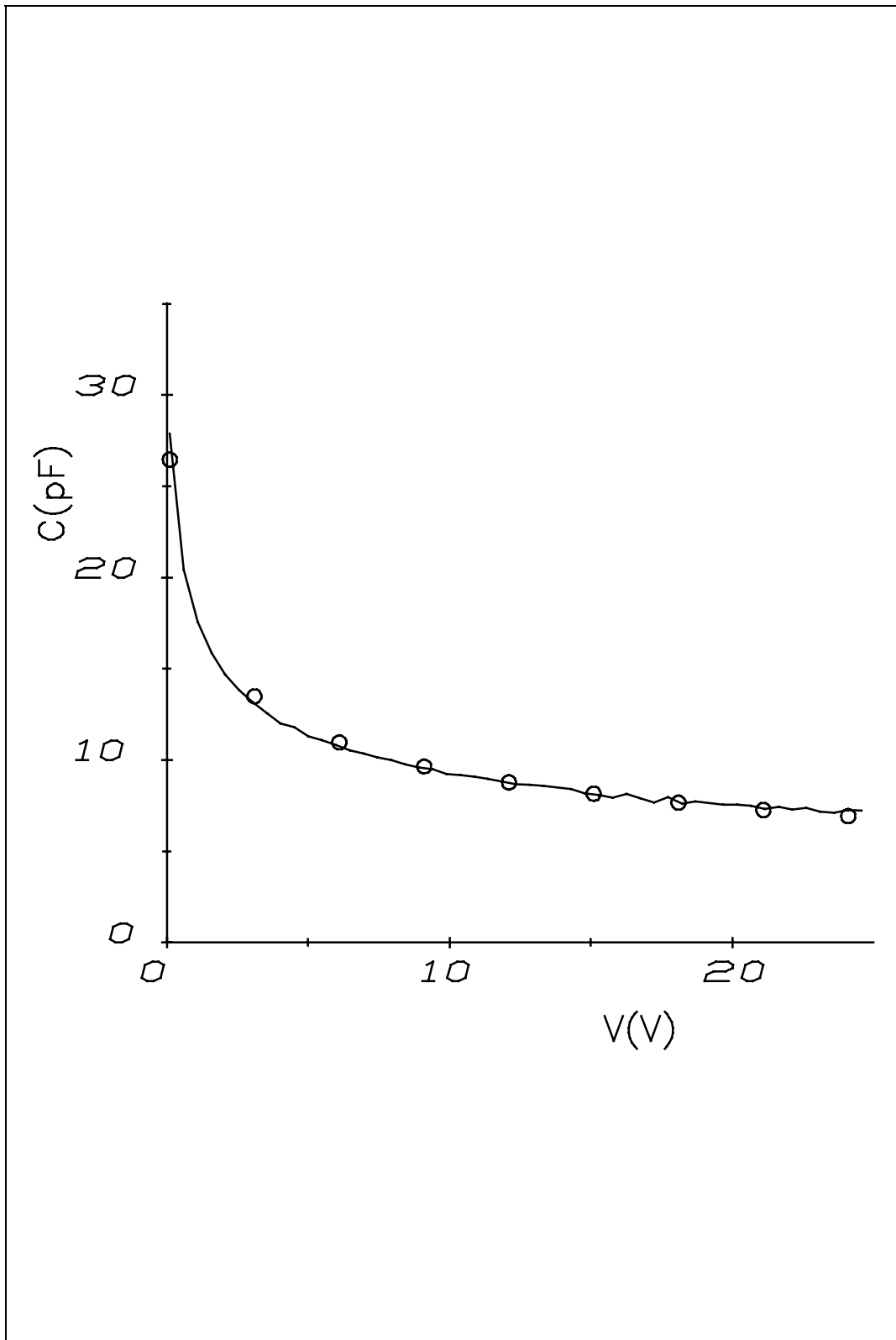
**Figura 9.** Comparación del perfil de impurezas calculado (DER.) y el proporcionado por SUPREM (IZQ. y recuadro superior). Muestras con concentración en el sustrato  $N_D = 1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 10.** Comparación del perfil de impurezas calculado (DER.) y el proporcionado por SUPREM (IZQ. y recuadro superior). Muestras con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 11.** Valores medidos (trazo continuo) y calculados (o) de la capacidad en alta frecuencia a 333K. Muestras con concentración en el sustrato  $N_D=1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

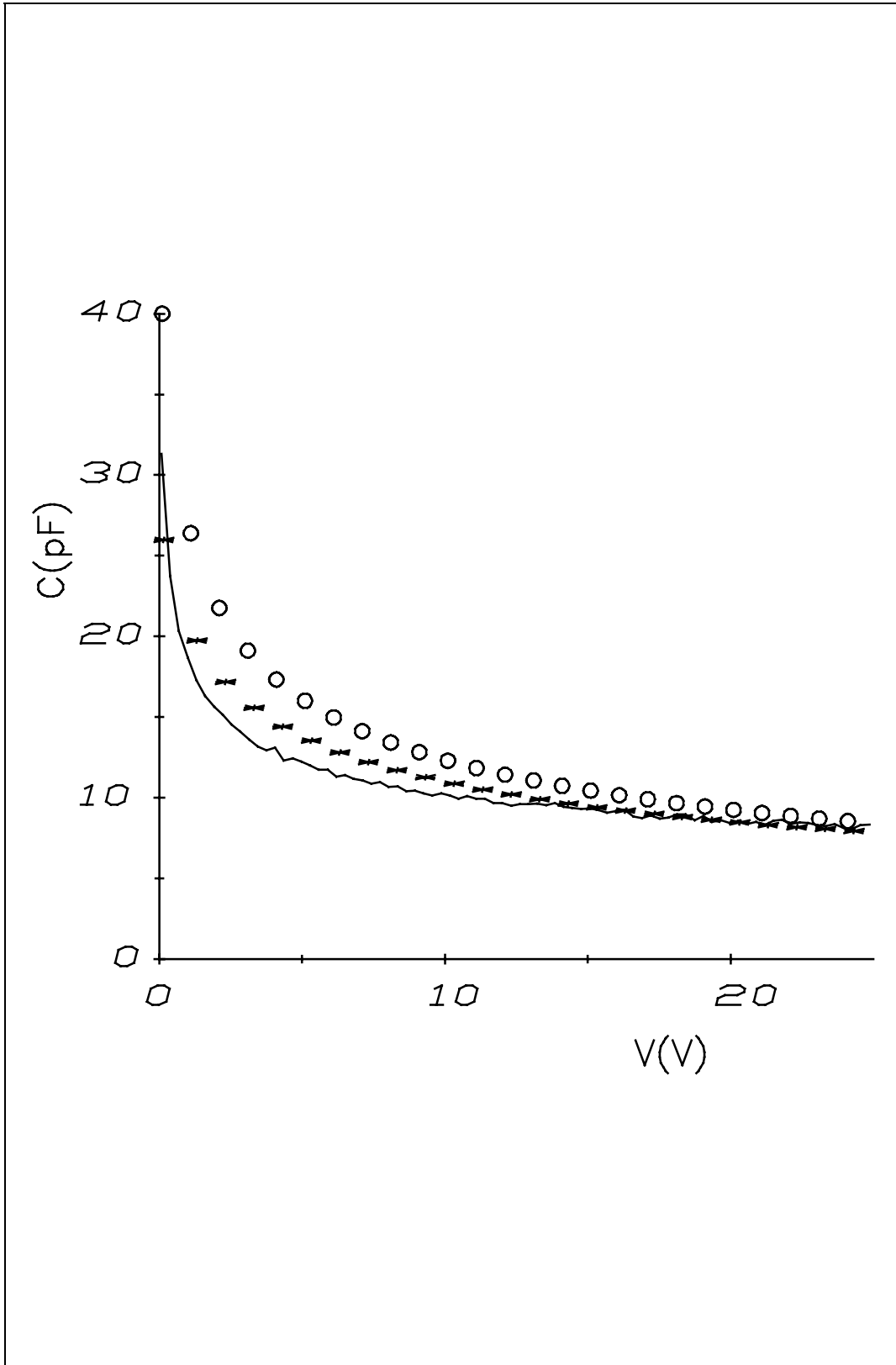


**Figura 12.** Valores medidos (trazo continuo) y calculados (o) de la capacidad en alta frecuencia a 333K. Muestras con concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .



La comparación entre las curvas capacidad-tensión obtenidas como resultado de la simulación y las experimentales para los dos tipos de muestras se puede observar en las figuras 11 y 12. Las curvas experimentales se muestran a trazo continuo y las simuladas representadas mediante círculos. Cabe destacar el perfecto ajuste entre ambos resultados para las dos series de uniones.

Recordemos que el objetivo inicial era la obtención del perfil de impurezas básicas en la unión. Una vez conseguido para dos conjuntos diferentes de muestras y vista la diferencia que existe con el perfil que en un principio nos proporcionó SUPREM, queda por ver como modificaría éste las curvas de capacidad. La influencia que tiene el elegir el perfil proporcionado por SUPREM en lugar del que hemos calculado se puede comprobar a través del comportamiento eléctrico, curva capacidad-tensión, de una muestra con esa distribución de impurezas. En la figura 13 y con círculos se muestra la curva de capacidad simulada para este tipo de muestra, en trazo continuo la experimental medida a 333 K. También se ha añadido otra curva de capacidad simulada para una muestra con perfil de impurezas básicas igual que en el caso anterior pero añadiéndole la contribución de centros profundos (con asteriscos). Intencionadamente se ha supuesto una muestra fuertemente compensada para analizar su influencia sobre la curva sin centros y compararla a su vez con la experimental. Las concentraciones de centros profundos que se utilizan en este caso de simulación y aparecen en esta figura son  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  y  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  para los niveles que se han denominado  $E_{T1}$  y  $E_{T2}$  respectivamente. Cualquier otro par de valores de concentraciones proporciona una curva comprendida entre las dos representaciones teóricas con y sin centros. En esta figura existe un claro desajuste entre la curva de capacidad experimental y las calculadas para el perfil de impurezas básicas proporcionado por SUPREM: A bajas tensiones los valores reales de la capacidad son unas tres cuartas partes de los valores simulados sin centros, la capacidad para muestras muy compensadas quedaría algo por debajo de la experimental. A tensiones altas, grandes regiones de la zona de carga espacial, es la



**Figura 13.** Capacidad en alta frecuencia a 333 K. Valores experimentales en continua. Valores simulados partiendo del perfil de SUPREM sin centros (o); simulados con centros (\*).

curva simulada sin centros la que mejor se aproxima a la real, la compensación de la tercera curva hace que descienda por debajo de los valores experimentales. La región intermedia no se inclina a favor de ninguna de las curvas simuladas.

Queda justificado por tanto que la variación de las concentraciones de impurezas profundas no va a permitir el ajuste de esta curva experimental sino que es el perfil de impurezas básicas, proporcionado por SUPREM, el que debe modificarse para asegurar dicho ajuste, como previamente ha quedado demostrado por la exactitud entre las curvas experimentales y las teóricas calculadas con nuestro perfil.

A medida que se van comprendiendo mejor una serie de temas que subyacen en la física del estado sólido y en la química y que son esenciales para la simulación de dispositivos los resultados de los modelos de proceso van adquiriendo cada vez más certeza. La necesidad de modelos de proceso es creciente, particularmente en el desarrollo de dispositivos integrados y su tecnología, principalmente debido al fuerte acoplamiento que existe entre los efectos de dispositivos de dos y tres dimensiones con su perfil de impurezas [85]. Uno de estos programas ampliamente establecido es el programa SUPREM [86,87].

La localización exacta de una unión, que es uno de los resultados más importantes que se pueden obtener de los procesos de modelado, depende de la interacción de la zona de carga espacial en la unión con el potencial electrostático, particularmente si uno trata con uniones abruptas con tendencia a gradual [88].

El campo eléctrico en la unión puede alterar de manera significativa la conducta del proceso de difusión cerca de esta zona y por tanto afectar a la uniformidad de las impurezas y al emplazamiento correcto de la unión. El campo eléctrico en la unión afecta, durante la difusión, de la misma manera que el campo eléctrico interno que resulta del gradiente de concentración de impurezas. El campo puede producir perfiles de difusión con coeficientes de difusión mayores o menores cerca de la unión y asimismo apilar o vaciar dicha región de las especies dopantes.

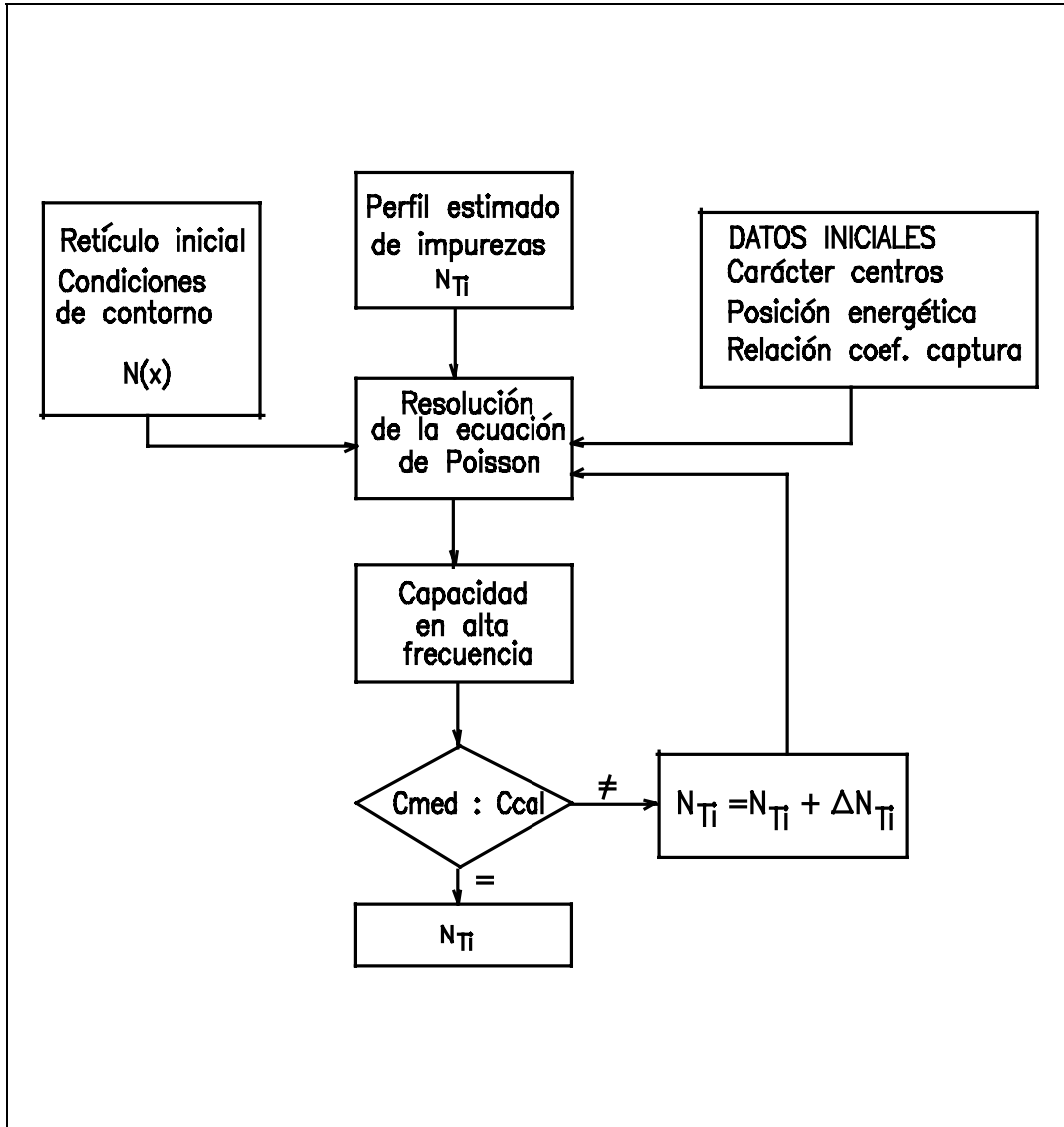
Los coeficientes de difusión que se han calculado cerca de una unión PN ajustando cada punto de una unión fabricada por difusión como perteneciente a una función error pueden conducir a incorrecciones [88]. Ni incluso a la inversa, los coeficientes de difusión pueden predecir por si solos la conducta de una impureza próxima a una unión. Por supuesto hay situaciones en las que el campo eléctrico influye de manera despreciable: bajo nivel de impurezas, pequeño ancho de la banda prohibida, alta temperatura durante los procesos de difusión que hacen que el semiconductor se comporte como intrínseco; especies difundidas neutras; especies difundidas presentes en mayor concentración durante el proceso de difusión que las especies de tipo contrario en situación estacionaria, etcétera. El conocimiento de los efectos de los campos eléctricos en la unión permite la construcción de perfiles más complejos que los obtenidos por las combinaciones de funciones error.

En cualquier caso, a la vez que se dispone de muchos programas capaces de modelar los distintos pasos en los procesos de fabricación y que han resultado ser herramientas de probada calidad, necesitamos elementos de caracterización de los dispositivos ya fabricados. Sistemas de caracterización que recorran el trayecto al lado de estos programas de simulación y que permitan descubrir las deficiencias que estos puedan presentar hoy en día. El diseño óptimo de un dispositivo implica poder predecir cual es el efecto de modificar una etapa del proceso de fabricación, pero una vez terminado, es la caracterización del mismo la que juega el papel decisivo.

### **3.4 DETERMINACIÓN DE PERFILES DE CONCENTRACIÓN DE IMPUREZAS PROFUNDAS. CURVAS C-V A BAJAS TEMPERATURAS.**

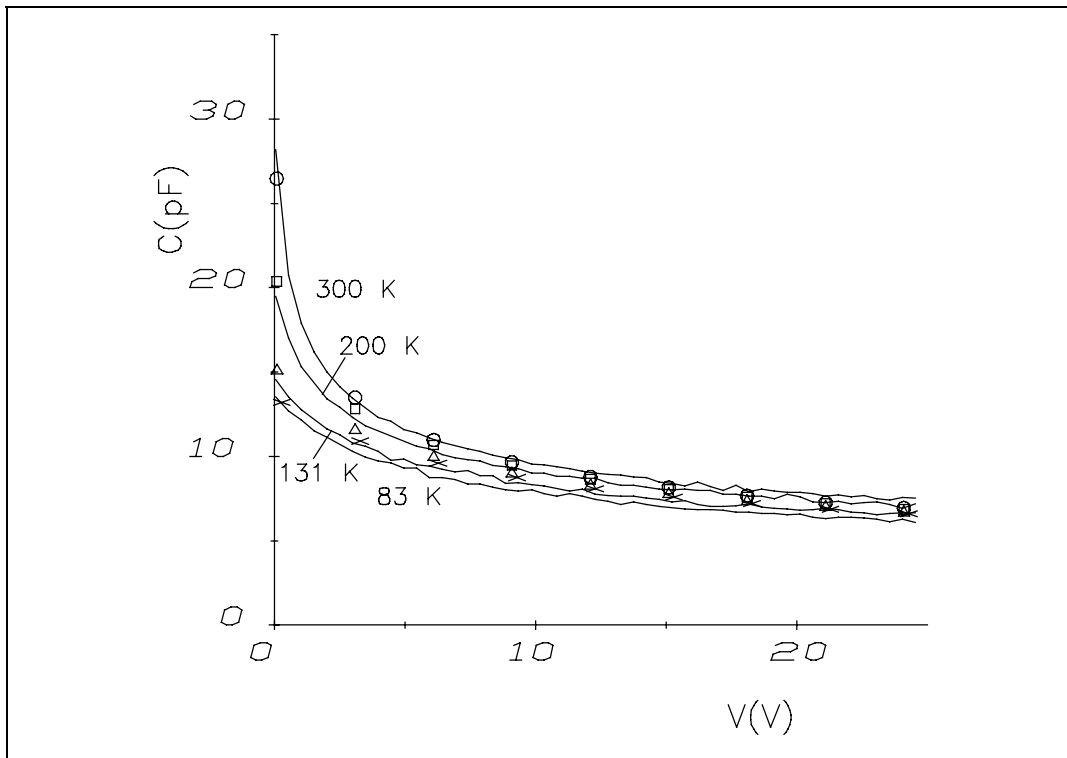
La baja concentración de impurezas profundas ionizadas a altas temperaturas ha permitido calcular por separado el perfil de impurezas básicas sin la necesidad de tener que introducir dos variables más en este proceso iterativo, correspondientes a los dos niveles profundos detectados. Para la determinación de la concentración de impurezas profundas es necesario disponer al menos de dos curvas de capacidad-tensión medidas a diferentes temperaturas, ya que son dos los niveles de energía localizados en la banda prohibida. La interpretación de las medidas de capacidad puede resultar difícil con la presencia de una alta concentración de centros profundos. Por otro lado la ecuación unidimensional de Poisson, en la forma que aparece en los dispositivos semiconductores no degenerados, no tiene una solución analítica o directa. La simulación de una unión PN con alta concentración de centros profundos mediante la solución numérica de la ecuación de Poisson nos permitirá explicar las medidas de capacidad en alta frecuencia.

La evolución de los factores de ocupación con la temperatura para estos centros no ha permitido encontrar un intervalo donde sólo uno de los niveles contribuya por separado a la respuesta eléctrica del diodo. Esto impide que se analicen los niveles aisladamente, como ya se hizo para las impurezas poco profundas. Tendremos por tanto que simular dos curvas de capacidad modificando de manera iterativa y conjunta las concentraciones de los centros  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$ , que se toman como las variables del proceso. El desarrollo de esta simulación se puede seguir en la figura 14. En esta nueva situación el perfil de impurezas básicas,  $N(x)$ , se introduce como dato, así como las energías de activación de los centros y su estado de carga.

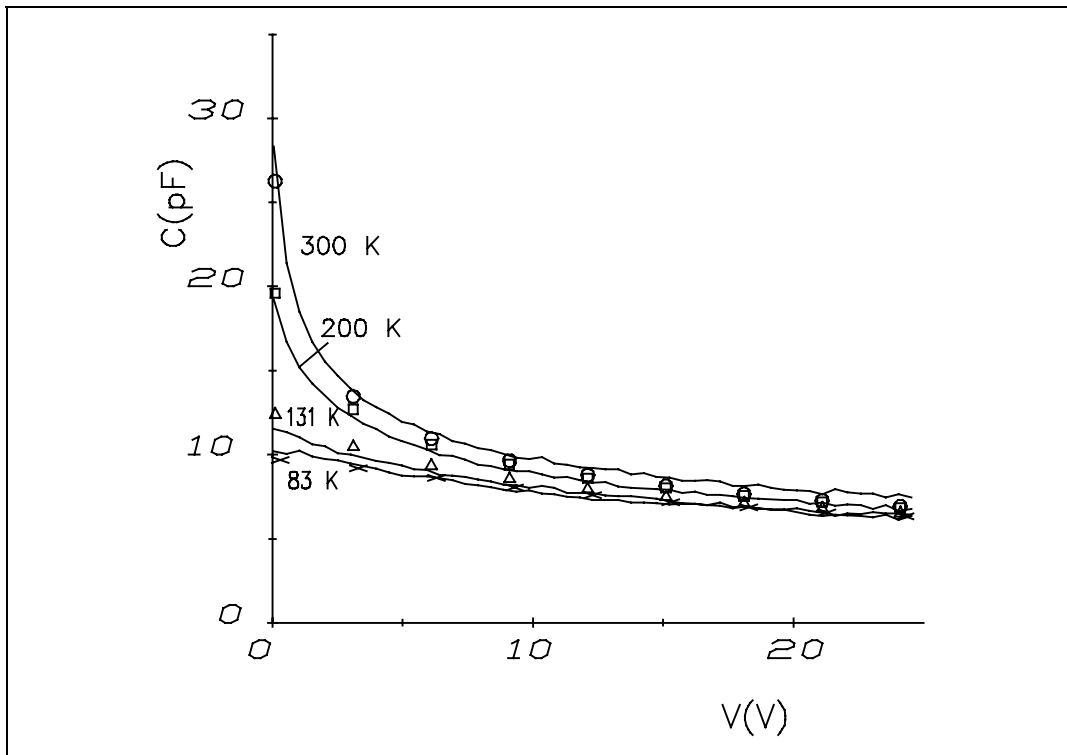


**Figura 14.** Diagrama de flujo para la obtención de las concentraciones de centros profundos en la unión una vez conocido el perfil de impurezas básicas.

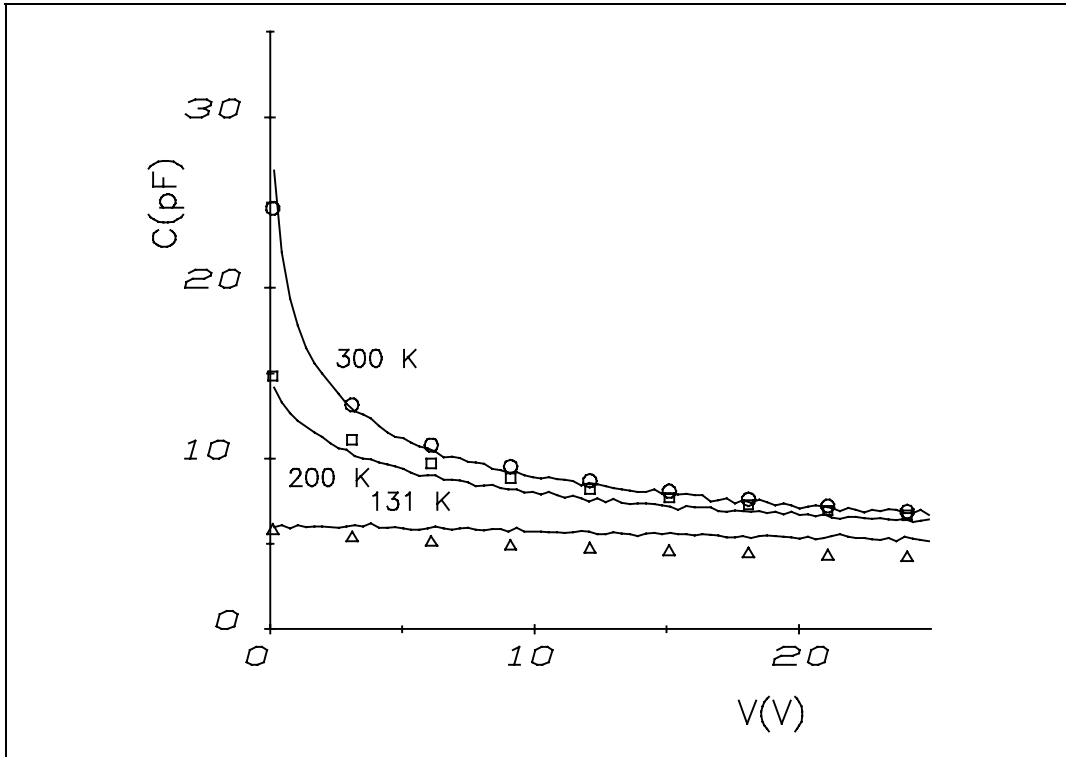
### 3.4.1 COMPARACIÓN DE RESULTADOS EXPERIMENTALES Y TEORICOS.



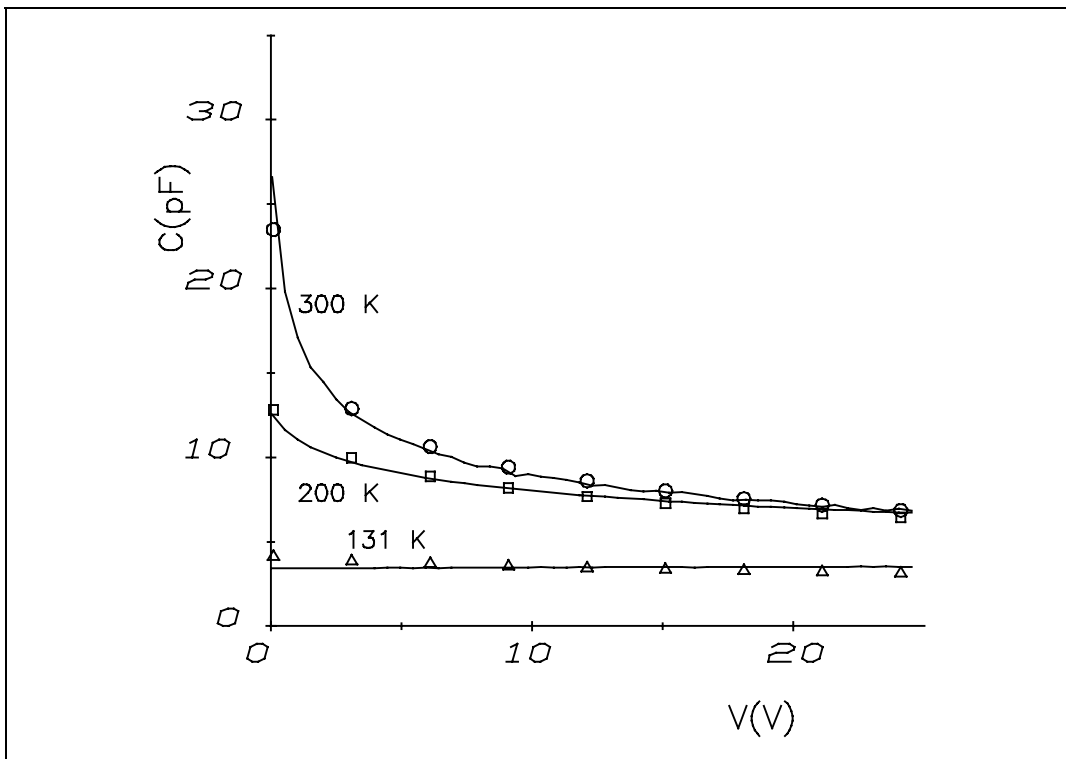
**Figura 15.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino 850 °C.



**Figura 16.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino 860 °C.

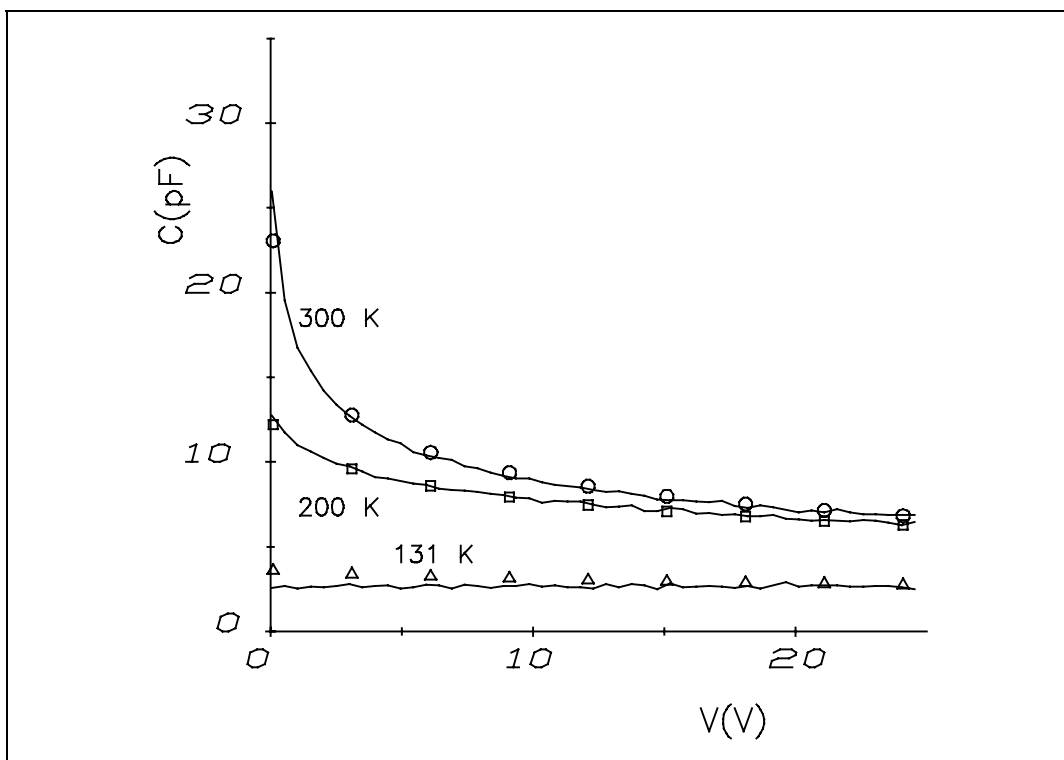


**Figura 17.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $870 \text{ }^\circ\text{C}$ .

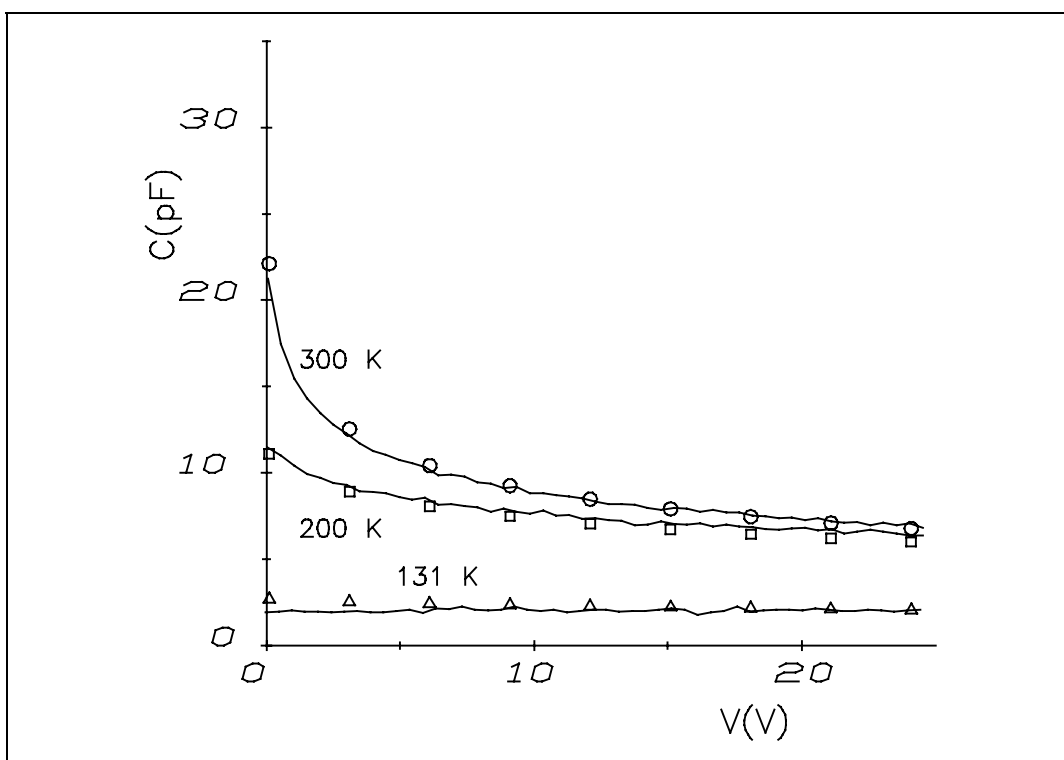


**Figura 18.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $890 \text{ }^\circ\text{C}$ .

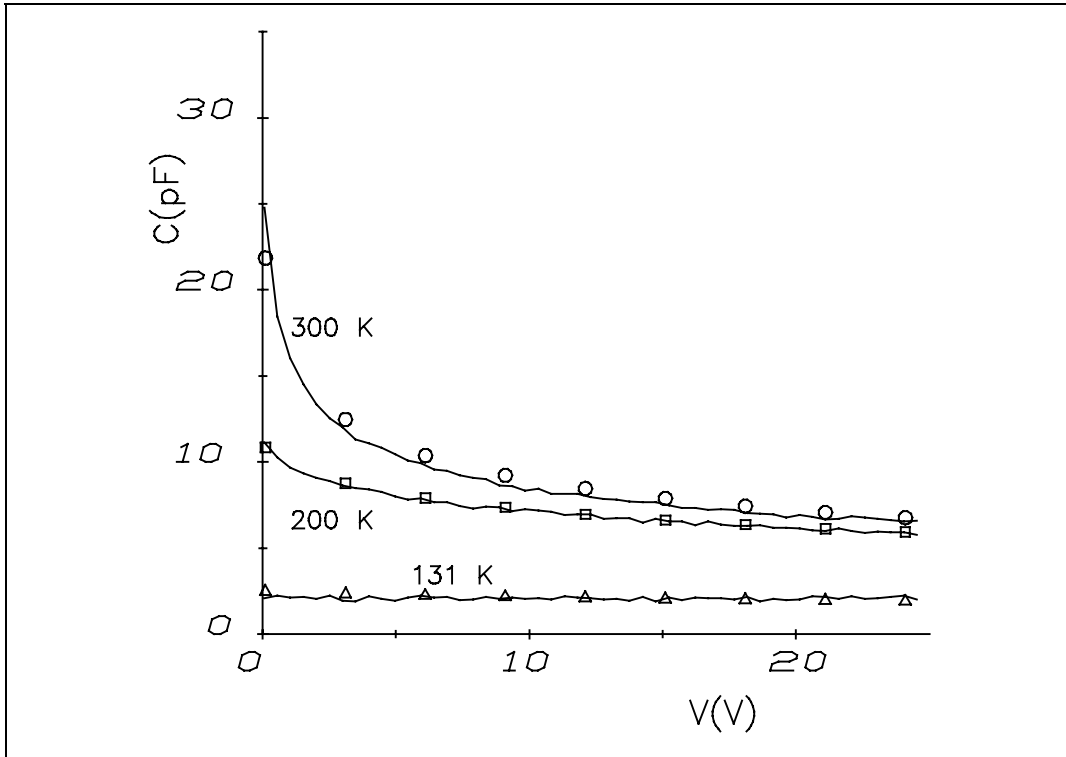




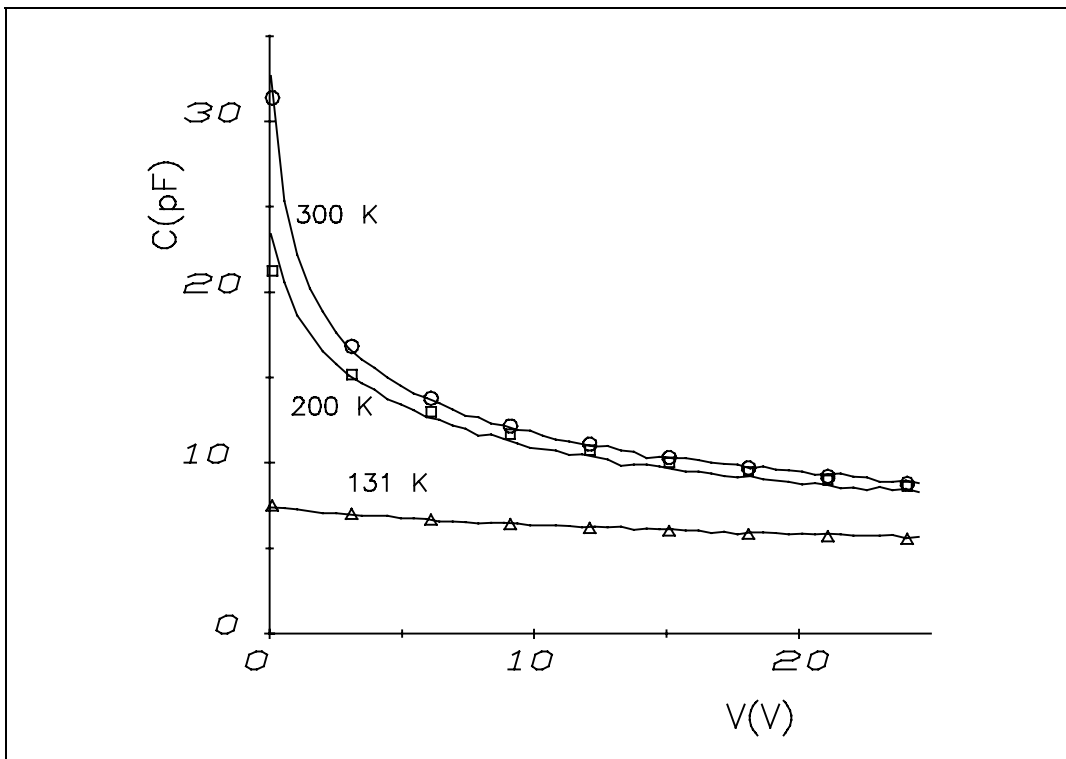
**Figura 19.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $900 \text{ }^\circ\text{C}$ .



**Figura 20.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $910 \text{ }^\circ\text{C}$ .



**Figura 21.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $920 \text{ }^\circ\text{C}$ .



**Figura 22.** Capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa. Muestra de sustrato  $N_D=1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Temperatura de difusión del platino  $880 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Las medidas experimentales de la capacidad en alta frecuencia en función de la tensión inversa aplicada se obtuvieron a cuatro temperaturas: 83 K, 131 K, 200 K y 300 K, en un margen de tensiones comprendido entre 0 y 25 V. Estas curvas se midieron sobre diodos con platino difundido a temperaturas pertenecientes al intervalo [850 °C, 920 °C] para dos concentraciones diferentes de impurezas donadoras en el sustrato tipo N ( $6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y  $1.11 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ); todas ellas se pueden observar en las figuras 15 a 22 en trazo continuo.

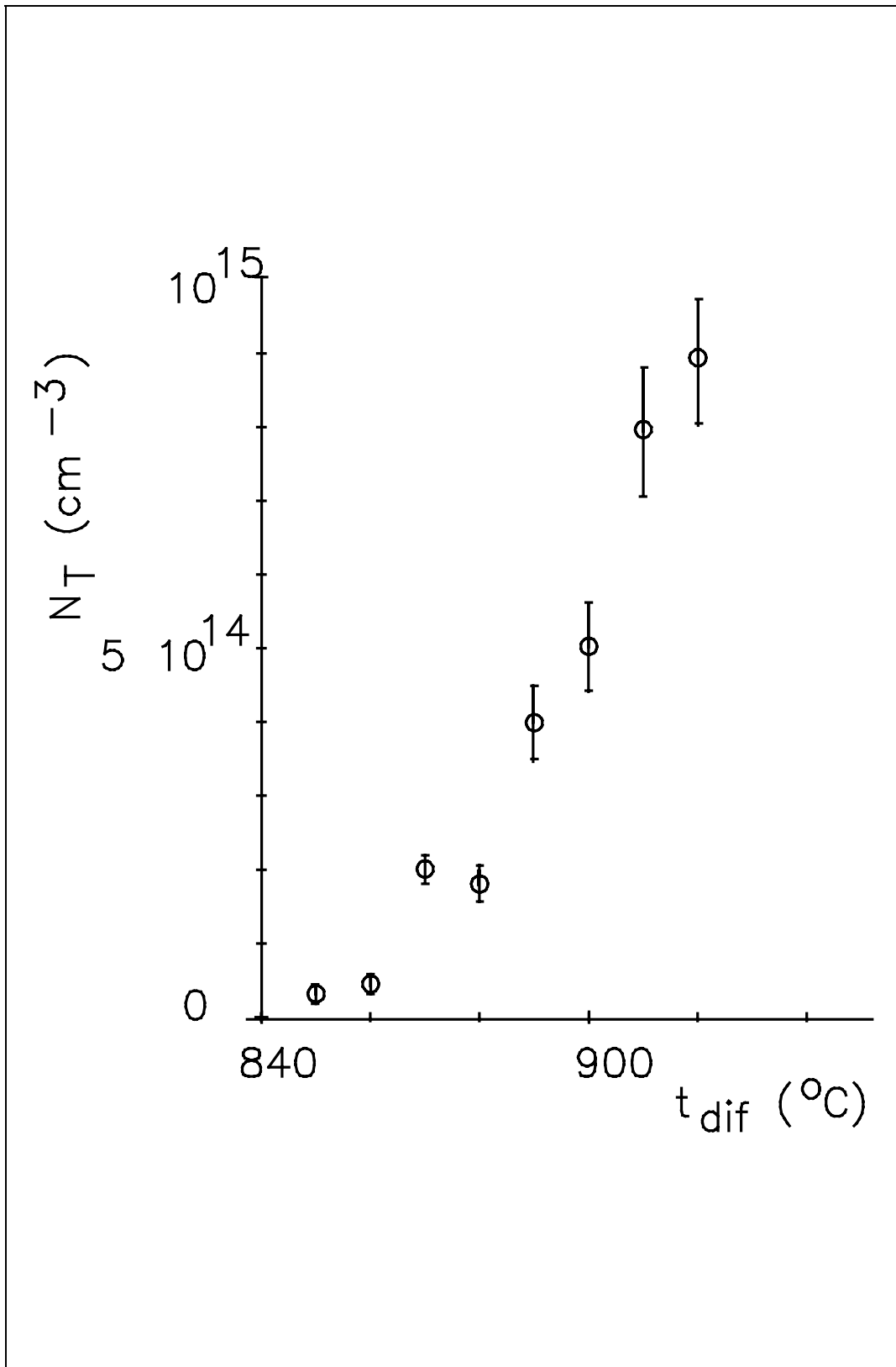
El tratamiento numérico de la ecuación de Poisson y el posterior cálculo de la capacidad en alta frecuencia se realizó para los mismos valores de tensión de polarización y de temperatura que las medidas experimentales. Sobre las curvas anteriores se representan con símbolos los resultados de esta simulación (o, 300 K; □, 200 K; Δ, 131 K; x, 83 K). Del ajuste entre los datos experimentales y los datos obtenidos por ordenador se pueden deducir los valores de  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$ .

Las dos variables resultan ser iguales y comprendidas entre  $3.2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y  $8.9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , según se muestra en la tabla 1, para el rango de temperaturas de difusión del platino mencionado anteriormente (figura 23).

En cualquiera de las figuras 15 - 22 se observan una serie de factores que pueden ayudar a comprender el comportamiento de nuestros diodos.

Para una misma muestra, a medida que disminuye la temperatura y para una tensión fija descienden los valores de la capacidad, reflejo de la presencia de centros profundos. La diferencia de los valores de capacidad no es igual para valores distintos de tensión ni para distintos pares de curvas.

Entre 300 K y 200 K el incremento de capacidad es mayor a polarizaciones próximas a cero voltios, es decir, cerca de la unión, y menor cuando nos alejamos de ella. El paso de 200 K a 131 K provoca un cambio brusco en la capacidad para valores bajos de la tensión inversa de polarización. Estas características reflejan varios hechos: a) la existencia de varios niveles profundos con distinta energía de



**Figura 23.** Concentración de los centros profundos creados por el platino en nuestras muestras en función de la temperatura de difusión del mismo.  $N_{T1} = N_{T2} = N_T$ .

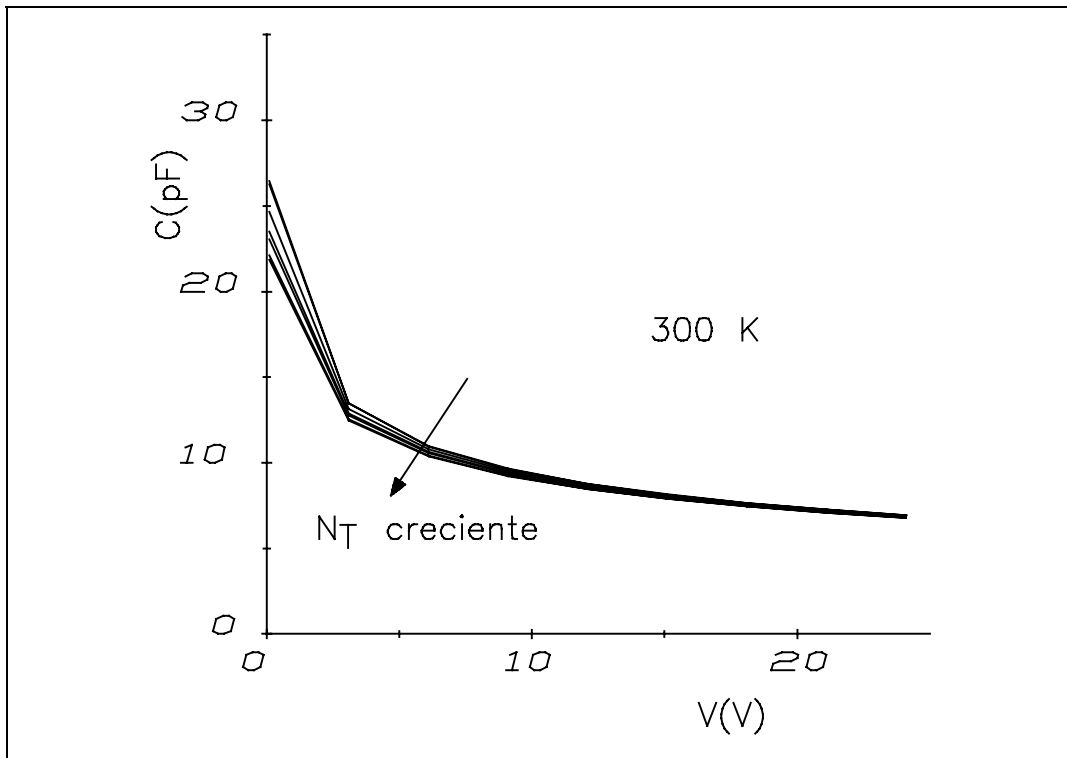
activación, el grado de ionización de estos niveles depende de la temperatura, la modificación de las concentraciones de portadores libres depende del número de impurezas ionizadas; todo ello influye por tanto en las curvas de capacidad obteniéndose representaciones diferentes con la temperatura y b) la gradualidad de la unión, por el diferente comportamiento del incremento de la capacidad a distintas tensiones. En las figuras donde se representan medidas de capacidad a las cuatro temperaturas mencionadas, se puede observar como en el salto de 131 K a 83 K prácticamente las curvas son coincidentes: en esa región de temperaturas los dos niveles están ya prácticamente ionizados y por lo tanto su contribución va a ser similar a esas dos temperaturas.

| <b>Temperatura difusión Pt</b> | <b>Concentración Pt. <math>N_{T1}=N_{T2}</math></b>       |
|--------------------------------|---|
| 850 °C                         | $3.2 \cdot 10^{13} \pm 0.4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ |
| 860 °C                         | $4.5 \cdot 10^{13} \pm 0.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ |
| 870 °C                         | $2.0 \cdot 10^{14} \pm 0.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| 880 °C                         | $1.8 \cdot 10^{14} \pm 0.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| 890 °C                         | $4.0 \cdot 10^{14} \pm 0.5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| 900 °C                         | $5.0 \cdot 10^{14} \pm 0.6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| 910 °C                         | $8.0 \cdot 10^{14} \pm 1.0 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| 920 °C                         | $8.9 \cdot 10^{14} \pm 1.1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |

**Tabla 1**

En las curvas adquiridas a temperaturas inferiores y para muestras caracterizadas por una temperatura de difusión del platino mayor (figuras 17 a 21), se puede observar como al disminuir la tensión inversa aplicada la capacidad prácticamente permanece constante. Si quisiéramos representar el ancho de la zona de carga espacial en función de la tensión observaríamos la invariabilidad de la región de deplexión. Una interpretación de este resultado sería que las impurezas profundas compensan a las poco

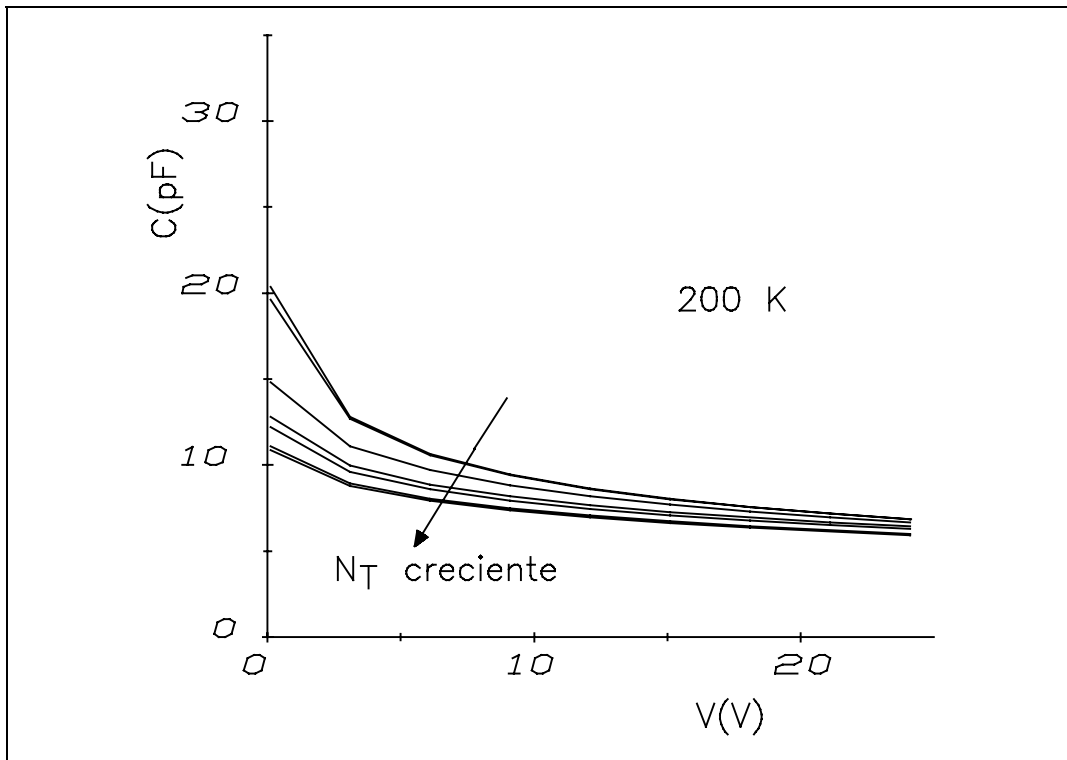
profundas haciendo que la zona de carga espacial se extienda a toda la unión y con este límite físico no podría crecer más. Pero de acuerdo con la elaboración teórica desarrollada en el capítulo 1 este bloqueo de la capacidad va a estar motivado por la aparición de un campo eléctrico no nulo en el borde de la zona de carga espacial que impide el crecimiento de la misma.



**Figura 24.** Evolución de las curvas de capacidad en alta frecuencia con la concentración de platino. Para mayor concentración de este elemento valores más bajos.

La evolución de las curvas de capacidad medidas a una misma temperatura pero para muestras con distinta concentración de centros profundos se observan en las figuras 24, 25 y 26; en ellas se representan curvas tomadas a 300 K, 200 K y 131 K respectivamente. El parámetro variable es la temperatura de difusión del platino o lo que es lo mismo la densidad de este elemento presente en las muestras, las curvas representadas corresponden a las muestras de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .

A mayor concentración de centros profundos y para todas las temperatu-



**Figura 25.** Evolución de las curvas de capacidad en alta frecuencia con la concentración de platino. Para mayor concentración de este elemento valores más bajos.

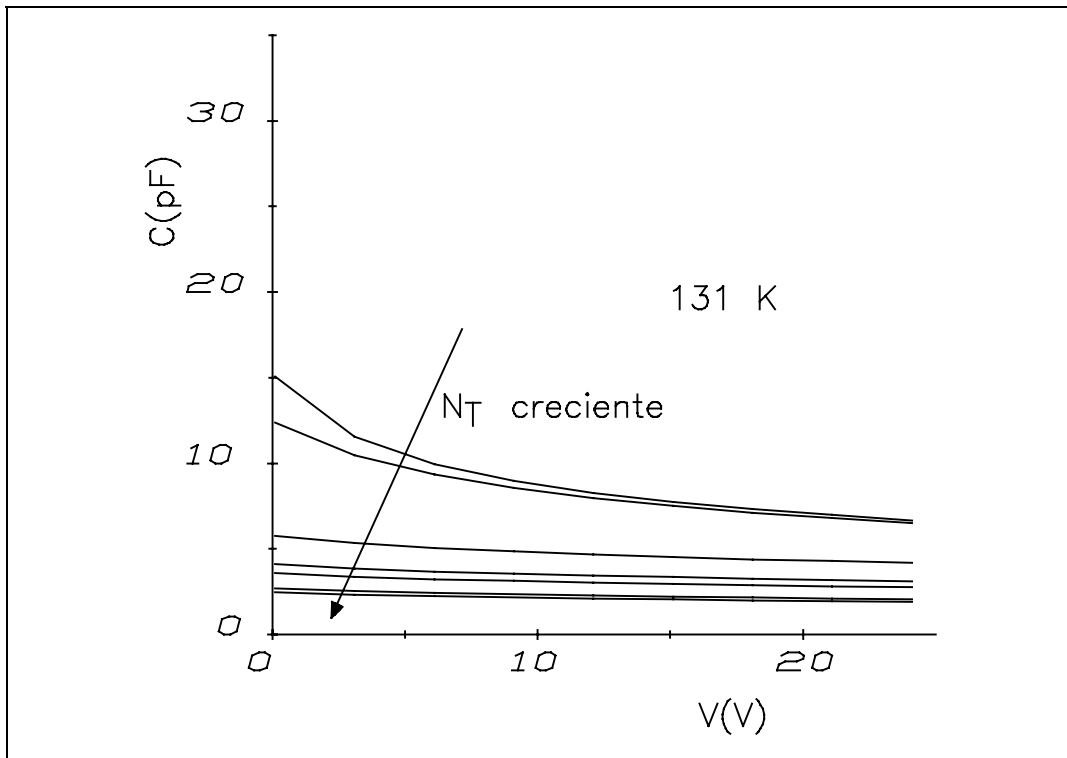
ras, las curvas de capacidad en su conjunto toman valores cada vez menores.

A medida que se disminuye la temperatura de la medida la diferencia entre curvas es mayor.

Las razones por las que disminuye la capacidad son dos: por el hecho de aumentar la concentración de centros profundos, (se observa si se mantiene fija la temperatura y se varía la concentración de los centros) o por el hecho de aumentar la ionización de los niveles al disminuir la temperatura (este caso se comprueba si se analiza una misma muestra y se varía la temperatura).

Cuanto más influyan los niveles, por concentración de impurezas o por grado de ionización, las curvas de capacidad presentan un aspecto cada vez más plano y de menor valor, -región de carga espacial cada vez menos variable y más extensa respectivamente-, indicando mayor grado de compensación de las muestras.

El término compensación en estas muestras puede ser más amplio o



**Figura 26.** Evolución de las curvas de capacidad en alta frecuencia con la concentración de platino. Para mayor concentración de este elemento valores más bajos.

diferente del que conocemos; una descripción eléctrica completa de la unión en base a distribución de campo eléctrico, factores de ocupación y distribución de portadores nos ayudará a esclarecer de manera definitiva la evolución de estas curvas de capacidad con la temperatura y la concentración de platino.

### 3.5 MODELO DE DIFUSIÓN DE IMPUREZAS. JUSTIFICACIÓN DE LA CONSTANCIA DE LA CONCENTRACIÓN DE CENTROS PROFUNDOS.

Aparte del valor numérico obtenido para la concentración de platino en el silicio hay que destacar dos puntos más de este resultado: la constancia del perfil de impurezas profundas y la igualdad de concentración de los dos niveles detectados en el semiconductor. Vamos a justificar ahora estos dos puntos atendiendo al modelo utilizado para la difusión del platino en el silicio y comparando nuestros resultados con trabajos



previos.

Después de la deposición de los átomos de impurezas sobre la superficie del semiconductor, éstos se redistribuyen en la oblea mediante un tratamiento térmico. Justo después del depósito de impurezas en el semiconductor se pueden suponer éstas distribuidas uniformemente en una lámina de concentración  $N$  por unidad de área. Si consideramos que la difusión posterior distribuye esta cantidad fija de impurezas, la solución a la ecuación de difusión nos proporciona una distribución gaussiana [89]: donde

$$N(x,t) = \frac{N}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (7)$$

$D$  es el coeficiente de difusión y el producto  $2(Dt)^{1/2}$  nos indica la longitud característica de difusión.

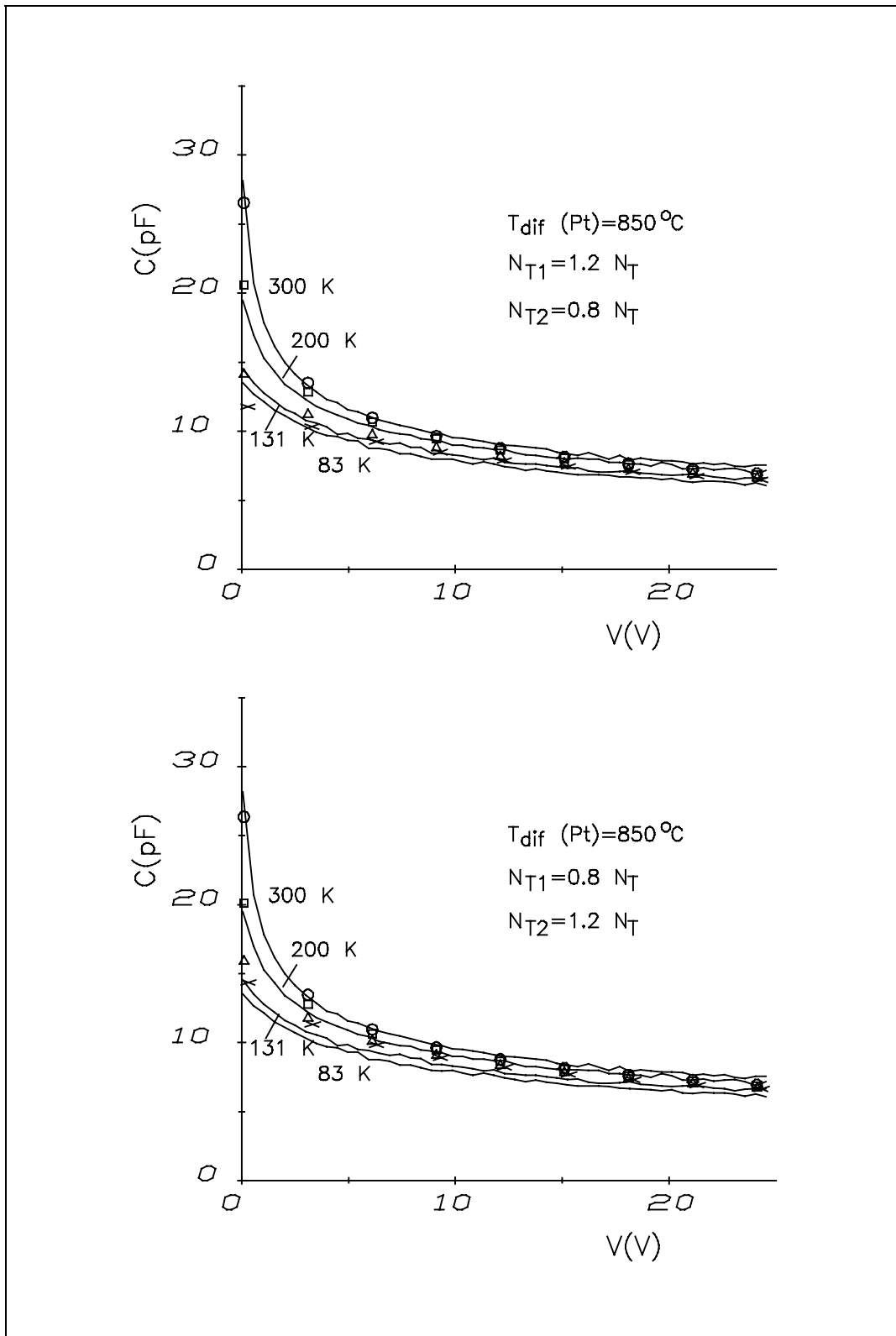
Para un coeficiente de difusión del platino en el silicio estimado en  $3 \cdot 10^{-7}$   $\text{cm}^2/\text{s}$  a  $900^\circ\text{C}$  [90], y para los tiempos de difusión de las muestras en estudio,  $7200$  s, la longitud característica,  $2(Dt)^{1/2}$ , es del orden de  $930 \mu\text{m}$ . El grosor de los diodos es de unas  $200 \mu\text{m}$ , un 20% de la longitud característica de difusión. Hay que tener en cuenta además, que en el rango de tensiones aplicado a la muestra, el espesor de la zona de carga espacial barrida no excede las  $40 \mu\text{m}$ . Con este modelo, utilizado para la difusión del platino en el silicio, es válido considerar la constancia de la concentración de platino a lo largo del diodo y con más motivo en la zona de transición barrida por la excitación de estas muestras. Recientemente se ha encontrado que la forma con la que se difunde el platino en el silicio es mediante un mecanismo de "kick-out" [50] o subida brusca de las concentraciones de esta impureza en los dos extremos de la oblea, perfil en forma de "U". Las muestras utilizadas en ese trabajo, obleas tipo p o n de alta resistividad y espesor también elevado, junto con las técnicas utilizadas, decapado progresivo, por lo tanto destructivo, no hacen pensar que nuestras muestras se comporten exactamente igual. Aun admitiéndolo, la zona realmente de interés en una unión, es decir la región próxima a la unión metalúrgica sigue siendo lo suficientemente estrecha, comparada con las regiones estudiadas en el trabajo citado, como para seguir

considerando que la concentración de platino permanece constante.

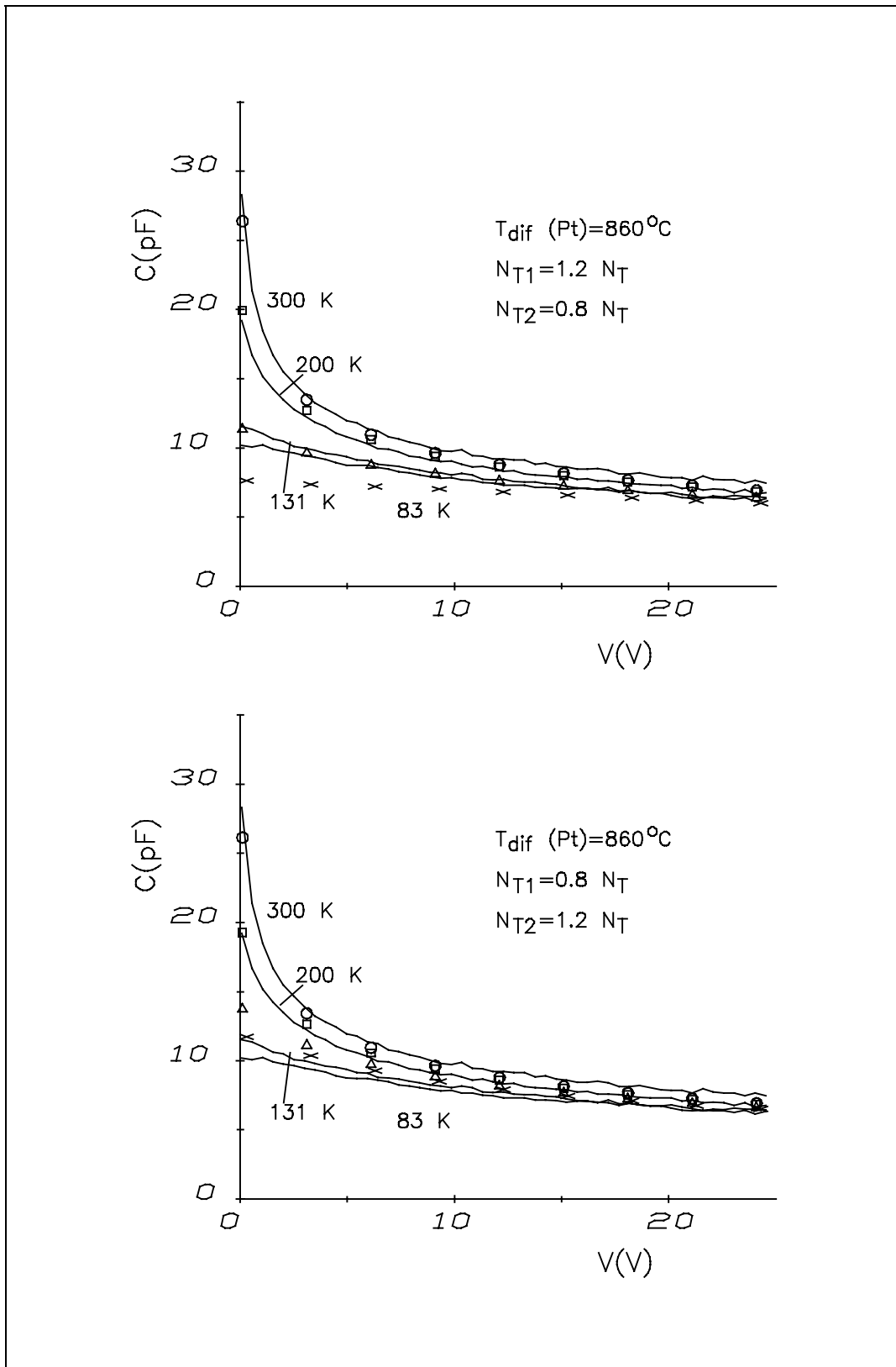
### **3.6 JUSTIFICACIÓN DE LA IGUALDAD DE CONCENTRACIÓN DE LOS NIVELES. REVISIÓN DE TRABAJOS PREVIOS.**

El problema del cálculo de concentraciones de centros profundos planteado en la figura 14 ha arrojado como solución valores idénticos para los niveles  $E_{T1}$  y  $E_{T2}$ . Nos planteamos la necesidad de comprobar el buen ajuste que se ha obtenido entre las curvas experimentales y teóricas (figuras 15-22). Si elegimos al azar un par de valores para las concentraciones  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$  y calculamos la curva de capacidad teórica correspondiente, con toda probabilidad estaríamos en una situación que no se ajusta a la real, ni nos permitiría comprobar el grado de convergencia obtenido por nuestro método. Por ello hemos planteado esta elección de forma más sistemática: partiendo de los valores calculados de  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$  hemos ido modificándolos un determinado tanto por ciento alejándose paulatinamente entre sí. La divergencia era mayor a medida que estos dos valores se hacían más diferentes y nos alejábamos de los valores calculados. Un ejemplo de ello se puede ver en las figuras 27-28; hemos elegido dos muestras diferentes y hemos representado las medidas de capacidad experimentales a diferentes temperaturas (continua) y curvas teóricas (con símbolos), para dos conjuntos de valores de  $N_{T1}$  y  $N_{T2}$ :  $(N_T+20\% \cdot N_T, N_T-20\% \cdot N_T)$  y  $(N_T-20\% \cdot N_T, N_T+20\% \cdot N_T)$ . Un tanto por ciento más elevado nos proporcionaría curvas teóricas mucho más apartadas de las experimentales por lo que no apreciaríamos el grado de convergencia de las curvas teóricas buenas y con uno más pequeño se llegarían a confundir con éstas no apreciándose en este caso la divergencia.

Se observa como la principal discrepancia se produce a temperaturas bajas y tensiones próximas a cero voltios pues en los dos casos los centros profundos van a dominar más: por su mayor grado de ionización (temperaturas bajas) y por el



**Figura 27.** Capacidad en alta frecuencia experimental y simulada. Muestra de sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Valores de la concentración de centros modificados respecto a los reales.



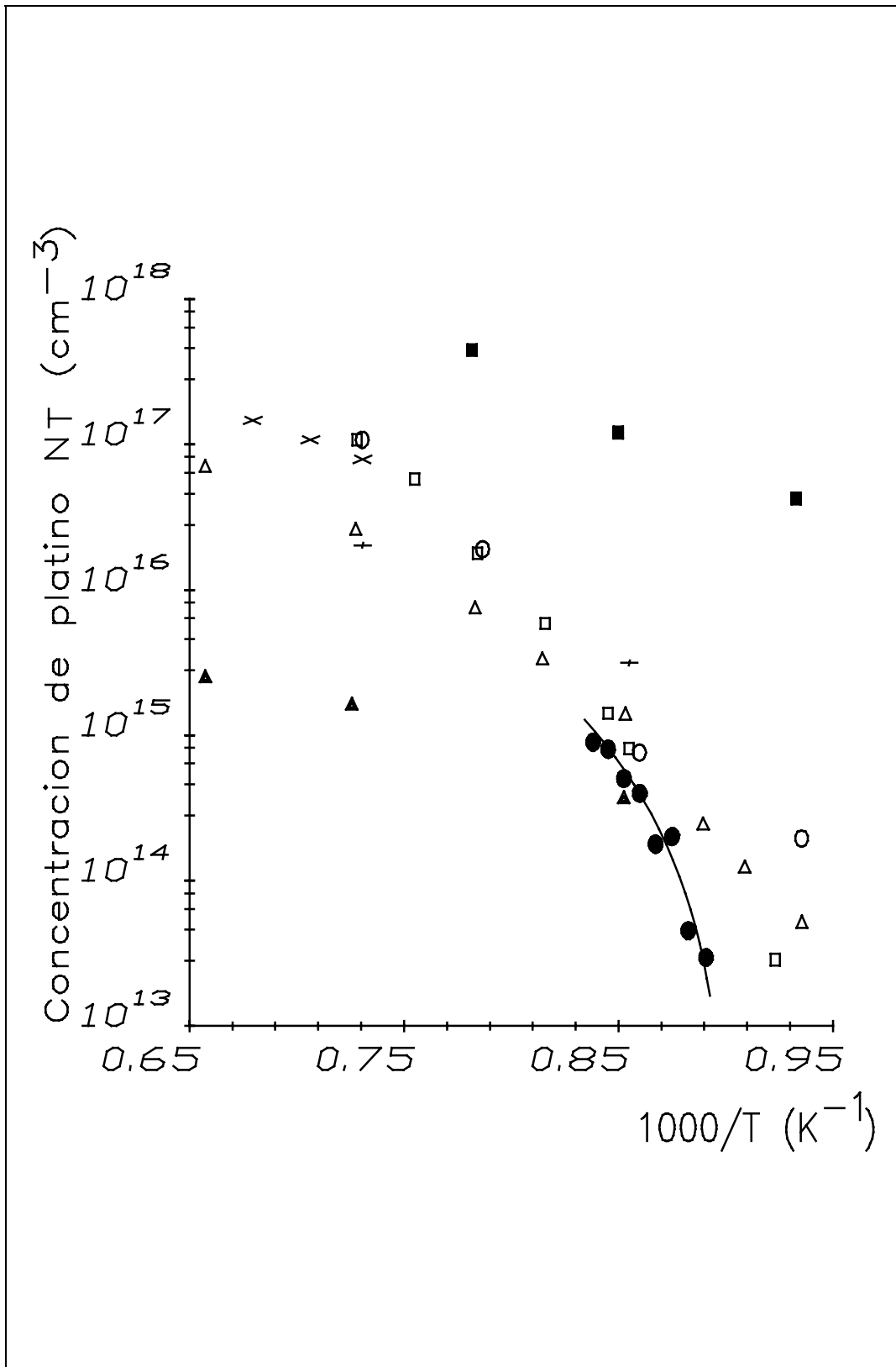
**Figura 28.** Capacidad en alta frecuencia experimental y simulada. Muestra de sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Valores de la concentración de centros modificados respecto a los reales.

perfil gradual de las impurezas básicas ( $V \rightarrow 0$ ). Para cualquiera de los dos pares de valores de concentraciones las curvas simuladas se alejan de las experimentales y lo hacen en sentidos diferentes dependiendo del signo que le hayamos dado a la variación de las concentraciones. Las curvas de capacidad correspondientes a los valores calculados por nuestro procedimiento se localizan entre estas dos situaciones (figuras 15,16), es decir, convergen hacia las experimentales.

Otra comprobación más de nuestros resultados la podemos hacer atendiendo a trabajos realizados por otros investigadores sobre el platino. Como se ha mencionado en otras ocasiones este elemento es una impureza profunda útil para controlar la vida media en el silicio [91,92] y por ello se han venido investigando muchos de sus parámetros. Sin embargo, para llevar a cabo estas experiencias era necesario conocer la concentración de platino en función de la temperatura de difusión, los niveles energéticos creados, su posición en la banda prohibida y el estado de carga. El número de niveles detectados ha sido muy variado y muy discutido a lo largo de dos décadas de investigación. Vamos a centrarnos en dos de los niveles de aceptación generalizada por muchos investigadores, niveles cuya presencia hemos confirmado en nuestro trabajo:  $E_c-0.22$  eV de carácter aceptor y  $E_v+0.34$  eV de carácter donador.

En concreto vamos a comparar las concentraciones de estos niveles en función de la temperatura de difusión obtenidas en una serie de trabajos: conviene remarcar que cada uno de ellos hace uso de técnicas diferentes. En la figura 29 se recopilan con diferentes símbolos todos estos datos junto con los resultados de nuestro trabajo, en línea continua. A primera vista se puede observar una gran dispersión de todos los puntos. Esto es razonable ya que si se pretendiera dar con una función que nos proporcionara la concentración de platino en el silicio deberíamos añadir a la representación una tercera variable, el tiempo de difusión.

Son diferentes las técnicas utilizadas, así como las condiciones de difusión del platino, temperatura y tiempo: Carchano y Jund [36] trabajaron con medidas de la



**Figura 29.** Concentración Pt - temp. difusión: (▲) Carchano y Jund, (◻) Conti y Panchieri, (+) Charlot y Vapaille, (Δ) Lisiak y Milnes, (■) Bailey y Mills, (x) Smith y Milnes, (o) Emulsitone y (•) nuestro trabajo.

resistividad en función de la temperatura, los tiempos de difusión eran bastante cortos proporcionando valores pequeños para la concentración del platino, son los más bajos de la figura 29. Conti y Panchieri [37] con medidas de resistividad, Charlot y Vapaille [39] con medidas de efecto Hall determinaron difusiones más saturantes. Lisiak y Milnes [41], también por efecto Hall midieron concentraciones del mismo orden; en este caso estaban interesados en saturar el cristal y aumentaban el tiempo de difusión para temperaturas más bajas, 24 horas como mínimo para temperaturas superiores a 1150 °C y de tres a cuatro días para temperaturas menores de 900 °C. Se representan también los datos que la compañía Emulsitone [90] proporciona para la solubilidad del platino en el silicio obtenidos a partir de cambios en la resistividad a temperatura ambiente al difundir esta impureza. Otros autores como Bailey y Mills [93] y Smith y Milnes [94] descartan los modelos eléctricos y miden la concentración de platino detectando isótopos de oro radiactivos  $Au^{199}$  por la desintegración de  $Pt^{198}$ . Esta técnica presenta el problema de que el  $Au^{199}$ , además, es un isótopo natural del  $Au^{197}$  con coeficientes de captura de neutrones muy superior al platino por lo que una pequeña cantidad de oro puede enmascarar las medidas, como ocurrió en el primero de esos dos trabajos obteniendo concentraciones muy superiores a las del segundo. Kwon et al [50], mediante medidas de DLTS y técnicas C-V sobre diodos Schottky a los que se somete a un decaído progresivo de la superficie, proporcionan una idea más realista del proceso de difusión del platino en el silicio, al introducir como variables el tiempo de difusión y la posición en el interior del semiconductor; muestran perfiles en forma de "U" para los átomos de platino en el silicio.

Nuestros resultados aparecen en la figura por debajo de la mayoría de los trabajos citados pero manteniendo los órdenes de magnitud. Es lógico que esto ocurra pues nuestros tiempos de difusión son menores, del orden de 2 horas, y constante para todas las temperaturas de difusión. Se puede apreciar así como a medida que se aumenta

la temperatura las concentraciones obtenidas se aproximan más al resto de los trabajos. Comparando nuestros resultados con los de otros investigadores y teniendo en cuenta las diferentes técnicas, muestras y condiciones de difusión empleadas se pueden considerar a todos perfectamente válidos. Centrándonos exclusivamente en nuestro trabajo, atendiendo al buen ajuste de las curvas de capacidad simuladas con estos valores de la concentración con las curvas experimentales, aceptamos de manera definitiva: a) los resultados de concentración de platino para diferentes valores de temperatura y tiempos de difusión fijos, b) la constancia de estos valores en las regiones de la unión barridas al variar la tensión inversa de polarización y c) la igualdad de concentraciones de ambos niveles. Esto último apoya la idea de investigaciones recientes (resonancia paramagnética [95,96], DLTS sobre impurezas radiactivas [97]) por lo que dichos niveles corresponden a un mismo átomo de platino en posición sustitucional. Los dos niveles correspondientes al platino se asocian a un mismo centro de naturaleza tripolar y como tal los dos niveles deben presentarse en la misma concentración. Existe una controversia con aquellos autores que han encontrado concentraciones diferentes para los dos niveles; en este caso asocian cada nivel a un centro diferente. Un análisis completo de la unión como el que se va a realizar nos permitirá inclinarnos a favor de la opción del centro tripolar.



## 4. DLTS DE CAPACIDAD APLICADA A UNIONES GRADUALES DOPADAS CON PLATINO

### 4.1 INTRODUCCIÓN

La DLTS [2] o espectroscopía de transitorios de niveles profundos es una técnica ampliamente utilizada para la caracterización de defectos en semiconductores ya que nos proporciona los parámetros relacionados con los niveles energéticos: energía de activación, concentración y sección eficaz de captura. El análisis estándar de un espectro de DLTS [4] implica una ionización completa de todas las trampas modeladas como centros que crean un solo nivel (o varios con coeficientes de emisión muy diferentes) y con un proceso de relajación perfectamente exponencial. Sin embargo en muchas situaciones experimentales el espectro de la DLTS no representa a este modelo tan sencillo, dando lugar por tanto a valores erróneos para los parámetros asociados al centro. Hay muchos factores que contribuyen a la complejidad del espectro de la DLTS, como la desviación respecto al comportamiento simple de un único nivel o como la simultaneidad de fenómenos de emisión (asociados cada uno de ellos a un nivel diferente).

El primero de estos factores está relacionado con la conducta no exponencial de los transitorios de capacidad asociados a un nivel simple. Estos efectos han recibido considerable atención en la literatura: densidad de centros comparable a la de impurezas básicas [8,98]; atrapamiento de carga en una parte de la región de depleción [7,99]; borde de la zona de carga espacial no abrupto, es decir región de la cola de Debye [100-102] y dependencia del coeficiente de emisión con el campo eléctrico [103-105].

El segundo de los factores está relacionado con el fenómeno de emisión asociado a centros multinivel o a la presencia de diferentes niveles simples con

coeficientes de emisión comparables [52,106,107].

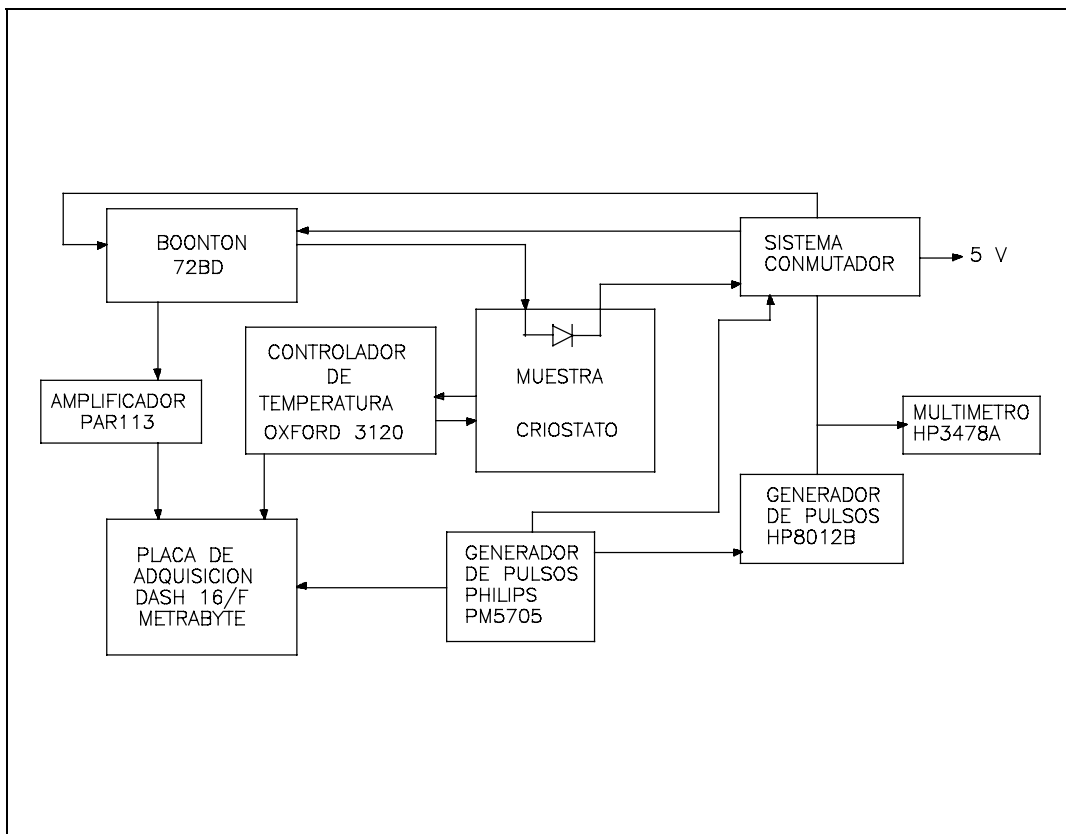
Puede que el segundo de los factores se haya tratado más recientemente, sin embargo, dentro del primer bloque quedan aún puntos por estudiar: análisis de muestras sobrecompensadas donde la zona de carga espacial en principio puede extenderse a toda la muestra o puede encontrarse bloqueada, en cuyo caso no podemos medir variaciones de capacidad y por tanto cabe esperar espectros planos de DLTS; uniones asimétricas donde el perfil de impurezas básicas no puede considerarse como estrictamente abrupto y que caso de tratarse de esa manera implicaría resultados incorrectos; presencia a su vez de varios niveles, etcétera. Todo esto junto implica tener que acudir a una técnica de análisis distinta, que abarque todos estos problemas de manera conjunta, en lugar de a diferentes métodos que traten a estos problemas por separado.

De esta forma y en previsión de estos posibles fenómenos se utilizó la DLTS para dar una primera visión del trabajo, como técnica de detección de defectos únicamente. Ahora se va a observar la influencia sobre el espectro de muestras graduales con distinta concentración de centros profundos y se van a mostrar experimentalmente las características que adelantábamos podían ocurrir en la DLTS de capacidad. Sin embargo para analizar las muestras más profundamente acudiremos a los transitorios isotérmicos, por la comodidad que estos presentan al disponer de sistemas automatizados que permiten un tratamiento rápido. La posterior simulación de transitorios isotérmicos de capacidad nos permitirá explicar el comportamiento de estas muestras.

## **4.2 MONTAJE**

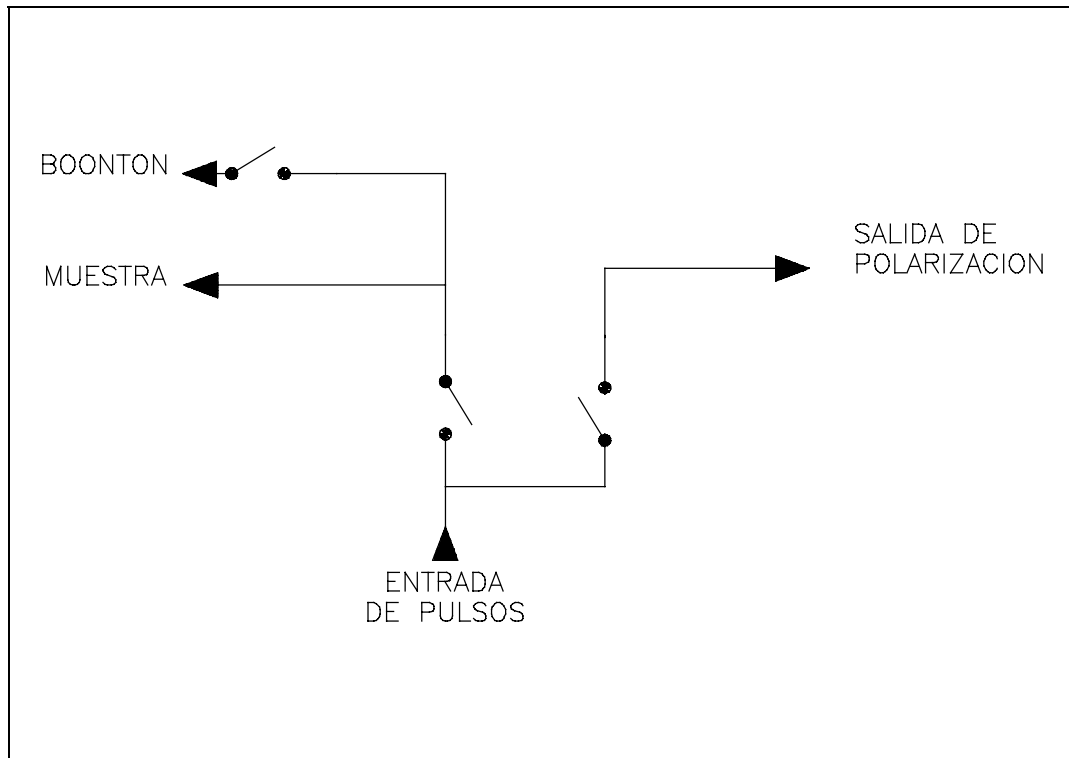
El conjunto de muestras a analizar será toda la serie presentada en capítulos anteriores. Para ver como influye la concentración de platino en el comportamiento de las muestras se captarán transitorios isotérmicos de capacidad, que o bien

se transformarán en espectros de DLTS mediante un barrido en temperatura, o bien se analizarán de forma individual. Distinguiremos entre inyección de mayoritarios y minoritarios, para ello someteremos a las muestras a pulsos de tensión que tomarán los siguientes valores extremos: a) -0.2 V y -9.5 V para los pulsos de mayoritarios, b) 0.7 V y -9.5 V y c) 1.0 V y -9.5 V para la inyección de minoritarios.



**Figura 1.** Diagrama de bloques del sistema de adquisición de transitorios isotérmicos de capacidad con inyección de minoritarios.

Los transitorios de capacidad se recogieron atendiendo al diagrama de bloques de la figura 1. Las partes principales de este sistema se detallan a continuación. La placa de adquisición DASH16/F de Metrabyte convierte los valores proporcionados por el capacitómetro Boonton 72BD y por el medidor-controlador de temperatura OXFORD 3120. La polarización se le aplica a la muestra gracias a un sistema de conmutación fabricado con relés (figura 2). El tiempo de apertura o cierre del relé se



**Figura 2.** Sistema de conmutación que evita polarizar la muestra en directo a través del capacitómetro.

controlaba con un monoestable SN74121, los retardos son ciertamente cortos, del orden de 70  $\mu$ s. Este sistema tiene su sentido durante la inyección de minoritarios, ya que cuando se polariza la muestra en directo la capacidad crece de forma abrupta saturando al capacitómetro. Como el tiempo de respuesta de este aparato saturado es de varios ms, se perdería la parte inicial del transitorio. Conmutando los relés de manera apropiada se polariza la muestra directamente sin tener que pasar por el medidor de capacidad. El generador HP8012B es el que proporciona los pulsos de polarización a la muestra y el generador PM5705 es el que controla todo el sistema. Si en lugar de adquirir un único transitorio se pretende construir el espectro de DLTS se coloca un boxcar de doble puerta en lugar del amplificador de tensión PAR113.

### 4.3 ESPECTROS DE DLTS

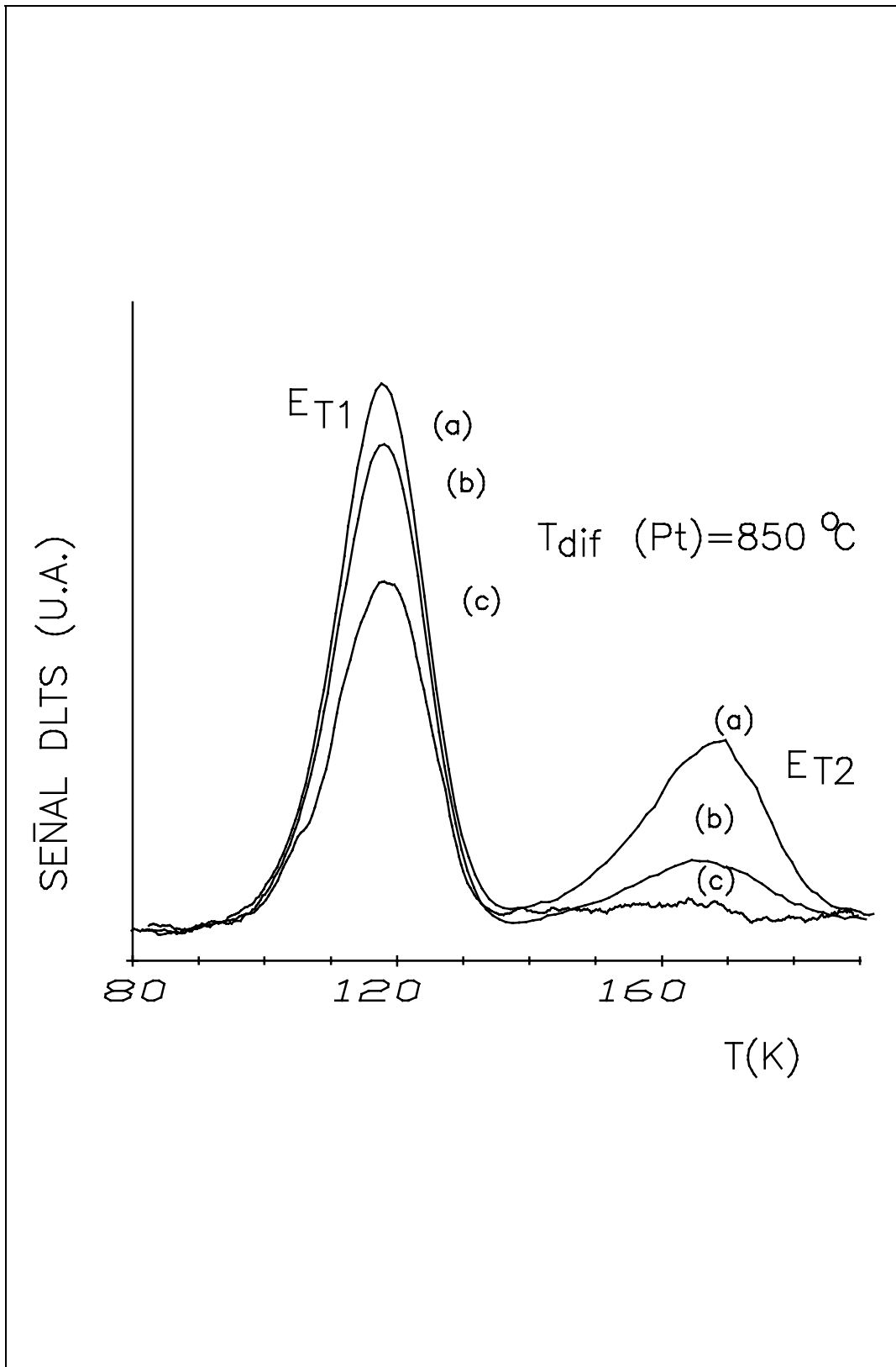
En las figuras 3 a 9 se muestran los espectros de DLTS correspondientes a los diodos con impurezas de platino difundidas entre 850 °C y 920 °C. Todas las muestras se han sometido a pulsos de mayoritarios e inyección de minoritarios. Los espectros correspondientes a pulsos de mayoritarios son siempre los superiores (curvas (a)), a medida que polarizamos más en directa el espectro en su conjunto toma valores menores (curvas (b) y (c)).

La explicación de los fenómenos que se observen en estos espectros se hará en base a los resultados ya obtenidos y que son el núcleo principal de este trabajo, es decir: se dispone de uniones graduales con mayor pendiente del perfil en la zona P y con dos niveles de impurezas presentes en todo el diodo con concentraciones iguales, pero variables ambas según la temperatura de difusión del platino.

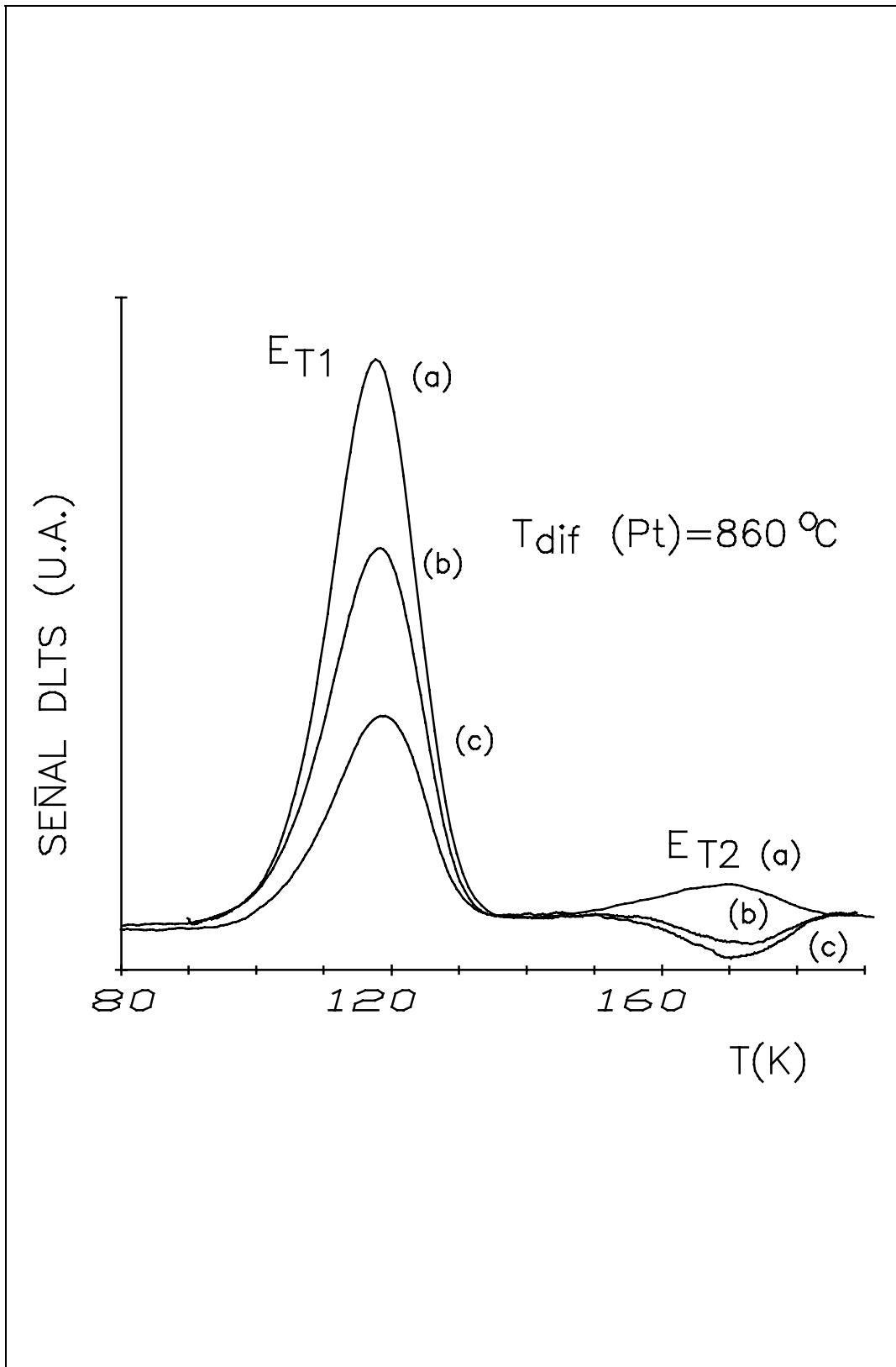
Globalmente se observa un comportamiento diferente dependiendo de la concentración de platino que exista en las muestras. Por ello vamos a distinguir dos grupos de espectros: los de menor concentración de platino que se muestran en las figuras 3 a 5 y los de mayor concentración, que están reflejados en las figuras 6 a 9.

#### 4.3.1 MUESTRAS CON BAJA CONCENTRACIÓN DE PLATINO

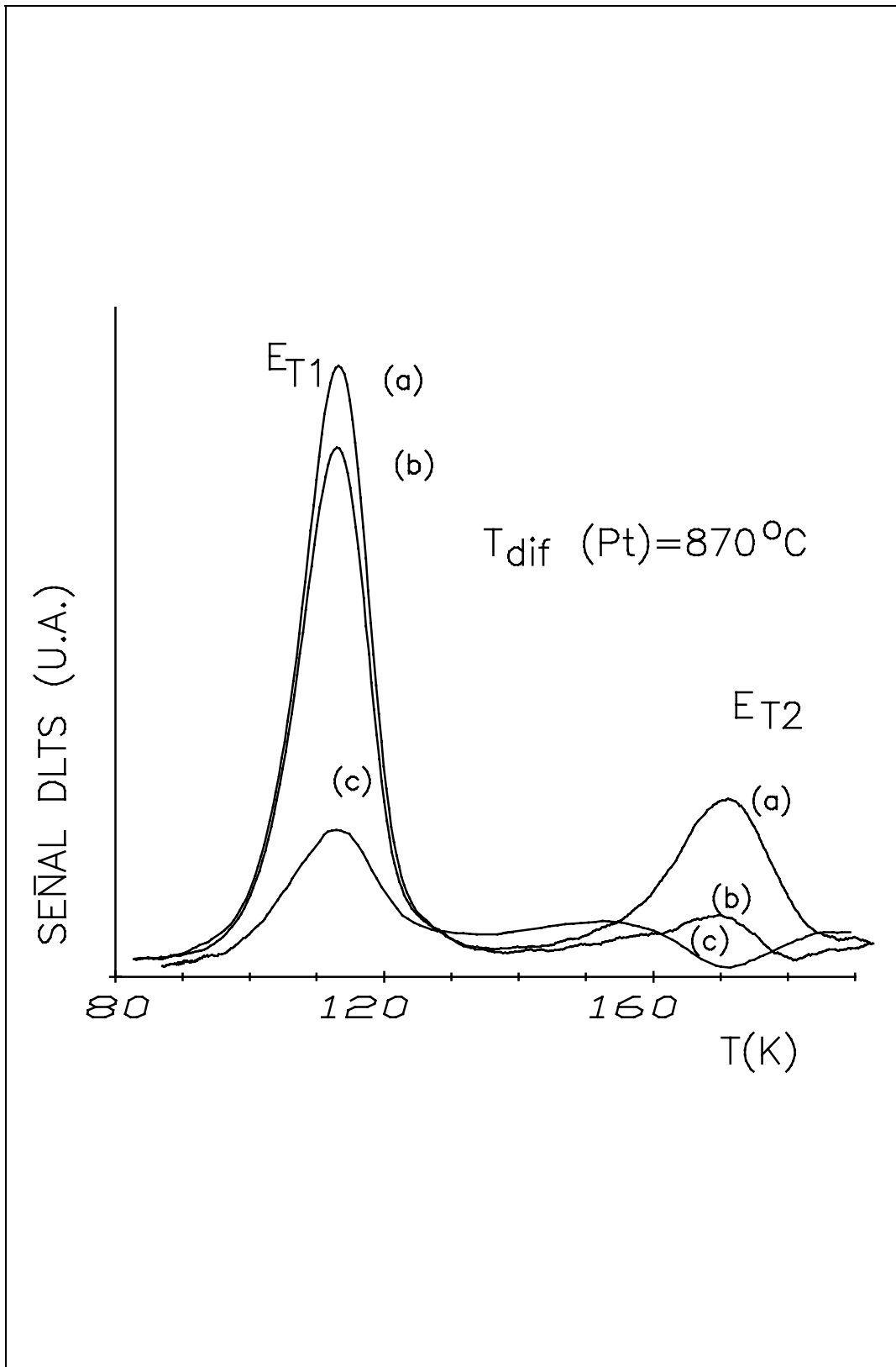
Para concentraciones pequeñas se distinguen dos picos principales correspondientes a los dos niveles creados por esta impureza en el silicio. En la figura 3 la inyección de mayor número de minoritarios hace descender el máximo de los picos, aunque en ningún caso se detecta un pico negativo y tan solo en el caso (c) desaparece el nivel  $E_{T2}$ . Para analizar este espectro hay que tener en cuenta que el descenso de la altura de los picos no sólo es debido a una disminución en el factor de ocupación de los centros sino además a una emisión simultánea de electrones en la zona N (mayoritarios)



**Figura 3.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y -9.5 V, c) 1.0 V y -9.5 V.

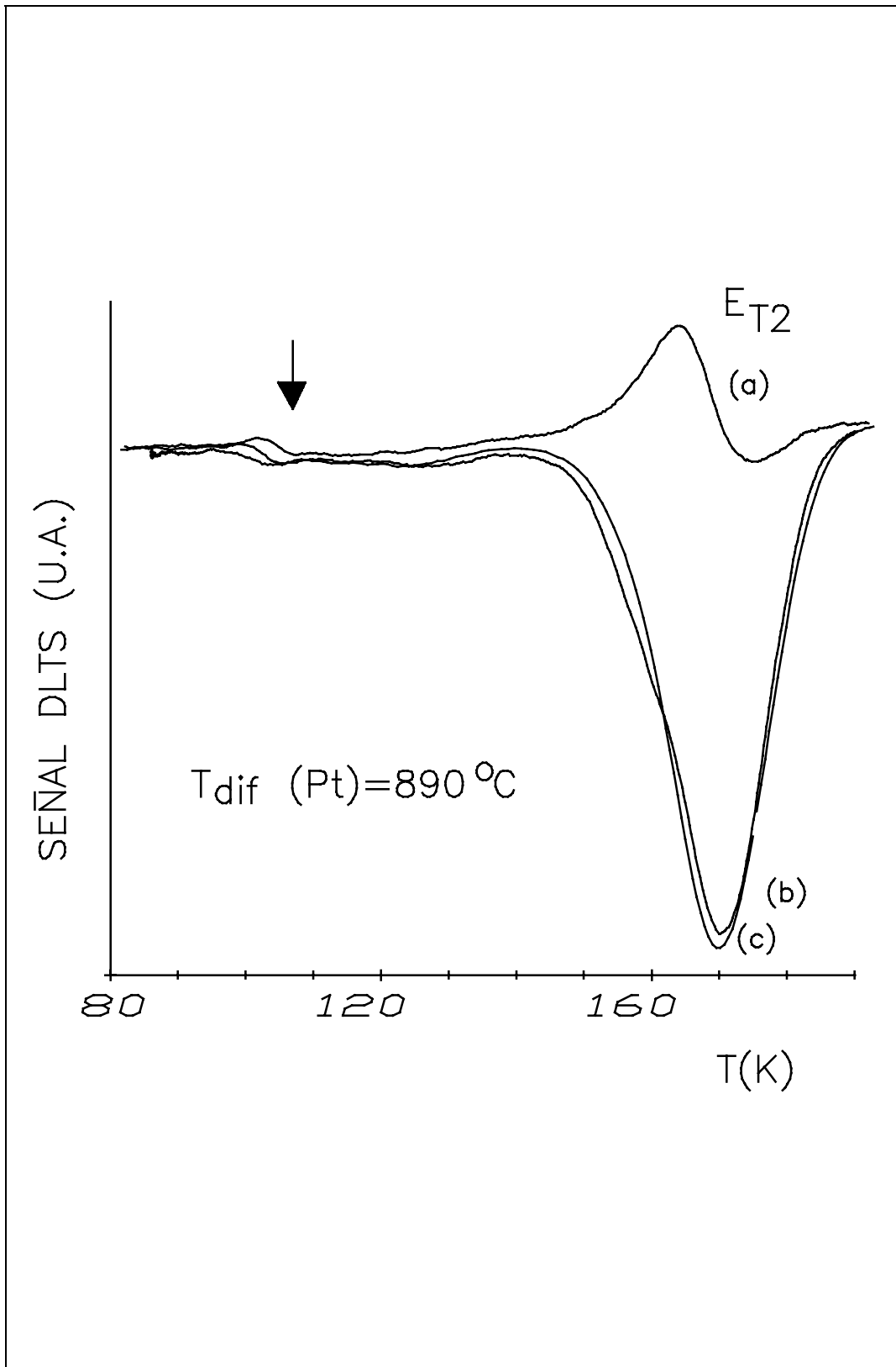


**Figura 4.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y -9.5 V, c) 1.0 V y -9.5 V.

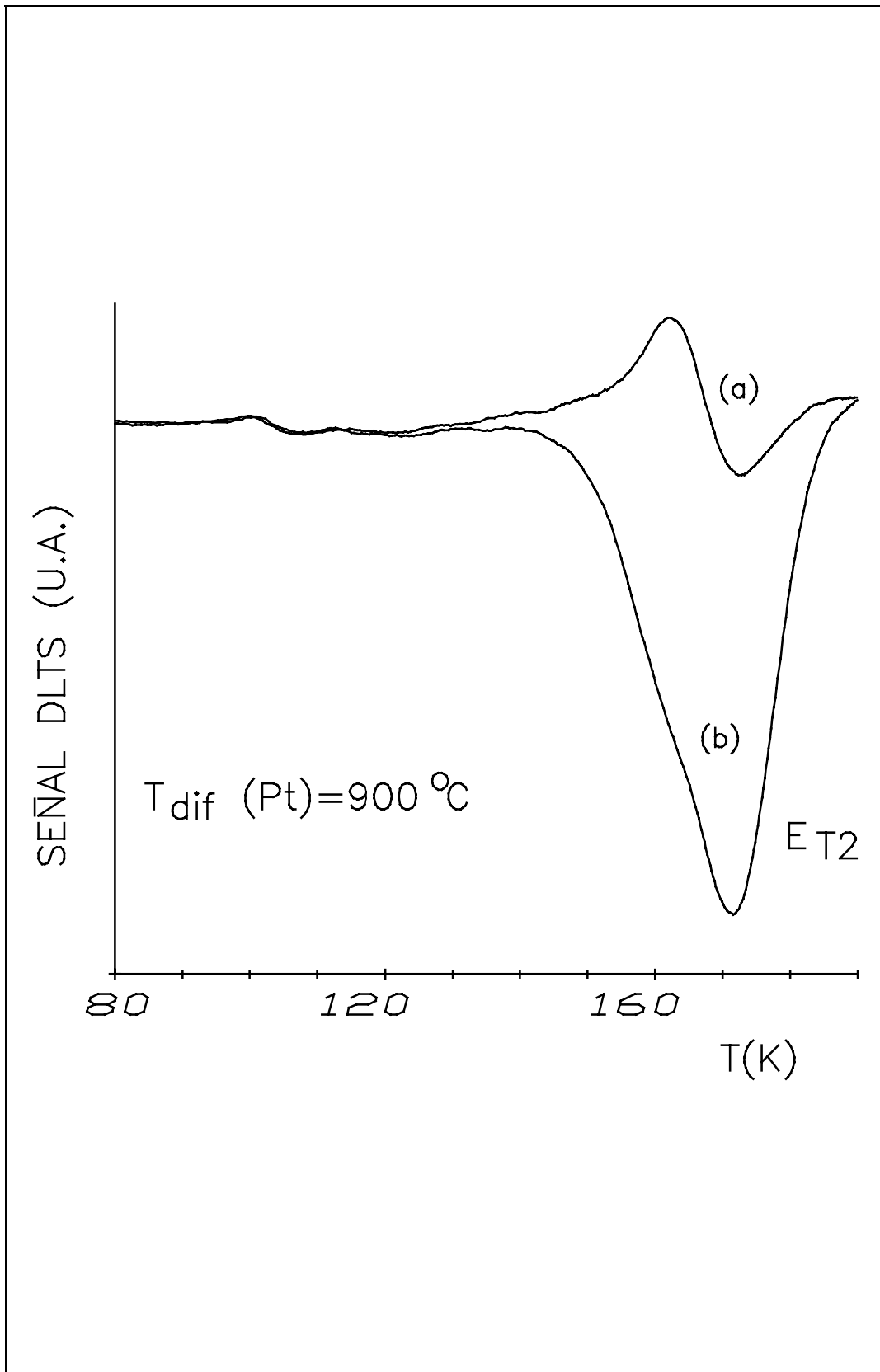


**Figura 5.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y -9.5 V, c) 1.0 V y -9.5 V.

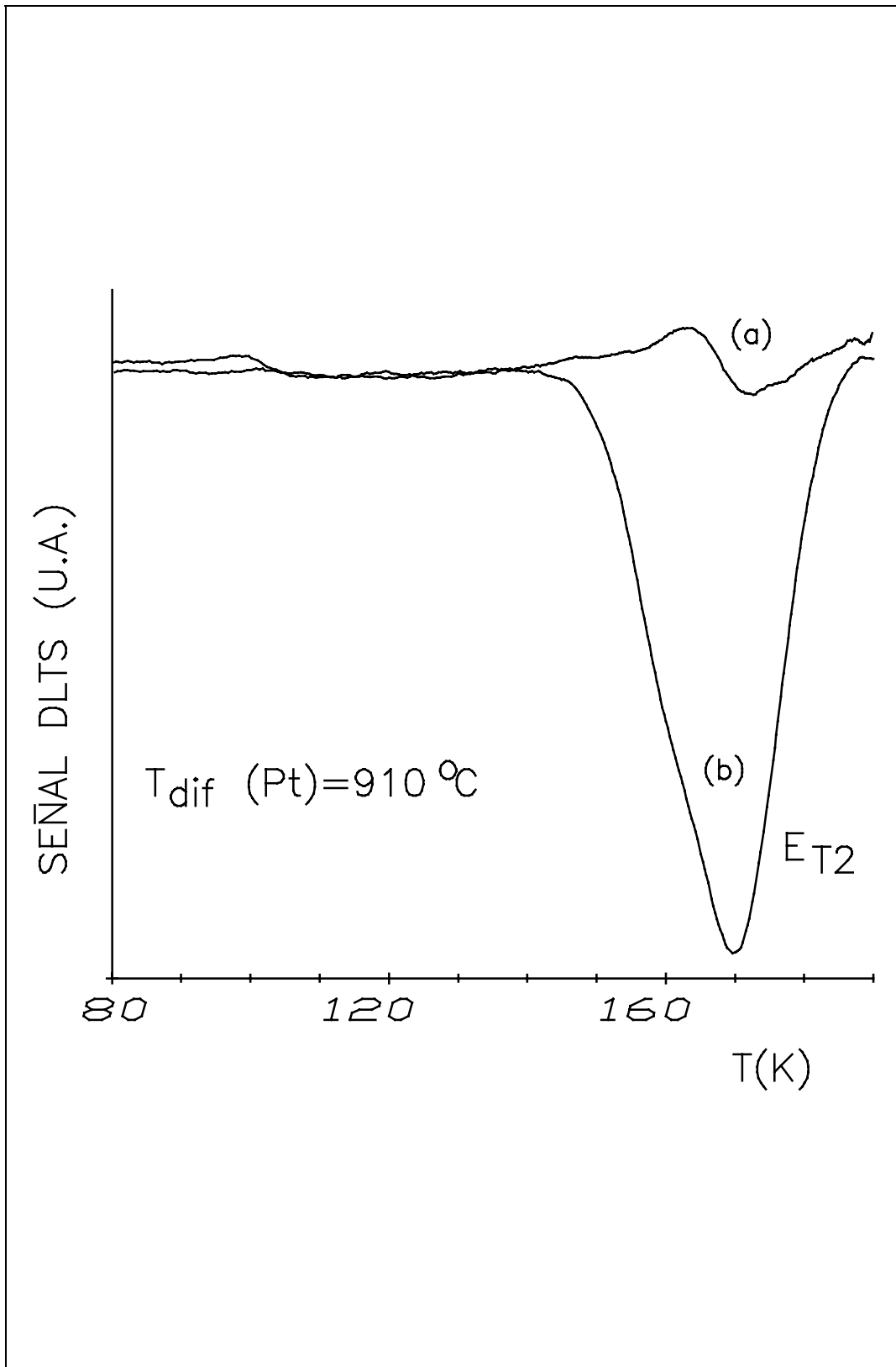




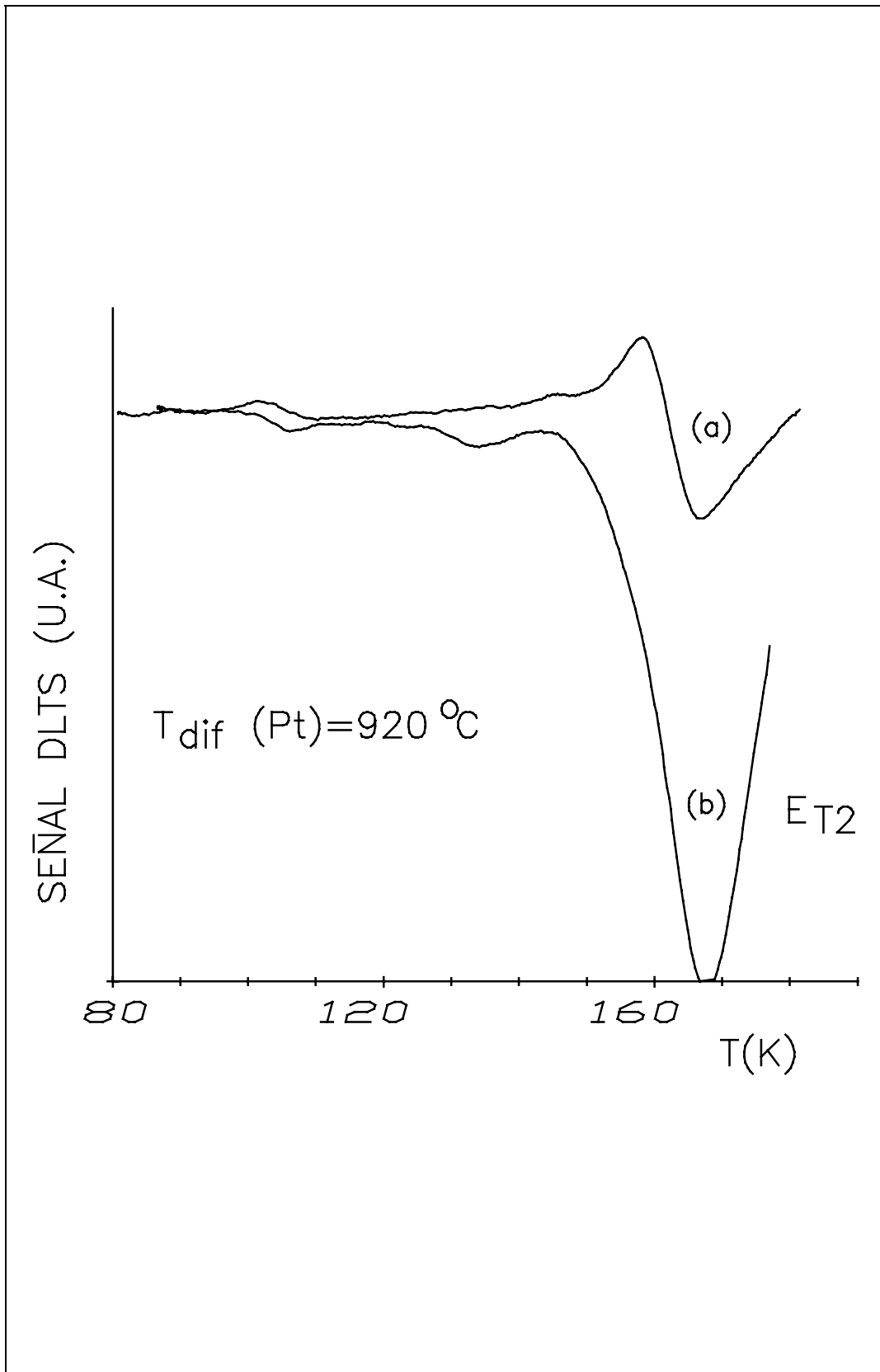
**Figura 6.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y -9.5 V, c) 1.0 V y -9.5 V.



**Figura 7.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a)  $-0.2 \text{ V}$  y  $-9.5 \text{ V}$ , b)  $0.7 \text{ V}$  y  $-9.5 \text{ V}$ .



**Figura 8.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y --9.5 V.



**Figura 9.** Espectro de DLTS, muestra con concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Pulsos de tensión: a) -0.2 V y -9.5 V, b) 0.7 V y -9.5 V.

y en la P (minoritarios) desde el nivel  $E_{T1}$ , en lo que se refiere al primer pico. Y huecos también en las dos regiones de la unión P y N (mayoritarios y minoritarios respectivamente) desde el nivel  $E_{T2}$ , por lo que se refiere al segundo. En cualquiera de los dos casos las contribuciones de la emisión de portadores desde el mismo nivel pero en las dos regiones de la unión se restan.

En la figura 4 volvemos a tener un descenso de la altura de los espectros de DLTS al inyectar minoritarios. Sin embargo, cuando se pasa a polarizar en directo con pulsos de 0.7 V a 1.0 V, se observa una disminución mayor que en el caso anterior en el pico de la izquierda,  $E_{T1}$ , y la aparición de un pico negativo a la derecha, curvas (b) y (c) en  $E_{T2}$ , a la misma temperatura que se ha obtenido el máximo de mayoritarios.

En la figura 5 se observa un comportamiento similar al conjunto de espectros anteriores pero acentuándose todos estos fenómenos. Así se puede ver como en la curva (c) el nivel  $E_{T1}$  tiende a anularse prácticamente y en la curva (b) el pico correspondiente al nivel  $E_{T2}$  muestra una ligera asimetría presentando comportamiento de máximo y mínimo en ese rango de temperaturas.

Antes de empezar a comentar el bloque de los cuatro espectros restantes, correspondientes a muestras mucho más impurificadas con platino, vamos a hacer un análisis de los tres primeros: Para ello, supongamos que la unión investigada es del tipo P<sup>+</sup>N o N<sup>+</sup>P. En esta situación, la zona de carga espacial cae en la región menos dopada, y será en esa región donde se detecten los procesos de emisión y captura de portadores. Si se polariza a la unión en directo la zona de carga espacial barrida será mayor que en el caso de no sobrepasar los cero voltios; ahora bien, el factor de ocupación de los centros disminuye por la existencia de una inyección de minoritarios. Para los niveles de tensión a los que se somete a las muestras este fenómeno va a dominar sobre el primero. Por tanto, si la variación de la población de centros en la zona de carga espacial se recoge en un transitorio de capacidad éste tendrá una amplitud menor en el caso de la inyección de minoritarios, por cuanto la carga emitida también es menor.

Traducido a un pico de DLTS, su altura también deberá ser menor, como de hecho se observa en la figura 3. Como caso extremo tendremos un pico nulo o un espectro plano correspondiente a una ocupación de los centros igual a cero. Una unión gradual que presente un centro eléctricamente activo únicamente en una región de la unión se comporta de la misma forma que en esta última situación.

Consideremos ahora el caso de una unión gradual con un centro profundo capaz de capturar y emitir electrones en toda la unión. En la región N estos portadores son mayoritarios, mientras que en la región P son minoritarios. La variación de la ocupación de los centros por electrones en las zonas de transición de las regiones N y P implican necesariamente, para que se cumpla la condición de neutralidad, una variación de los extremos de la zona de carga espacial -en un lado crece y en el otro decrece-. Las emisiones de mayoritarios y minoritarios (electrones en la zona N y P respectivamente) repercuten en un transitorio de capacidad de forma opuesta, por lo que se deben restar ambas contribuciones; su reflejo en un pico de DLTS será también la disminución de la altura del mismo al pasar de pulsos de mayoritarios exclusivamente a inyección de minoritarios (en el sentido anterior), incluso puede dominar la emisión de minoritarios y obtenerse un pico negativo. (Hay que recalcar el hecho de que se considera que el centro emite mayoritarios en una zona de la unión y minoritarios en la otra, no los dos fenómenos en la misma zona).

Comparando los espectros de mayoritarios y minoritarios de las figuras 3, 4 y 5 vemos como no solo disminuye la altura de los dos máximos sino que bajo inyección de minoritarios se obtiene un pico negativo. De acuerdo con los resultados obtenidos mediante simulación por los que encontrábamos que el platino crea dos niveles fundamentales en el silicio y según el análisis que hemos realizado sobre estos espectros se puede concluir que estos niveles no son exclusivos de un semiconductor de silicio tipo N ni P, es decir, que son independientes del tipo de dopado básico.

En investigaciones previas, al trabajar con uniones asimétricas P<sup>+</sup>N o N<sup>+</sup>P

o bien con diodos Schottky, se asociaba cada nivel con el tipo de semiconductor estudiado. Una muestra de ello es la colección de cuatro espectros (figuras 10 a 14) captados sobre la muestra " $T_{\text{dif}}(\text{Pt})=860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ". Se ha sometido a esta unión a cuatro tipos de pulsos diferentes con la intención de barrer distintas zonas de carga espacial, desde la unión metalúrgica hasta los contactos metálicos. Nuestra idea es que al alejarnos de la unión la variación de la zona de carga espacial va a tener lugar principalmente en la región menos dopada; por tanto, nos acercaremos progresivamente a una estructura P<sup>+</sup>N o ( N<sup>+</sup>P ), la más utilizada en investigaciones anteriores. Barriando regiones próximas a la unión metalúrgica (figura 10) se detectan 2 picos, los mismos que hemos encontrado hasta ahora, pero a medida que nos alejamos el nivel localizado a temperaturas superiores,  $E_{T2}$ , va disminuyendo su altura respecto al otro pico (figuras 11 y 12) hasta perderse definitivamente (figura 13), detectándose un único nivel. En la figura 14 se recogen los cuatro espectros referidos a una misma escala. Se puede ver como hay una disminución de la altura de los picos a medida que nos alejamos de la unión, debido a que la relación entre las concentraciones de impurezas profundas a no profundas también es menor a medida que nos aproximamos a los contactos metálicos: es otro dato que nos confirma la forma de los perfiles de impurezas encontrados por simulación. Por la escala utilizada en esta figura no se observa la desaparición del nivel  $E_{T2}$  con la misma claridad que en las anteriores. Es conveniente puntualizar que las condiciones experimentales para esta última curva se han elegido de forma tal que el extremo de la zona de carga espacial en el lado P se encuentre en un punto de alta concentración de impurezas básicas, con lo que en el intervalo de tensión aplicada dicho extremo apenas se desplaza. Así, toda la variación de la zona de carga espacial se produce en el semiconductor N, por lo que sólo se observa un pico de DLTS. El caso de una estructura N<sup>+</sup>P conduciría a una situación similar en la que se perdería el primer pico,  $E_{T1}$ . Una vez analizados los espectros desde el punto de vista de la unión gradual y habiéndose llegado a resultados coherentes, vamos a proceder de otra manera, y es

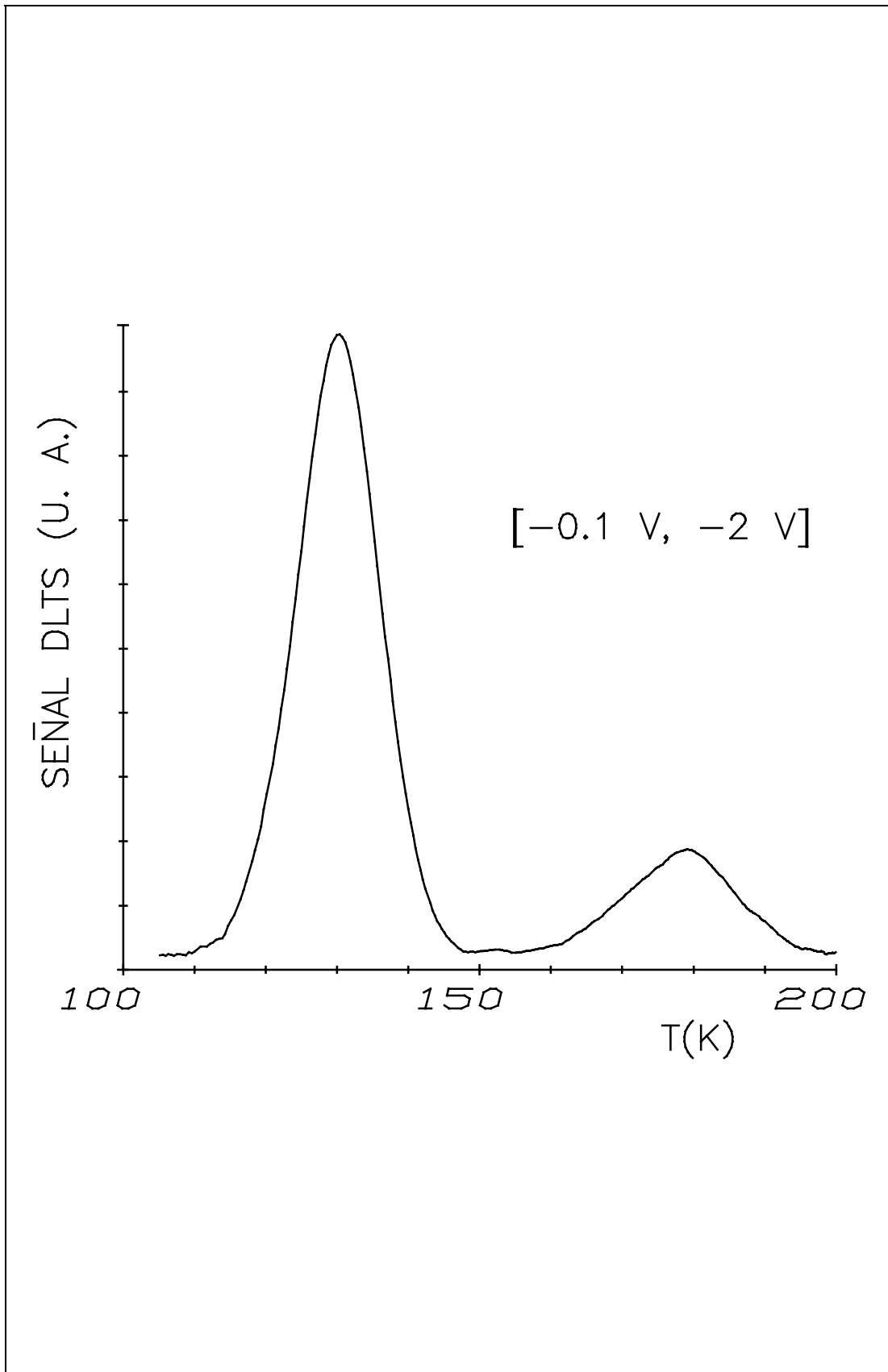


Figura 10. Espectro de DLTS. "Muestra  $T_{dif}(Pt)=860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ".



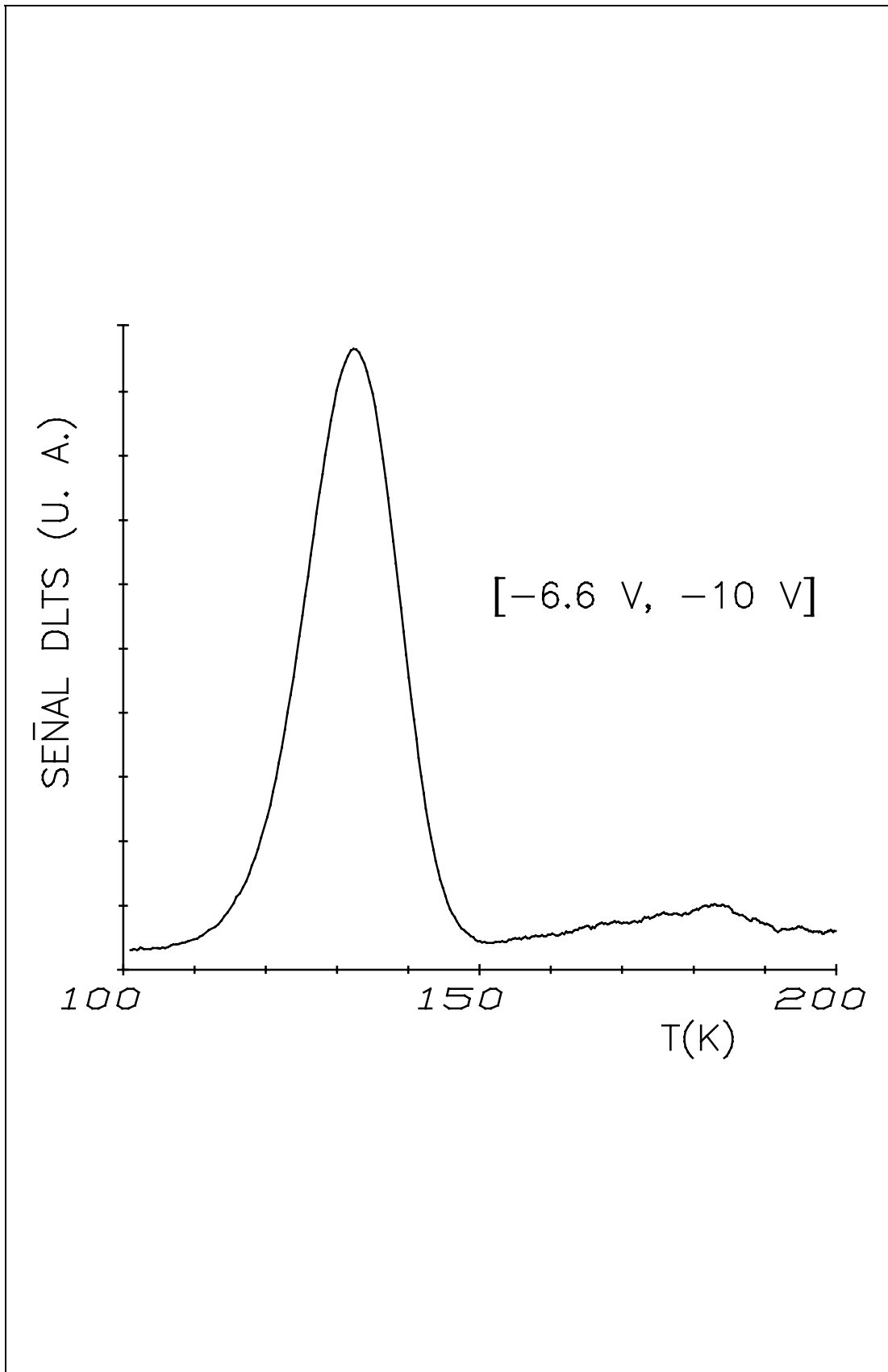
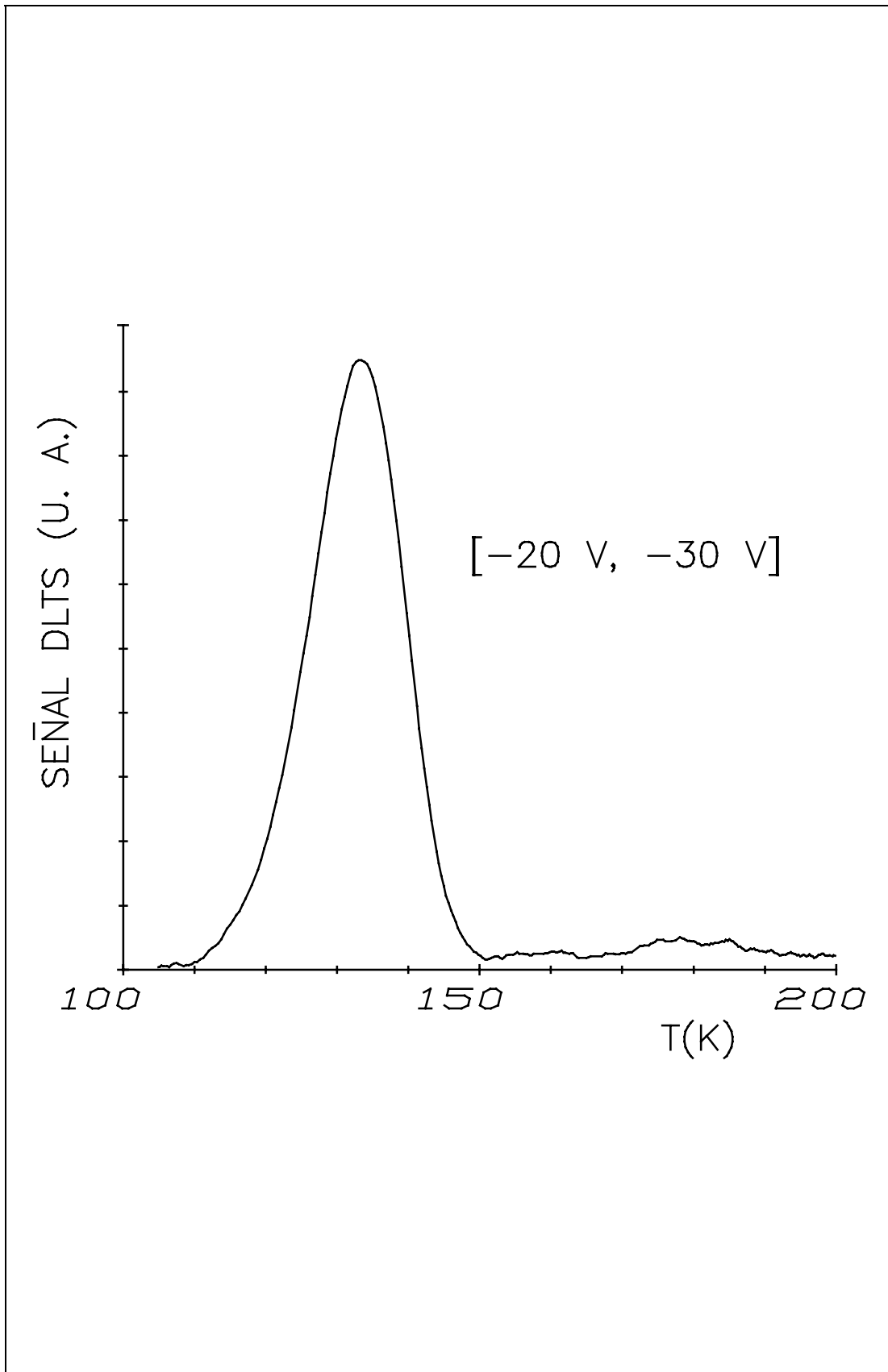


Figura 11. Espectro de DLTS. "Muestra  $T_{dif}(Pt)=860\text{ }^{\circ}C$ ".



**Figura 12.** Espectro de DLTS. "Muestra  $T_{dif}(Pt)=860\text{ }^{\circ}\text{C}$ ".

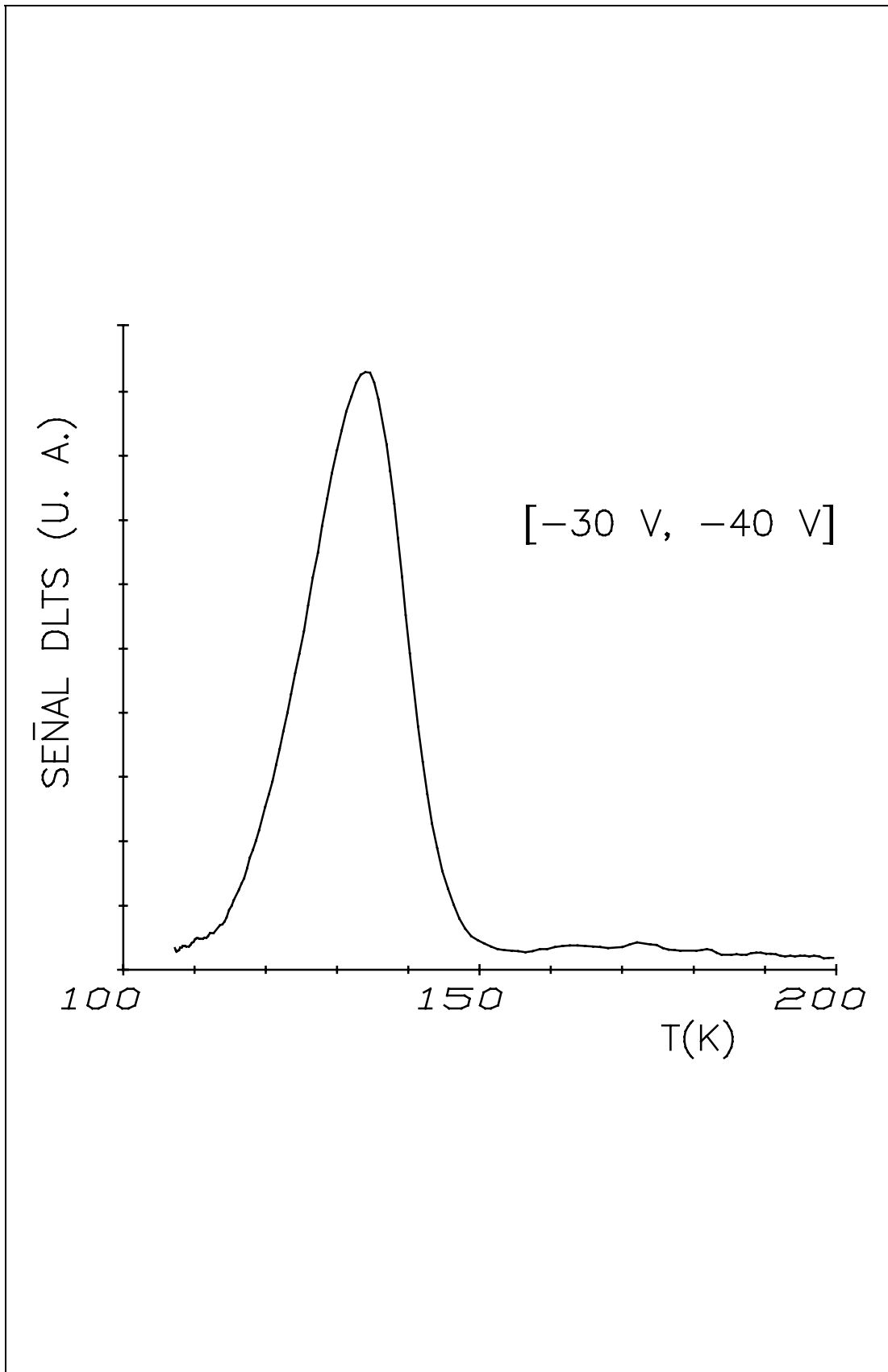
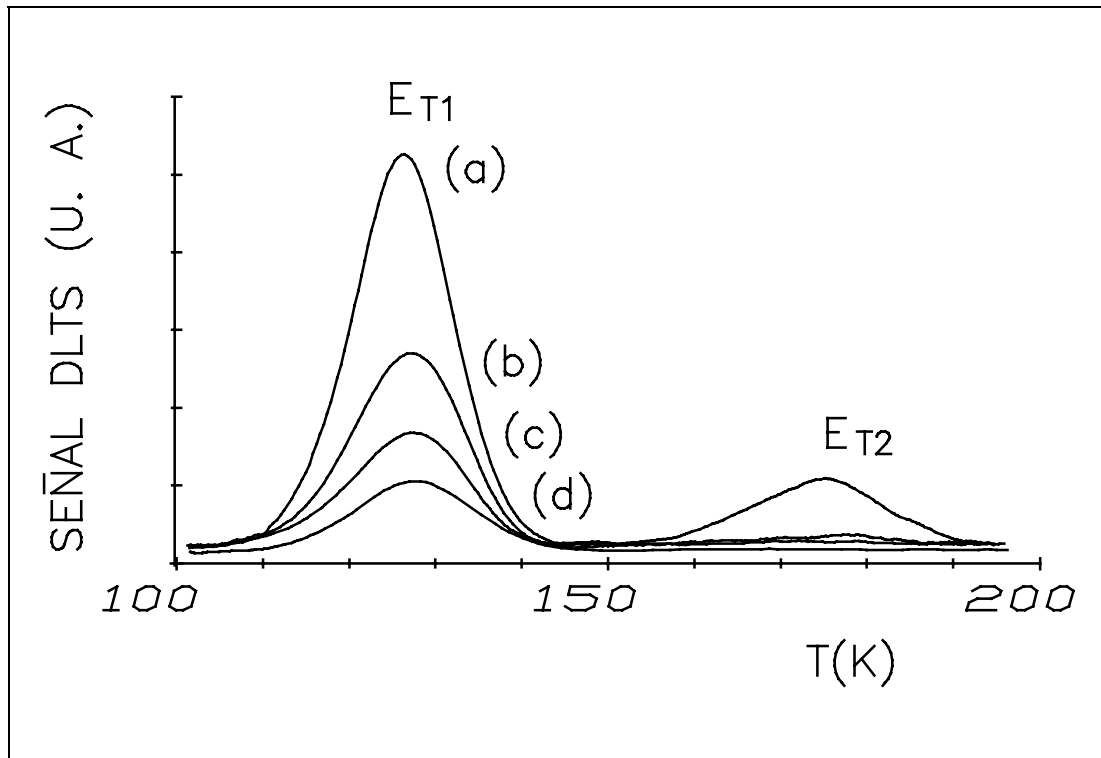


Figura 13. Espectro de DLTS. "Muestra  $T_{dif}(Pt)=860\text{ }^{\circ}C$ ".



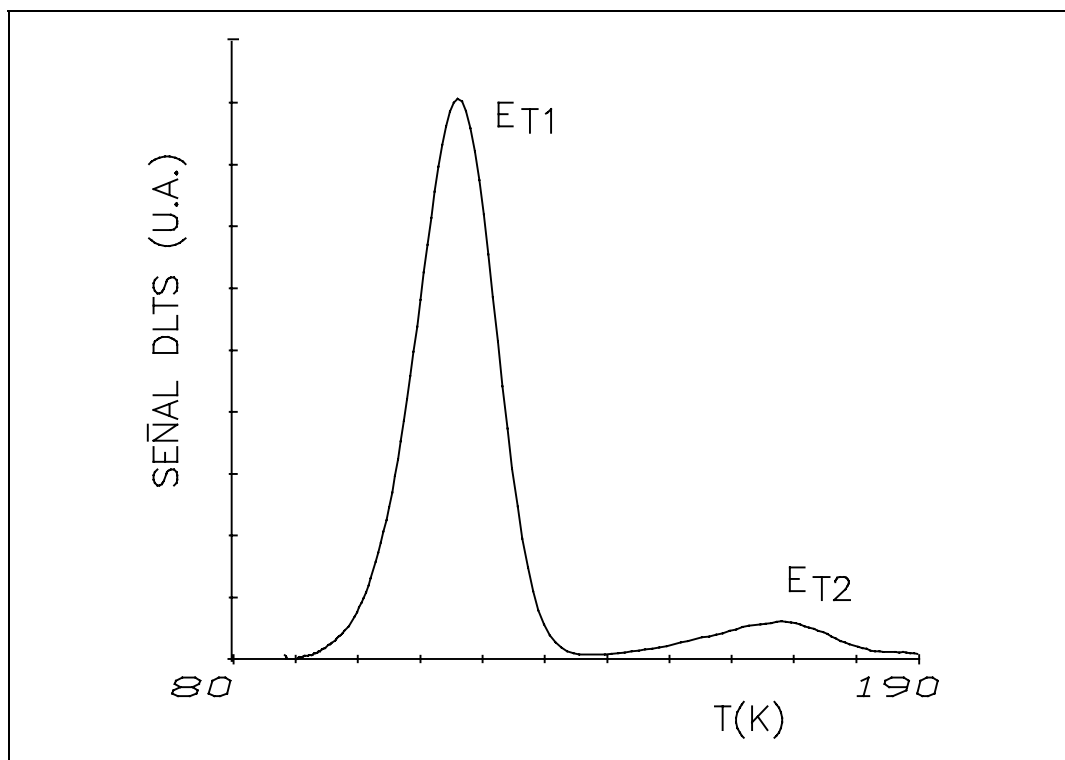
**Figura 14.** Espectros de DLTS. "Muestra  $T_{dif}(Pt)=860\text{ }^{\circ}C$ ": (a), [-0.1V, -2V]; (b), [-6.6V, -10V]; (c), [-20V, -30V]; (d), [-30V, -40V].

analizar nuestros espectros bajo la suposición de una unión P<sup>+</sup>N, situación que ha quedado demostrada a lo largo de este trabajo que no se cumple, pero que se ha venido realizando con bastante asiduidad hasta ahora.

Consideremos para ello un espectro de DLTS de mayoritarios como el de la figura 15. La muestra a la que corresponde dicho espectro presenta una concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-3}$  y una concentración de platino de  $4.5 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-3}$  que, aunque próxima a la del sustrato, no la llega a compensar, y por tanto no se va a alejar mucho de la idealidad.

El hecho de suponer una unión abrupta P<sup>+</sup>N lleva consigo dos consecuencias importantes:

1. El comportamiento eléctrico de la unión queda limitado a la zona N. La detección de dos niveles de impurezas como el reflejado en el espectro anterior implica de manera inmediata asociar los dos niveles a un semiconductor tipo N y a



*Figura 15. Espectro de DLTS de capacidad. Pulsos de mayoritarios.*

situarlos en la mitad superior de la banda prohibida.

2. La altura de los picos de DLTS es proporcional a la relación entre la concentración de centros profundos y la de impurezas básicas. La obtención de la concentración de centros para muestras que proporcionen espectros como el anterior bien de manera simplificada [42] o bien atendiendo a simulaciones cuando los transitorios de relajación se aparten de la exponencialidad [52], nos llevaría a que uno de los centros presenta una concentración muy superior al otro. En cualquiera de los dos casos la referencia es la misma, es decir la concentración de dopante básico  $N_D$ .

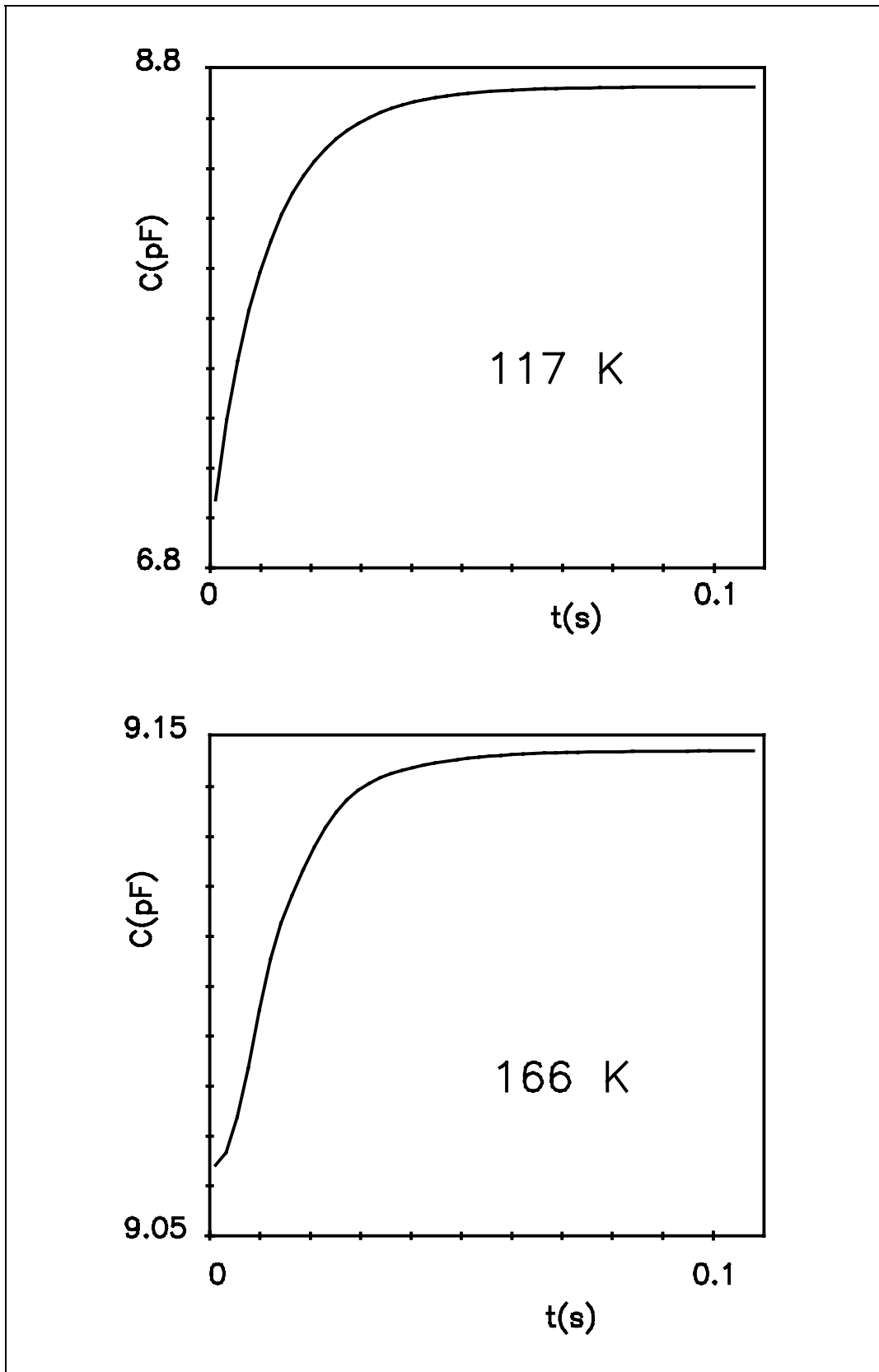
Volviendo ahora al tratamiento sistemático que venimos realizando de la unión, ponemos en duda cualquiera de las dos conclusiones anteriores. El hecho de que la zona de carga espacial se reparta, aunque de forma no simétrica, en las dos regiones de la unión implica necesariamente otra forma de asignar o de localizar los dos centros encontrados en el espectro; en nuestro trabajo se ha demostrado que la emisión de los centros se produce en las dos regiones y que uno se localiza en la mitad superior de la

banda prohibida y el otro en la inferior. Este resultado, junto con que la concentración de impurezas básicas es distinta dependiendo de la región de la unión implicaría que, aunque los dos centros se encontraran en la misma concentración, no necesariamente debería ser igual la altura de los dos picos. En concreto, esta afirmación la hemos comprobado para la muestra que estamos estudiando en este apartado. Se han simulado dos transitorios de capacidad (figura 16) para pulsos de mayoritarios (-9.5 V, 0.2 V) igual que para el caso experimental, uno de ellos correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T1}$  y el otro a la emisión del nivel  $E_{T2}$ . Se han elegido dos temperaturas a las cuales los dos niveles emiten con la misma constante de tiempo, en concreto 117 K para el  $E_{T1}$  y 166 K para el nivel  $E_{T2}$ ; los portadores son emitidos con una constante de tiempo  $1/e_{n,p}=14.9$  ms. El resultado es el esperado: se encuentra una gran diferencia de amplitud en los dos transitorios a pesar de que la concentración de centros profundos es la misma para ambos. Con esta nueva prueba se vuelve a verificar el comportamiento experimental de nuestras muestras, en este caso para un espectro de DLTS, que en principio parecía tener si no una explicación trivial por lo menos muy estudiada hasta la fecha.

Una muestra del valor de la relación entre concentración de impurezas profundas y no profundas la proporciona el ajuste de estos transitorios por exponenciales de la forma:

$$C(t) = A + B \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (1)$$

El transitorio correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T1}$  se ajusta a una exponencial perfecta con una constante de tiempo  $\tau=11.2$  ms, algo alejado de la constante de tiempo real ya que este nivel emite en la zona N y allí las impurezas profundas son de un orden comparable al dopante básico. El transitorio correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T2}$  se puede calificar a simple vista como no exponencial debido a la región inicial de esta relajación; sin embargo, la exponencial que mejor se aproxima presenta una constante de tiempo de 14.3 ms, prácticamente igual que la considerada inicialmente. En este caso, el nivel  $E_{T2}$  emite en la región P, y allí la concentración de impurezas básicas crece



**Figura 16.** Transitorios isotérmicos de capacidad que reflejan la emisión de portadores desde el nivel  $E_{T1}$  a 117 K y desde el nivel  $E_{T2}$  a 166 K.

rápidamente por lo que se puede considerar que en la región donde se produce la emisión de portadores la concentración de impurezas profundas es mucho menor que la de impurezas básicas.

Como resumen al análisis de este conjunto de tres espectros de DLTS podemos decir que el modelo utilizado de unión gradual con dos centros profundos, uno en la mitad superior y otro en la inferior de la banda prohibida nos ha permitido explicar: a) la disminución de los máximos de DLTS por inyección de minoritarios, b) la desaparición del pico  $E_{T2}$  al alejarnos de la unión y c) la altura relativa de los picos.

### **4.3.2 MUESTRAS CON ALTA CONCENTRACIÓN DE PLATINO**

La obtención de parámetros asociados a defectos en los semiconductores se ha venido realizando mediante la DLTS. Esta técnica está basada en el hecho de que la región de carga espacial experimenta una pequeña variación mientras los centros profundos emiten sus portadores, todo ello suponiendo que la concentración de centros profundos  $N_T$  es despreciable comparada con la concentración de portadores libres, o lo que es igual, con la concentración de impurezas básicas. Sin embargo por las necesidades de hoy en día, la concentración de defectos no cumple necesariamente esta condición: ejemplos de actualidad se dan en materiales semiaislantes de GaAs [108], en GaAlAs tipo N [109] o en materiales implantados iónicamente o irradiados con protones o neutrones. En estas situaciones no es válido un análisis simple de DLTS y es necesario desarrollar uno nuevo implicando fuertes correcciones que en caso de ser sencillas no ganan en generalidad: llámese ITS [55], capacidad constante [54,3] u otro tipo de modificaciones más particulares [109-111]. Vamos a estudiar ahora precisamente que es lo que ocurre en muestras fuertemente impurificadas con centros profundos.

El segundo bloque de espectros nos muestran un comportamiento completamente diferente. En la figura 6 desaparece por completo el pico de la izquierda



tanto para pulsos de mayoritarios como de minoritarios, aunque en el lugar indicado por la flecha, donde debería haber aparecido el nivel  $E_{T1}$ , tiende a emerger un pequeño pico. En el de la derecha, en las dos situaciones en las que se inyectan minoritarios se detecta la presencia de estos, gracias a la existencia de sendos picos negativos muy pronunciados (curvas (b) y (c)). Bajo pulsos de mayoritarios, polarizando la muestra únicamente en inverso, y analizando también la región de temperaturas donde se ha obtenido el pico de minoritarios se observan dos extremos, uno positivo y uno negativo con un punto de inflexión entre ellos (curva (a)), localizado a la misma temperatura que el mínimo de minoritarios. Los modelos clásicos utilizados en la teoría de la DLTS de capacidad implican necesariamente la existencia de picos exclusivamente positivos. Sólo la inyección de minoritarios permite la existencia de picos de los dos signos.

En las figuras 7, 8 y 9 se vuelven a observar los mismos fenómenos que en la anterior representación. Por dicha semejanza se ha omitido el espectro de inyección de minoritarios correspondiente a la polarización directa de 1.0 V.

La simulación de curvas de capacidad en alta frecuencia tanto en régimen estacionario como transitorio para diferentes temperaturas nos permite interpretar estos espectros. Querer sacar conclusiones únicamente de espectros de DLTS como los representados en estas figuras conduciría a resultados incorrectos. El análisis de un espectro aislado como el de las figuras 6 a 9 ó la 13 implicaría eliminar de partida un nivel de impurezas, ya sea el  $E_{T1}$  o el  $E_{T2}$  respectivamente. Si hubiéramos iniciado la caracterización de nuestras muestras con un análisis exclusivo de la DLTS estas uniones no dejarían de ser un caso muy particular, del que costaría trabajo sacar conclusiones correctas. Nuestro planteamiento ha sido sin embargo el opuesto, partir de una situación que puede ser muy general y una vez planteada interpretar los problemas que puedan aparecer en técnicas como la DLTS.

Todas las anomalías observadas en los distintos espectros de DLTS se

explican gracias al desarrollo teórico que se elaboró para una unión gradual con centros profundos en el que se calculaba la distribución de magnitudes eléctricas como el campo, potencial, densidad de carga y factores de ocupación de los centros a lo largo de la unión. De todas formas, para comprender aún mejor el primer bloque de espectros y analizar y discutir este segundo vamos a simular transitorios de capacidad para estas muestras. Para el tipo de unión que hemos considerado, una vez hallados los perfiles de impurezas básicas y profundas y calculados los valores de parámetros asociados a los centros, la simulación de transitorios de capacidad y su comparación posterior con otros adquiridos experimentalmente nos permitirá ratificar, una vez más, el modelo utilizado hasta ahora.

#### **4.4 TRANSITORIOS ISOTÉRMICOS DE CAPACIDAD**

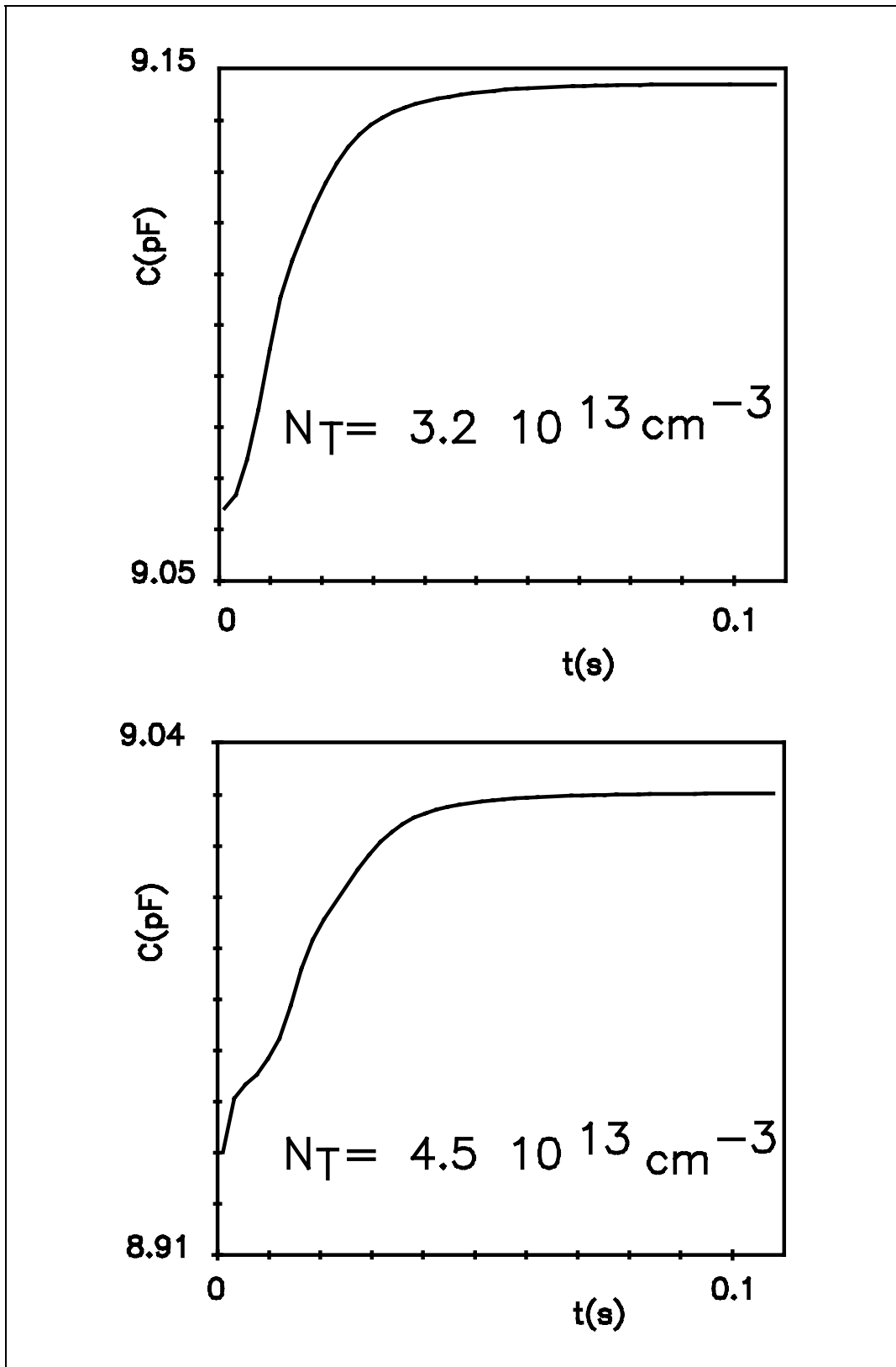
En un capítulo anterior se simuló el comportamiento de una unión gradual con centros profundos en estado estacionario a través de la capacidad en alta frecuencia; su comparación con las medidas experimentales nos permitió conocer como estaba distribuida la unión así como la concentración de centros profundos. Con estos resultados vamos a reproducir ahora su estado transitorio a través de magnitudes eléctricas dependientes del tiempo. En nuestro caso las señales que vamos a estudiar son transitorios isotérmicos de capacidad como respuesta a pulsos de tensión con valores extremos de polarización en inversa, de  $-9.5$  V y  $-0.2$  V.

Este tratamiento teórico nos permitirá verificar una vez más los resultados obtenidos hasta ahora y será el paso final para la discusión de las anomalías observadas en los espectros de DLTS, principalmente, en el caso de muestras fuertemente impurificadas con centros profundos. Este estudio teórico se va a realizar teniendo en cuenta las siguientes variables: temperatura de difusión de platino, y por tanto la concentración de este elemento presente en el semiconductor, temperatura de emisión

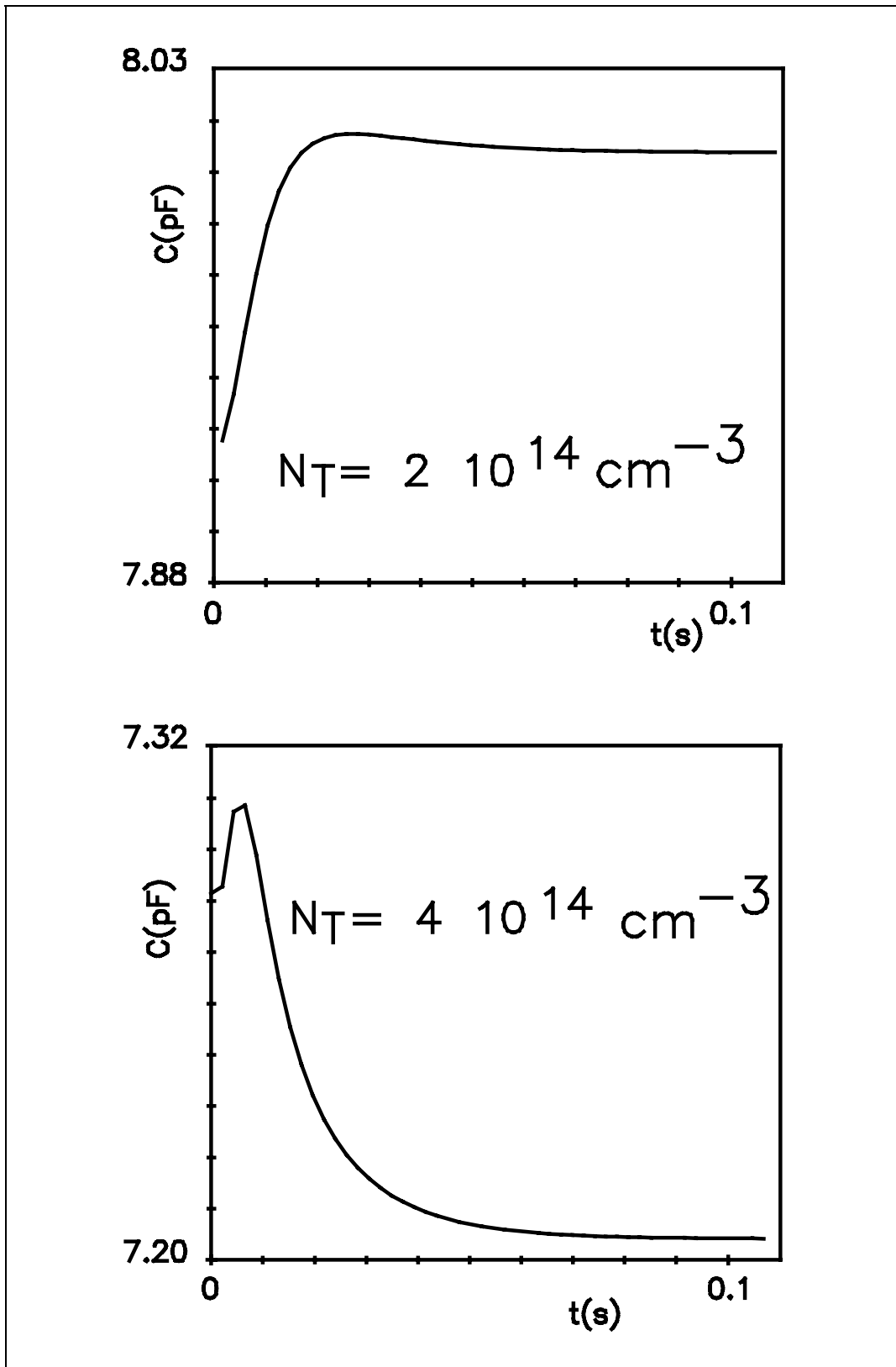
y el nivel que va a emitir. Tomaremos una de ellas como parámetro y se analizarán como evolucionan los transitorios en función de la otra variable.

#### **4.4.1 EVOLUCIÓN DE LOS TRANSITORIOS DE CAPACIDAD CON LA CONCENTRACIÓN DE CENTROS PROFUNDOS.**

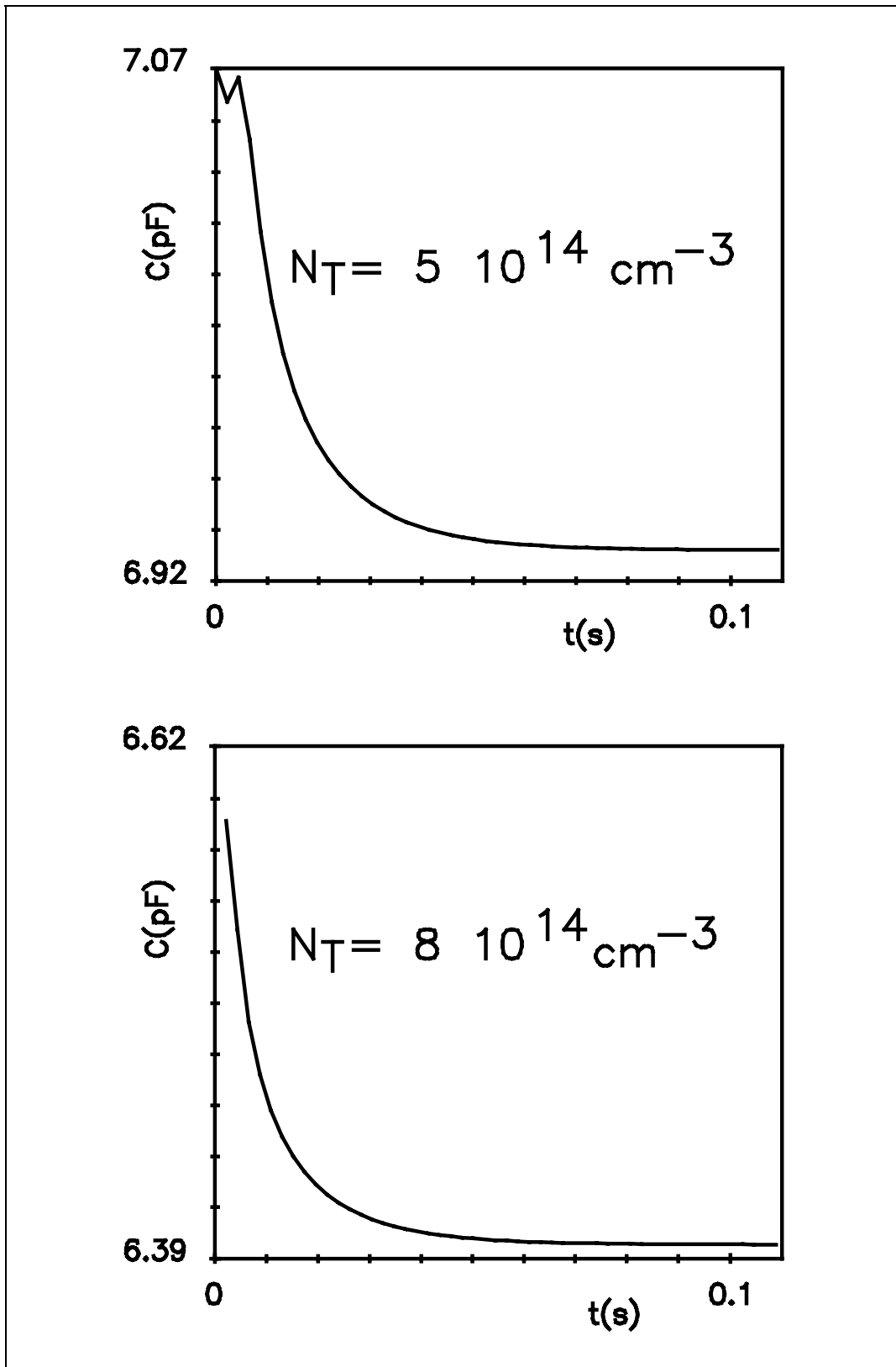
En primer lugar vamos a simular el comportamiento del nivel  $E_{T2}$ , o sea, el que se ha encontrado que emite a temperaturas más elevadas. Para este nivel mantendremos la temperatura de emisión fija y consideraremos muestras con el mismo perfil de impurezas básicas pero con diferentes concentraciones de platino. El perfil de impurezas básicas es el correspondiente a la serie caracterizada por una concentración de átomos donantes en el sustrato de  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y las concentraciones de impurezas profundas las halladas para toda esta serie; vamos a considerar por tanto concentraciones de impurezas profundas desde  $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , menores que la de poco profundas, hasta  $8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , mucho mayores que  $N_D$ . La evolución de los transitorios de capacidad con la concentración de platino, y a una temperatura fija (166 K) se muestra en las figuras 17, 18 y 19. Se observan dos comportamientos extremos dependiendo de la concentración de platino: para valores bajos, el transitorio de capacidad es creciente tal y como se prevé en la teoría clásica para el caso de un pulso de mayoritarios, y para valores altos ese transitorio es decreciente, caso que no se ha encontrado en la literatura hasta ahora. Recordemos que el modelo de muestra que se está analizando conlleva menos aproximaciones que los que se utilizan en investigaciones sobre uniones, es un modelo que se acerca más a la realidad y fácil de encontrar en cualquier dispositivo electrónico. A la hora de interpretar estos resultados hay que tener en cuenta que el nivel que emite lo hace, con mucha mayor probabilidad, en la zona P. Aunque para distinguir las muestras comparemos la concentración de impurezas profundas con la concentración de impurezas básicas en el sustrato, la región



**Figura 17.** Transitorios de capacidad obtenidos numéricamente para muestras con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y distintas concentraciones de centros profundos.  $T = 166 \text{ K}$



**Figura 18.** Transitorios de capacidad obtenidos numéricamente para muestras con concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y distintas concentraciones de centros profundos.  $T=166 \text{ K}$



**Figura 19.** Transitorios de capacidad obtenidos numéricamente para muestras con concentración en el sustrato  $N_D = 6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y distintas concentraciones de centros profundos.  $T = 166 \text{ K}$

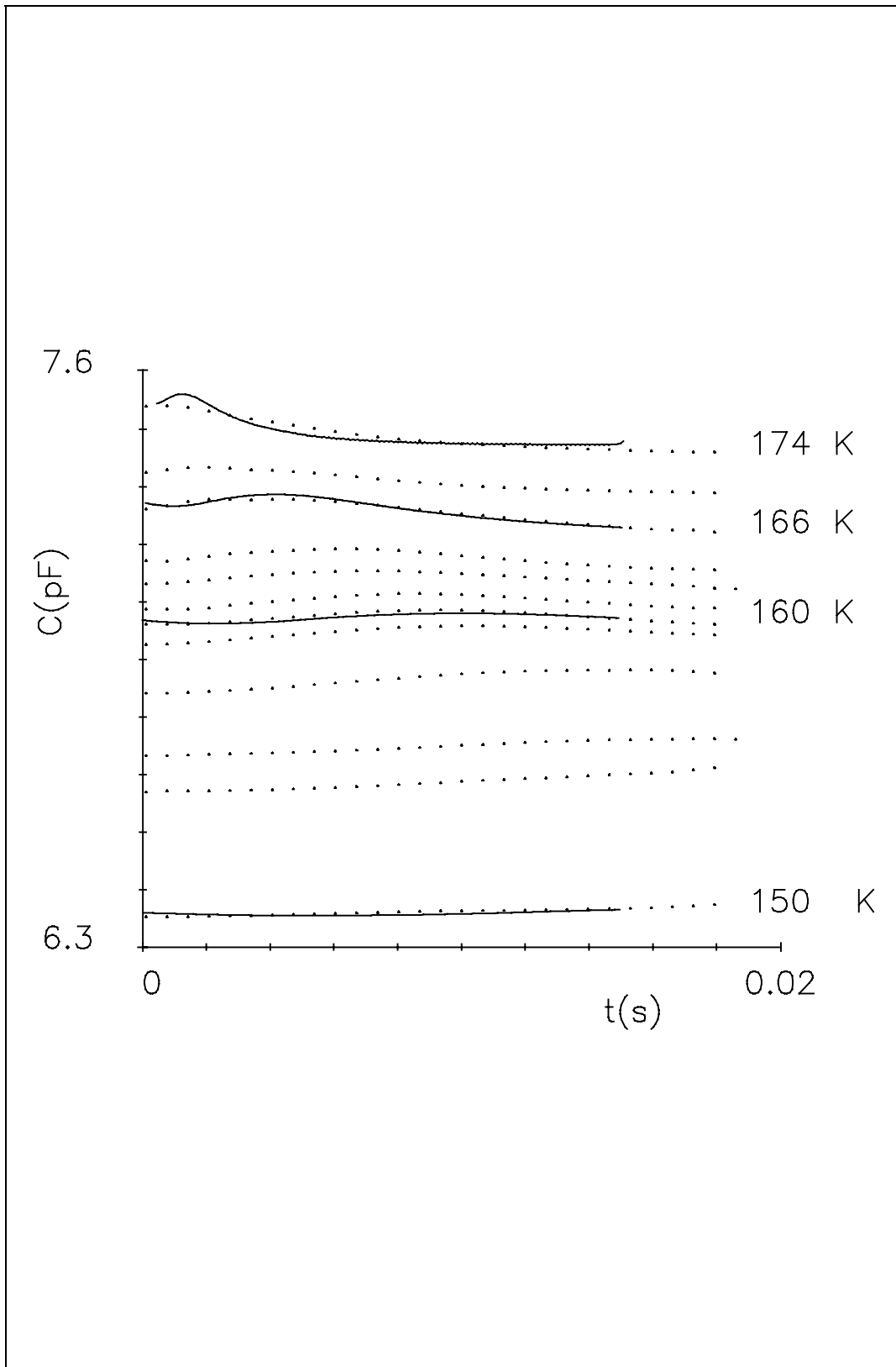
que obliga a que la muestra se comporte de esta forma es la que varía de forma gradual, es decir la zona P de la unión. Entre los dos valores extremos de la concentración de platino o lo que es igual entre el comportamiento creciente y decreciente para el transitorio de capacidad, se observa una evolución continua en la que aparecen situaciones intermedias con crecimiento y decrecimiento para un mismo transitorio.

La forma que adquieren estos transitorios simulados nos permiten verificar ya fenómenos experimentales que aparecen en la DLTS correspondientes al pico  $E_{T2}$ . Con este tipo de relajación hacia el equilibrio, es decir creciente puro, creciente y decreciente, y decreciente puro, al realizar un espectro de DLTS nos debemos encontrar con señales positivas, pasos por cero y señales negativas.

No tendría sentido expresar de forma gráfica un tratamiento similar para el nivel  $E_{T1}$  pues, por un lado, se ha podido comprobar tanto experimental como numéricamente que, a medida que aumentamos la concentración de platino, la capacidad a bajas temperaturas permanece bloqueada a un valor constante, y con ella aquella zona donde es perceptible la emisión de este nivel. Por lo tanto, la transición entre dos valores de la tensión inversa aplicada no tendrá como fruto un transitorio y consecuentemente el espectro de DLTS permanece plano. Por otro lado, para concentraciones bajas de platino se ha obtenido un pico de DLTS, correspondiente a este nivel, esperable según nuestra teoría en la que se considera un perfil de impurezas ajustado a la realidad, tal y como se demostró anteriormente.

#### **4.4.2 EVOLUCIÓN DE LOS TRANSITORIOS DE CAPACIDAD EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA. NIVEL $E_{T2}$**

En segundo lugar vamos a seguir considerando el nivel  $E_{T2}$  pero ahora vamos a mantener fija la concentración de impurezas, es decir vamos a analizar una sola muestra. Lo que se pretende observar es como evoluciona la capacidad hacia el

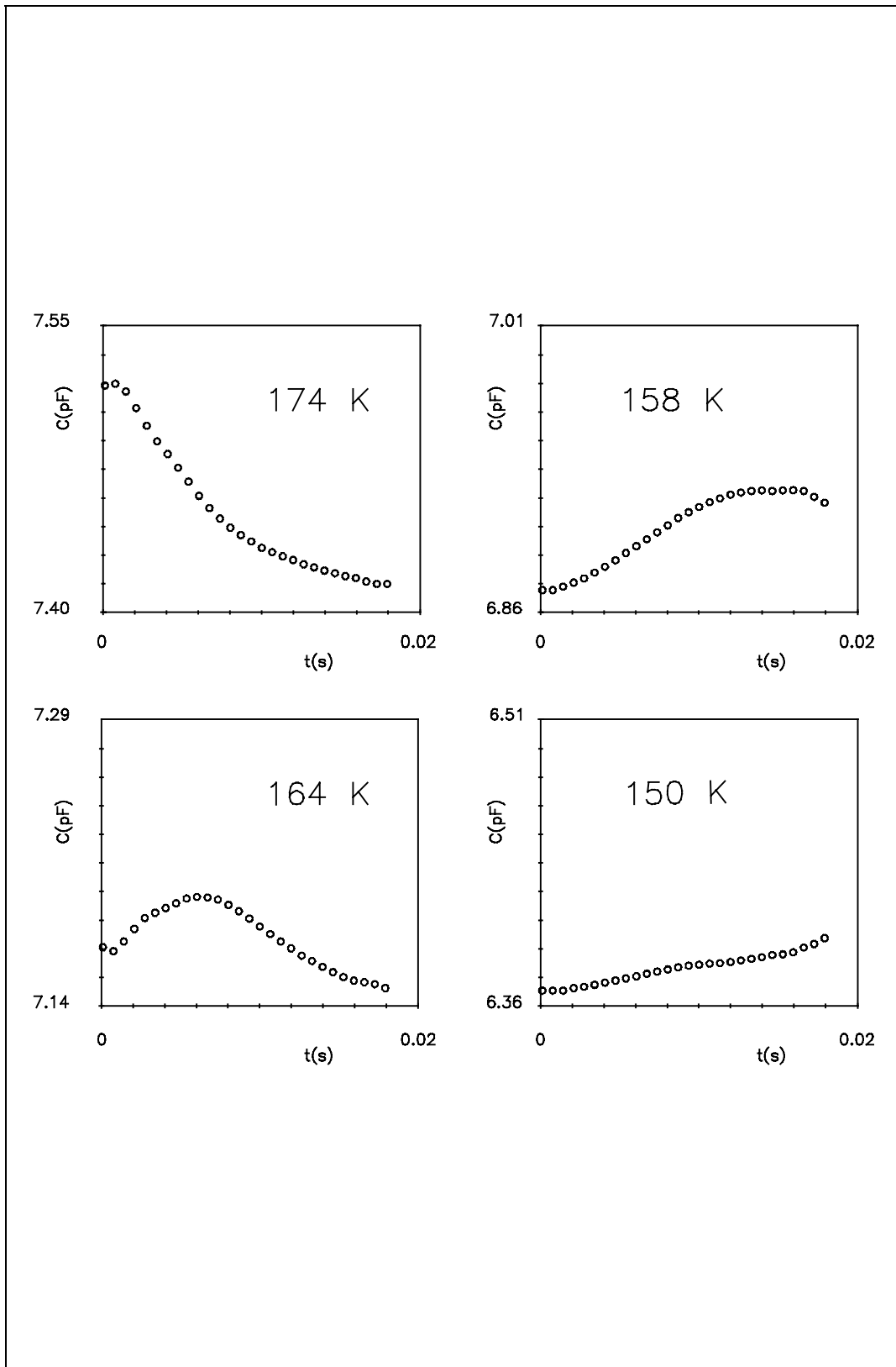


**Figura 20.** Transitorios isotérmicos de capacidad medidos (trazo discontinuo) y calculados (continuo). Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  y concentración de platino  $N_T=9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .



equilibrio como respuesta a pulsos de mayoritarios para diferentes temperaturas. Atendiendo a la literatura cabría esperar un transitorio con mayor o menor índice de exponencialidad [8] pero siempre creciente. La realidad es como se muestra en la figura 20. La muestra que se ha analizado experimentalmente ha sido la correspondiente a la temperatura de difusión de platino más alta (920 °C) y numéricamente la que se ajusta a ella (concentración en el sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y concentración de platino  $N_T=9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ). En dicha figura se muestran una serie de transitorios experimentales, a puntos, tomados a diferentes temperaturas y superpuestos a algunos de ellos los transitorios calculados numéricamente, en línea continua.

Cabe destacar el perfecto acuerdo entre los resultados experimentales y calculados. Únicamente para la curva tomada a 174 K hay una pequeña discrepancia, ya que aparece una componente más rápida en la curva calculada que no se aprecia en la experimental, debido al tiempo de respuesta del sistema de medida. Para apreciar con más detalle como varían los transitorios de capacidad para muestras con alta concentración de centros profundos vamos a disminuir la escala de representación para cuatro de los transitorios medidos (figura 21). En esta figura se observan diferentes formas de relajación hacia el equilibrio dependiendo de la temperatura, aunque se observa una tendencia determinada a medida que aumentamos la temperatura de emisión de los centros. Como la duración de la medida ha sido la misma para todos los transitorios da la impresión que existe una evolución clara desde transitorios estrictamente crecientes a decrecientes puros. Sin embargo si se observa cualquiera de los transitorios de la figura 20 se puede ver un crecimiento inicial, alcanzar un máximo y posteriormente decrecer. Como la magnitud que se está variando es la temperatura de emisión, a temperaturas más bajas ese crecimiento es más prolongado ya que está asociado a tiempos de emisión mayores; a temperaturas más elevadas, al emitir con más rapidez, ese transitorio inicial creciente se va distinguiendo menos en comparación con el resto del transitorio medido.

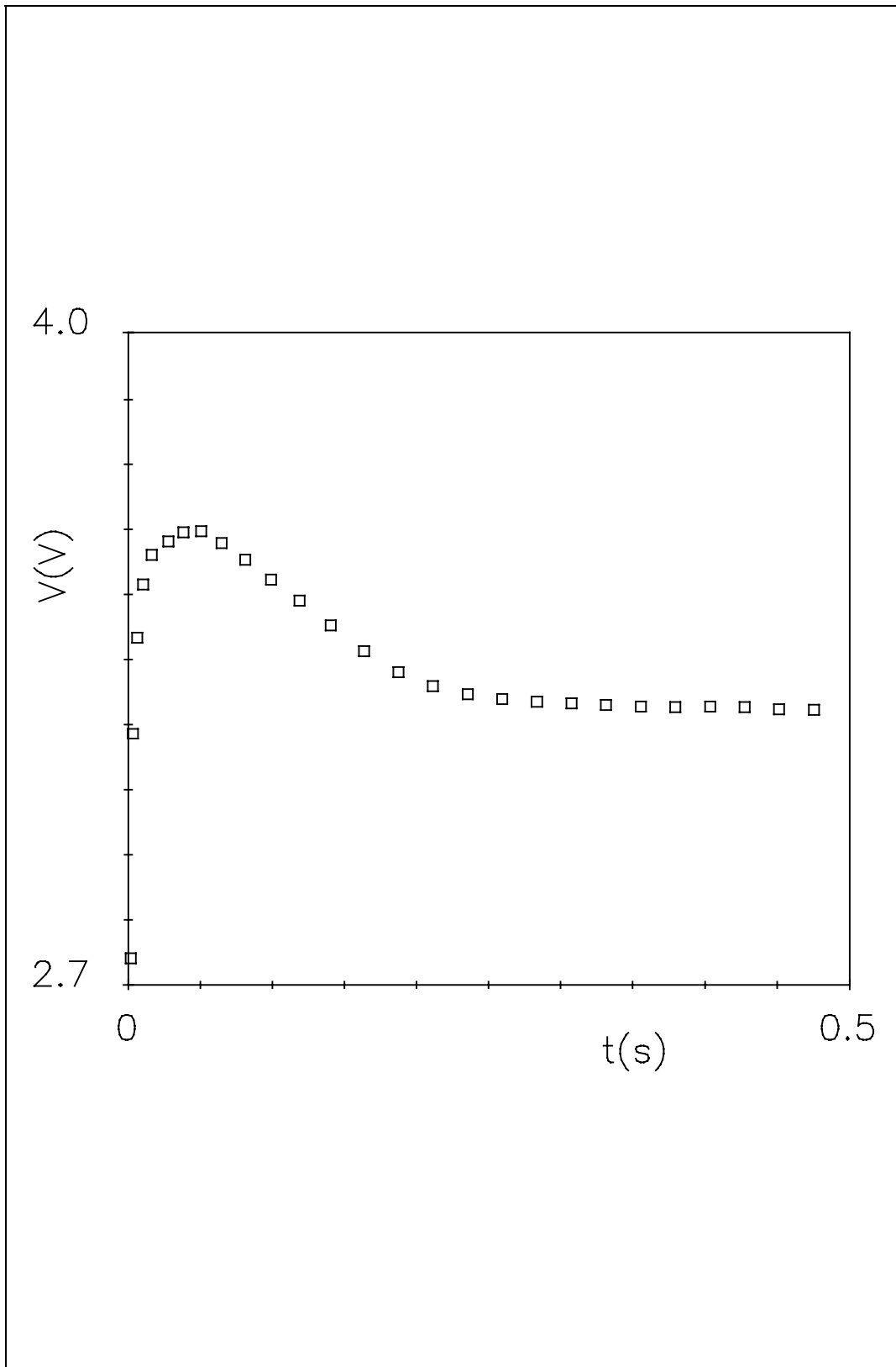


**Figura 21.** Transitorios isotérmicos de capacidad experimentales (Pulsos de mayoritarios). Muestra de sustrato  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y concentración de platino  $N_T=9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

Con el ajuste de los transitorios medidos con los calculados no solo verificamos de nuevo todos los resultados obtenidos hasta ahora: perfil de impurezas básicas, concentración de centros profundos y parámetros asociados a los centros, sino que justificamos también el comportamiento de los espectros de DLTS de mayoritarios correspondientes a las muestras con mayor concentración de platino, aquellos en los que se observaba ese cambio de signo en los picos de tales espectros. Para dos tiempos fijos  $t_1$  y  $t_2$ , la diferencia de capacidad  $C(t_1)-C(t_2)$  calculada para todos los transitorios de la figura 20 pasaría de tomar valores positivos a temperaturas bajas, caso de un transitorio creciente, hasta valores negativos para temperaturas altas, caso de un transitorio decreciente, y entre ambas situaciones nos encontraríamos con la igualdad entre  $C(t_1)$  y  $C(t_2)$ , transitorio en el cual observaríamos un máximo centrado entre  $t_1$  y  $t_2$ . Un transitorio de capacidad creciente implica una disminución de la zona de carga espacial, uno decreciente es consecuencia del aumento del ancho de la zona de carga espacial y uno mixto se produce porque hay una disminución y un aumento de la zona de deplexión dentro del mismo proceso de relajación. Todo ello es explicable porque nos alejamos de las situaciones ideales de unión abrupta asimétrica. El razonamiento de estos fenómenos quedó expuesto de forma teórica al principio de esta memoria en donde la muestra fue completamente caracterizada por la distribución de magnitudes como el potencial, el campo eléctrico y en concreto por la evolución durante un transitorio de la densidad neta de carga a lo largo de toda la unión (figuras 19-21, capítulo 1).

#### **4.5 TRANSITORIOS DE TENSIÓN A CAPACIDAD CONSTANTE PARA MUESTRAS FUERTEMENTE DOPADAS CON PLATINO**

La exponencialidad de los transitorios de tensión a capacidad constante para muestras débilmente dopadas con platino quedó comprobada de acuerdo con el análisis de ITS al que se sometió a estos transitorios. Permitió por tanto la determinación



**Figura 22.** Transitorio de tensión a capacidad constante correspondiente a la emisión del nivel  $E_{T2}$  para una muestra fuertemente dopada con platino.  $T=163$  K.

de las energías de activación de niveles energéticos previamente detectados por DLTS de capacidad. La simulación de dos transitorios de capacidad para este tipo de muestras ha mostrado también que, en caso de haberlos utilizado en lugar de los de capacidad constante, se habrían obtenido valores erróneos para los coeficientes de emisión. En este apartado vamos a mostrar que tampoco es posible calcular la energía de activación del nivel  $E_{T2}$  para muestras con alta concentración de centros profundos; el nivel  $E_{T1}$  queda desechado de partida ya que por el bloqueo de la capacidad sería imposible hacerlo. En la figura 22 se muestra un transitorio de tensión a capacidad constante experimental para un diodo con una concentración en el sustrato de  $N_D=6.67 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  y una concentración de impurezas profundas  $N_T=9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . La temperatura a la que se captó el transitorio 163 K y el nivel cuya emisión se observa es el  $E_{T2}$ . No se detecta la presencia del nivel  $E_{T1}$  ni a estas temperaturas por las limitaciones de medida ni a temperaturas más bajas por el bloqueo intrínseco de la capacidad. Esta relajación no solo no se comporta de manera exponencial, sino que vuelve a aparecer un transitorio mixto, con un crecimiento y un decrecimiento donde a priori era esperable un transitorio creciente únicamente (apéndice 2). De nuevo la posible tendencia combinada de la zona de carga espacial a ensancharse y estrecharse hace que la tensión aplicada a la muestra también oscile para mantener así constante la capacidad de la unión.

Una vez que se ha analizado el comportamiento de muestras fuertemente dopadas con platino a través de transitorios de capacidad y tensión conviene resumir las situaciones que hemos encontrado. De nuevo, nuestro modelo de una unión gradual con dos centros profundos localizados en ambas mitades de la banda prohibida nos ha permitido explicar: a) la desaparición del pico correspondiente al nivel  $E_{T1}$  y b) los espectros oscilantes correspondientes a la emisión de portadores mayoritarios desde el nivel  $E_{T2}$ .

#### 4.6 TRABAJOS PREVIOS DE DLTS REALIZADOS SOBRE EL SISTEMA Si:Pt

Por último, y antes de terminar conviene hacer una revisión de todos los niveles asociados al platino y detectados en la banda prohibida del silicio por una serie de investigadores aplicando diferentes técnicas y a su vez compararlos con nuestros resultados. Aunque se haga una recopilación general de estas técnicas y de distintos tipos de muestras sobre las que se han experimentado nos centraremos en aquellos trabajos que presentan una relación más íntima con el nuestro. Trataremos de analizar cual es la forma de interpretar esos resultados y las aproximaciones que se han utilizado.

Podemos separar varios grupos de experiencias dependiendo del tipo de muestras analizadas y que coinciden a su vez con un determinado momento histórico. En un primer periodo de tiempo las muestras analizadas eran sustratos semiconductores y las técnicas empleadas aquellas que se basaban en la conductividad del material: fotoconductividad, resistividad, efecto Hall, termoconductividad. La tabla 1 proporciona una muestra de ello. En un periodo posterior se aprovecharon las propiedades que presenta una unión entre diferentes materiales para analizar los efectos de los centros profundos en los semiconductores. Sin embargo, se continuaba estudiando por separado a los materiales de distinta conductividad: o bien se construía una unión entre un metal y un semiconductor P ó N, o bien entre dos semiconductores pero uno de ellos fuertemente dopado, obteniéndose estructuras P<sup>+</sup>N o N<sup>+</sup>P; se aprovechaban así, con este tipo de uniones, unas propiedades particulares y sobre todo su simplicidad matemática. En este segundo intervalo de tiempo vamos a separar los trabajos realizados mediante técnicas radiativas [97,112-115] de los térmicas y en concreto de la DLTS de capacidad por establecer una comparación más completa con nuestras experiencias; en la tabla 2 se expone un conjunto de estos trabajos.

Esta abundancia de referencias en la literatura al comportamiento del platino en el silicio se debe en parte a la falta hasta ahora de una teoría general que

| Ref. | Muestra | Resistividad sustrato<br>Concentración impurezas | Técnica   | Temperatura<br>difusión (°C) | Tiempo<br>difusión | Ec-Et   | ET-Ev   |
|------|---------|--|---|------------------------------|--------------------|---|---|
| [34] |         |  | EPR y efec<br>Hall                                      |                              |                    |   | 0.34 <sup>A</sup> 0.45 <sup>A</sup>   |
| [34] |         |  | Fotoconduc-<br>tividad                                  |                              |                    |   | 0.31 <sup>D</sup> 0.37 <sup>D</sup>   |
| [35] | P       | 21-30 Ω cm                                       | Termocon-<br>ductividad<br>Resistividad<br>Resistividad | 1100-1200                    | 72 h               | 0.25 <sup>A</sup><br>0.24 <sup>D</sup><br>0.24 <sup>A</sup> | 0.31 <sup>D</sup> 0.36 <sup>A</sup><br>0.30 <sup>D</sup> 0.36 <sup>A</sup><br>0.34 <sup>D</sup> |
| [38] |         |  | Termocon-<br>ductividad<br>Efecto Hall                  |                              |                    | 0.23 <sup>A</sup><br>0.21 <sup>A</sup>                      | 0.34 <sup>A</sup> 0.45 <sup>A</sup><br>0.21 <sup>D</sup> 0.36 <sup>A</sup>                      |
| [40] | N<br>P  | 5-300 Ω cm<br>3-300 Ω cm                         | Resistividad  | 1000-1200                    | 1-3 días           | 0.22 <sup>A</sup><br>0.27 <sup>D</sup>                      | 0.22 <sup>A</sup> 0.27 <sup>D</sup> 0.38 <sup>A</sup>   |
| [41] | N<br>P  |  | Efecto Hall   | 800-1250                     |                    | 0.20 <sup>A</sup>   | 0.28 <sup>D</sup> 0.42 <sup>A</sup>   |

**Tabla 1.** Trabajos sobre el sistema Si:Pt en muestras compuestas por un solo tipo de semiconductor.

| Ref.                          | Muestra  | Resistividad sustrato<br>Concentración impurezas                             | Técnica                    | Temperatura<br>difusión (°C) | Tiempo<br>difusión | Ec-ET                               | ET-Ev   |
|-------------------------------|--|--|----------------------------|------------------------------|--------------------|-------------------------------------|---|
| [6]                           | P <sup>+</sup> N N <sup>+</sup><br>N <sup>+</sup> P P <sup>+</sup> | 6 10 <sup>14</sup> cm <sup>-3</sup><br>8 10 <sup>14</sup> cm <sup>-3</sup>   | Capacidad<br>constante     | 890                          | 1200 s             | 0.23 <sup>A</sup>                   | 0.32 <sup>D</sup>   |
| [42]                          | P <sup>+</sup> N N <sup>+</sup><br>N <sup>+</sup> P P <sup>+</sup> | 25-35 Ω cm<br>25-35 Ω cm   | D L T S                    | 860-890                      | 45-60 m            | 0.23 <sup>A</sup> 0.34              | 0.19 <sup>D</sup> 0.28 <sup>D</sup> 0.33 <sup>A</sup> 0.41 <sup>A</sup> |
| [44]                          | P <sup>+</sup> N N <sup>+</sup><br>N <sup>+</sup> P P <sup>+</sup> | 7 10 <sup>13</sup> cm <sup>-3</sup><br>1.2 10 <sup>14</sup> cm <sup>-3</sup> | ITCAP                      | 844<br>820                   | 3 h<br>1 h         | 0.24 <sup>A</sup>                   | 0.32 <sup>D</sup>   |
| [48]                          | P <sup>+</sup> N<br>N <sup>+</sup> P                               | 100 Ω cm<br>10 Ω cm  | Fotocorr. y<br>fotocapac.  | 900<br>910                   |                    | 0.25 <sup>A</sup> 0.51              | 0.35  |
| [49]                          | P <sup>+</sup> N<br>N <sup>+</sup> P                               | 10 <sup>14</sup> cm <sup>-3</sup><br>10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup>       | D L T S<br>Cap. cons.      | 750-850                      | 4-16 h             | 0.23                                | 0.32  |
| [50]                          | Schot. N<br>Schot. P   | 1-2 Ω cm<br>13-15 Ω cm   | D L T S                    | 900                          | 1 h                | 0.23 0.52                           | 0.36  |
| [51]                          | P <sup>+</sup> N<br>N <sup>+</sup> P                               | 2-10 Ω cm  | Cociente de<br>capacidades | 825<br>806                   | 4 h<br>6 h         | 0.23 <sup>A</sup>                   | 0.31 <sup>D</sup>   |
| [52]                          | P <sup>+</sup> N N <sup>+</sup>                                    | 3.9 10 <sup>13</sup> cm <sup>-3</sup>  | D L T S                    |                              |                    | 0.21 <sup>A</sup> 0.34 <sup>A</sup> |   |
| Nuestro<br>trabajo<br>gradual | P <sup>+</sup> N N <sup>+</sup>                                    | 6.7 10 <sup>13</sup> cm <sup>-3</sup>  | Numerica                   | 850-920                      | 2 h                | 0.22 <sup>A</sup>                   | 0.34 <sup>D</sup>   |

**Tabla 2.** Trabajos sobre el sistema Si:Pt realizados en uniones Schottky o PN.



describa físicamente el sistema compuesto por una unión PN arbitraria con centros profundos y por otro lado a la importancia de esta impureza por su capacidad para controlar la vida media en el silicio. Sin embargo, como se observa en las tablas 1 y 2, los resultados sobre niveles energéticos introducidos en el silicio por la difusión de platino son altamente contradictorios y dispersos.

La separación de este conjunto de trabajos según la técnica empleada y el tipo de muestra analizada hace que converjan más entre sí estos resultados. Así, desde que se empezó a estudiar la unión metal-semiconductor o entre dos semiconductores se han encontrado de manera dominante dos niveles, uno situado debajo del mínimo de la banda de conducción, a unos 0.2-0.24 eV y con carácter aceptador, y otro por encima del máximo de la banda de valencia del silicio, a unos 0.3-0.35 eV, este con carácter donador. Se ha detectado otro nivel profundo localizado más hacia la mitad de la banda prohibida del que se ha dicho que juega un papel predominante como centro recombinante y por lo tanto en el tiempo de vida media de los portadores [50,116,117]. Por último se han hallado otros situados a la misma distancia de las bandas que los dos primeros pero referidos a la banda contraria y con carácter eléctrico también opuesto. En concreto, el nivel  $E_c-0.34$  eV detectado por DLTS de capacidad al que se le ha asignado un carácter aceptador. Este nivel ha sido detectado en muestras asimétricas  $P^+N$  a partir de transitorios de capacidad y con la utilización de pulsos de mayoritarios, desapareciendo bajo la inyección de minoritarios. Se ha justificado su ausencia al aplicar otras técnicas, efecto Hall, por la menor concentración respecto al nivel dominante  $E_c-0.23$  eV. Se ha calificado a este nivel como un buen centro recombinante por el hecho de desaparecer con la inyección de huecos y no hacerlo así el centro  $E_c-0.23$  eV. El perfecto conocimiento del perfil de impurezas básicas de nuestras muestras, que en principio se pueden calificar como estructuras  $P^+N$  al igual que han supuesto otros trabajos, ha permitido situar a los dos niveles detectados uno en la mitad superior de la banda prohibida con carácter aceptador (0.22 eV) y otro en la mitad inferior con carácter

donador (0.34 eV). Fenómenos parecidos a los encontrados con anterioridad se han vuelto a reproducir en nuestras muestras; por un lado hemos visto como desaparecía el nivel  $E_{T2}$  por inyección de minoritarios y por otro barriendo zonas más alejadas de la unión; sin embargo, la discusión de los mismos ha sido distinta. También se han planteado teóricamente y encontrado de forma experimental comportamientos diferentes. En cualquier caso ha sido el modelo simple de una unión gradual con dos centros profundos el que ha permitido interpretar estos resultados.

## CONCLUSIONES

- Se ha hecho un estudio previo de diferentes tipos de uniones PN y se ha analizado la información obtenida mediante la aplicación de diversas técnicas experimentales. Esto nos ha permitido establecer el marco en el que deben incluirse nuestros resultados a fin de proceder a su interpretación.

- Se ha elaborado un método de resolución numérica de la ecuación de Poisson con retículo variable aplicado a cualquier tipo de unión con centros profundos, válido tanto en régimen estacionario como transitorio.

- Se ha encontrado una expresión de la capacidad en alta frecuencia para este mismo tipo de uniones que permite calcular numéricamente esta magnitud sin iteraciones.

- Se ha estudiado numéricamente un modelo de unión gradual no lineal con dos centros profundos, situados, uno en la mitad inferior de la banda prohibida y otro en la superior. El análisis de magnitudes eléctricas (campo, densidad de portadores libres, posición de los seudoniveles de Fermi, factores de ocupación de los centros, densidad de carga neta) han permitido caracterizar de forma completa este tipo de unión:

a) La distribución de campo y de portadores libres predicen un comportamiento de la zona de carga espacial y de las curvas de capacidad en alta frecuencia a distintas temperaturas considerablemente diferente del que se obtiene en el caso de una unión abrupta.

b) Las distribuciones de carga neta en la unión, obtenidas numéricamente, describen con precisión el bloqueo, observado experimentalmente, en las curvas de capacidad en alta frecuencia para muestras cada vez más impurificadas con centros

profundos, platino en nuestro caso.

c) La evolución de la distribución de carga y del campo eléctrico en una unión gradual con centros profundos a lo largo de un transitorio adelantan la existencia de anomalías en transitorios isotérmicos de capacidad y tensión y espectros de DLTS, así como explican su conducta.

- Se ha realizado una caracterización primaria de estructuras  $P^+NN^+$  facilitadas por la Universidad de Valladolid. Se han simulado los procesos tecnológicos que han sufrido las muestras con el fin de completar la evaluación de parámetros básicos, obteniendo por SUPREM el perfil de impurezas y notándose claramente que no se adapta a una unión abrupta ni lineal. Esto nos indica que la interpretación que hagamos de los resultados no podrá basarse en la existencia de uniones  $P^+N$  o  $N^+P$  en nuestros dispositivos, a diferencia de la realizada por muchos autores anteriores con muestras que han experimentado procesos de difusión y tratamiento térmico semejantes a las nuestras.

- El montaje y puesta a punto de las técnicas basadas en la capacidad en alta frecuencia, transitorios isotérmicos de capacidad, de tensión a capacidad constante y DLTS ha permitido detectar centros profundos y medir los coeficientes de emisión; situándolos a 0.22 eV y 0.34 eV de los extremos de las bandas ( $E_{T1}$  y  $E_{T2}$  respectivamente). Sin embargo, no resulta posible determinar la posición exacta en la banda prohibida atendiendo únicamente a estas técnicas.

Se ha comprobado la invalidez de técnicas capacitivas clásicas aplicadas a nuestras muestras, consideradas como uniones  $P^+N$ , para el cálculo de la concentración de impurezas básicas en la región N. En efecto, los valores de las concentraciones así obtenidas no permiten reproducir por simulación los resultados experimentales de las medidas de capacidad.

- El procedimiento de obtención de la capacidad en alta frecuencia nos ha permitido eleborar un método indirecto, por comparación entre curvas experimentales y numéricas, para la determinación exacta de los perfiles de impurezas básicas y de centros profundos, la localización de los niveles profundos en la mitad superior o inferior de la banda prohibida y conocer el carácter donador o aceptador de dichos centros.

Un estudio teórico previo sobre la evolución de los factores de ocupación de los centros profundos con la temperatura ha permitido agilizar de forma práctica el método desarrollado para la obtención de perfiles de impurezas.

Nuestro método ha corregido el perfil de impurezas básicas proporcionado por el programa SUPREM, obteniéndose un mejor ajuste con las curvas experimentales de la capacidad en alta frecuencia y altas temperaturas.

- Se ha establecido una relación entre la concentración de platino presente en el silicio y la temperatura de difusión. Se ha comparado con trabajos previos valorando todas las variables tecnológicas y llegándose a un buen acuerdo.

- Se han obtenido espectros de DLTS de capacidad para muestras de silicio con diferentes concentraciones de platino, encontrándose anomalías no observadas hasta ahora en la literatura pero previstas en nuestro estudio teórico:

a) Los transitorios isotérmicos de capacidad correspondientes a pulsos de mayoritarios, para las muestras más impurificadas con platino, se han comportado como si se tratase de inyección de minoritarios.

b) La esperada exponencialidad de los transitorios de tensión a capacidad constante tampoco se ha verificado para muestras con mayor concentración de platino.

- Se han simulado transitorios isotérmicos de capacidad para muestras

impurificadas con distintas concentraciones de centros profundos obteniéndose los mismos resultados que en el caso experimental.

- Se han analizado trabajos previos sobre la aplicación de la DLTS de capacidad al sistema Si:Pt, comparándose con los espectros obtenidos mediante nuestra técnica. La suposición de un perfil de impurezas P<sup>+</sup>N en lugar de gradual conlleva a una localización incorrecta de algunos de los niveles que crea el platino en el silicio, así como valores no apropiados para la concentración de cada uno de estos niveles.

- El análisis de los espectros de DLTS para las muestras menos impurificadas con platino, utilizando el modelo de unión gradual con dos centros profundos, uno en la mitad superior y otro en la inferior de la banda prohibida, nos ha permitido explicar: a) la disminución de los máximos de DLTS por inyección de minoritarios, b) la desaparición del pico  $E_{T2}$  al alejarnos de la unión, c) la altura relativa de los picos. Y para las muestras más dopadas con platino: a) la desaparición del pico correspondiente al nivel  $E_{T1}$  y b) los espectros oscilantes correspondientes a la emisión de portadores mayoritarios desde el nivel  $E_{T2}$ .

- Toda la caracterización experimental y numérica sobre el platino en el silicio realizada a lo largo de este trabajo, nos a permitido concluir que el nivel  $E_{T2}$ , situado a 0.34 eV de una determinada banda, lo es respecto de la banda de valencia y presenta carácter donador; y que el nivel  $E_{T1}$ , localizado a 0.22 respecto a una de las bandas, está referido a la de conducción y presenta carácter aceptador. En cuanto a la concentraciones de estos niveles se ha obtenido la igualdad para ambos, lo que nos indicaría que el platino en el silicio crea un centro tripolar.

## APENDICE 1. PROCEDIMIENTO DE OBTENCIÓN DE LA CAPACIDAD EN ALTA FRECUENCIA.

### INTRODUCCIÓN

En este apéndice se detalla el método práctico de obtención de la capacidad en alta frecuencia para una tensión inversa de polarización y a una temperatura determinada. Se puede utilizar de manera directa si se conoce el perfil de impurezas básicas y profundas o bien como un procedimiento inverso para conocer dichos perfiles por comparación entre curvas de capacidad experimentales y teóricas. Antes de entrar en el núcleo de este apéndice, que será la exposición del método de Cowell, actualizado a uniones con centros, para la resolución numérica de la ecuación de Poisson y la posterior obtención de la capacidad, definiremos todos los pasos previos que se requieren para la aplicación del método.

### CARACTERÍSTICAS DEL SILICIO

El tratamiento numérico de un dispositivo semiconductor implica el tener que disponer de unas expresiones adecuadas para los parámetros que lo caracterizan, tan primordiales como la concentración intrínseca de portadores y la densidad efectiva de estados en las bandas de valencia y conducción; estos últimos útiles en la interpretación y modelado de las propiedades de niveles introducidos por impurezas y defectos en el interior de la banda prohibida. Sin embargo, los valores habitualmente utilizados hasta ahora muestran algunas inconsistencias [118]. En nuestro trabajo para el rango de temperaturas sobre el que se ha experimentado se han utilizado unas expresiones en función de la temperatura absoluta proporcionadas por Selberherr en 1984 [84]:

- Anchura de la banda prohibida

$$E_G = 1.17 - 0.000702 \cdot \frac{T^2}{T+1108} \text{ eV} \quad (1)$$

- Densidad efectiva de estados

$$N_c = 2.508 \cdot 10^{19} \left[ \frac{T}{300} \right]^{\frac{3}{2}} \left[ 1.045 + 0.135 \cdot \frac{T}{300} \right]^{3/2} \text{ cm}^{-3} \quad (2)$$

$$N_v = 2.508 \cdot 10^{19} \left[ \frac{T}{300} \right]^{3/2} \left[ 0.523 + 0.42 \cdot \frac{T}{300} - 0.133 \cdot \left( \frac{T}{300} \right)^2 \right]^{3/2} \text{ cm}^{-3} \quad (3)$$

- Concentración intrínseca de portadores

$$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} e^{-\frac{E_G}{2KT}} \quad (4)$$

## CARACTERÍSTICAS DE LAS IMPUREZAS Y GEOMETRÍA DE LA MUESTRA

El cálculo de la capacidad de una muestra con presencia de impurezas requiere conocer las características de estas. Para la solución de la ecuación de Poisson se necesita disponer de los perfiles de concentración de todas las impurezas, la posición energética de los niveles que crean éstas en el interior de la banda prohibida, la relación entre coeficientes de captura de huecos y electrones para cada nivel ( $R=c_p/c_n$ ) y el carácter eléctrico de los centros, aceptador o donador. En el caso particular de este trabajo, donde hay presencia de centros profundos y poco profundos, y para el rango de temperaturas en el que se está operando (por encima de la temperatura del nitrógeno líquido), se va a considerar que todas las impurezas básicas están ionizadas por lo que no es necesario introducir como dato la posición energética ni la relación de los coeficientes de captura de estos niveles pero sí, principalmente, su perfil de concentraciones.



El tratamiento de una unión unidimensional requiere tan solo como parámetros geométricos las anchuras de las regiones N y P, desde la unión metalúrgica hasta los contactos metálicos:  $W_n$  y  $W_p$  respectivamente.

## DISCRETIZACIÓN DE LA MUESTRA

Las ecuaciones diferenciales que se pretenden resolver, para el cálculo del potencial eléctrico o para la capacidad en alta frecuencia, operan con magnitudes continuas en la coordenada espacial  $x$ . Una colección infinita de puntos convertiría al problema en intratable. El primer paso en la solución numérica es la discretización del sistema con el que se esté trabajando en un número finito de puntos sin que se pierda información. En el caso de la ecuación unidimensional de Poisson la variable a cuantizar es la coordenada espacial " $x$ ".

Una posible forma de discretizar la región en estudio es dividirla en partes iguales. Sea " $l$ " la longitud de la región en estudio y tomamos  $n+1$  puntos. Sea  $x_j$  y  $\Phi_j$  la posición y el potencial en el punto  $j$  respectivamente y  $h$  el tamaño del intervalo entre dos puntos consecutivos. En este caso se cumplirá:

$$x_j = j \cdot h \quad j = 0, 1, \dots, n+1 \quad (5)$$

$$h = \frac{l}{n+1} \quad (6)$$

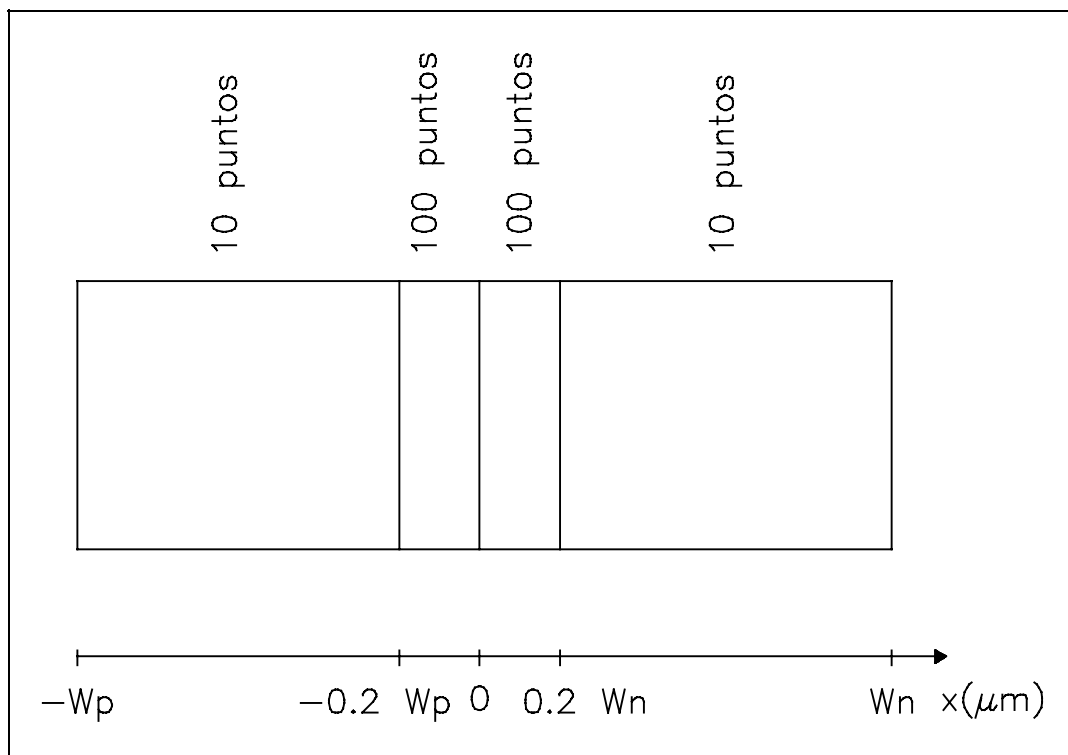
En el caso de tener distribuciones de potencial rápidamente variables cerca de la unión y mucho menos lejos de ella, se hace necesario encontrar otra discretización de la muestra, es decir, habrá que tomar más puntos en la zona de carga espacial que en las zonas neutras del dispositivo. Un algoritmo basado en el método de Cowell hace posible una selección automática de la red de puntos a utilizar. Inicialmente la primera iteración comienza con un número determinado de puntos distribuidos de manera uniforme. Una vez acabada la iteración ( $k$ ) se comprueba si la diferencia de

potencial entre dos puntos consecutivos  $|\Phi_j^{(k)} - \Phi_{j-1}^{(k)}|$  es mayor que cierta fracción de la variación total de la magnitud  $\Phi^{(k)}$  a lo largo de toda la muestra. En caso de que sea así se interpola un punto o los que sean necesarios entre ambos.

- Retículo inicial.

Para agilizar el cálculo desde el principio y para no saturar de puntos una región de la unión que no los necesite, se puede tener en cuenta inicialmente esta última consideración. Si a priori se conoce, aunque de forma aproximada, que una determinada región de la unión va a soportar las principales variaciones de potencial se puede distinguir esta zona del resto imponiendo en ella una mayor densidad de puntos aunque distribuidos de manera uniforme. El retículo de puntos, es decir el número de ellos que vamos a utilizar, y los lugares donde se van a encontrar se muestran a continuación.

El número de puntos inicial que se ha considerado es 221, repartidos de



**Figura 1.** Distribución de puntos en el retículo inicial.

la siguiente forma (Figura 1):

- 10 puntos equidistantes entre  $x = -W_p$  y  $x = -0.2 W_p$ .
- 100 puntos equidistantes entre  $x = -0.2 W_p$  y  $x = 0 \mu m$ .
- 100 puntos equidistantes entre  $x = 0 \mu m$  y  $x = 0.2 W_n$ .
- 10 puntos equidistantes entre  $x = 0.2 \mu m$  y  $x = W_n$ .

El retículo se modificará en el transcurso de la simulación. Se interpolarán puntos allí donde el incremento de potencial entre dos puntos consecutivos sea mayor que una determinada cantidad. En nuestro trabajo se ha elegido esta cantidad como un uno por ciento de los valores extremos del potencial eléctrico. La ventaja de este método es la precisión elegida, a costa de disminuir la velocidad. Una densidad de puntos menor no permitiría detectar los fenómenos anómalos que ocurren en los extremos de la zona de carga espacial.

## CÁLCULO DEL POTENCIAL

Para resolver la ecuación de Poisson vamos a basarnos en el método de Cowell, que logra una precisión de cuarto orden.

Desarrollando el potencial y su segunda derivada en el punto  $x_j$  hasta un término de cuarto orden y llamando  $h_j$  al incremento de la variable  $x$  entre dos puntos consecutivos:

$$h_j = x_j - x_{j-1} \quad , \quad (7)$$

se obtienen las siguientes cuatro expresiones:

$$\Phi(x_j + h_{j+1}) = \Phi(x_j) + h_{j+1} \Phi'(x_j) + \frac{h_{j+1}^2}{2} \Phi''(x_j) + \frac{h_{j+1}^3}{6} \Phi'''(x_j) + \frac{h_{j+1}^4}{24} \Phi^{IV}(x_j) \quad (8)$$

$$\Phi(x_j-h_j) = \Phi(x_j) - h_j \Phi'(x_j) + \frac{h_j^2}{2} \Phi''(x_j) - \frac{h_j^3}{6} \Phi'''(x_j) + \frac{h_j^4}{24} \Phi^{IV}(x_j) \quad (9)$$

$$\Phi''(x_j+h_{j+1}) = \Phi''(x_j) + h_{j+1} \Phi'''(x_j) + \frac{h_{j+1}^2}{2} \Phi^{IV}(x_j) \quad (10)$$

$$\Phi''(x_j-h_j) = \Phi''(x_j) - h_j \Phi'''(x_j) + \frac{h_j^2}{2} \Phi^{IV}(x_j) \quad (11)$$

De las expresiones (10) y (11) podemos obtener  $\Phi'''$  y  $\Phi^{IV}$  en función de la segunda derivada :

$$\Phi'''(x_j) = \frac{1}{h_j h_{j+1} (h_j + h_{j+1})} [h_j^2 \Phi''(x_j + h_{j+1}) + (h_{j+1}^2 - h_j^2) \Phi''(x_j) - h_{j+1}^2 \Phi''(x_j - h_j)] \quad (12)$$

$$\Phi^{IV}(x_j) = \frac{2}{h_j h_{j+1} (h_j + h_{j+1})} [h_j \Phi''(x_j + h_{j+1}) - (h_j + h_{j+1}) \Phi''(x_j) + h_{j+1} \Phi''(x_j - h_j)] \quad (13)$$

De las expresiones (8) y (9) junto con (12) y (13) y la ecuación de Poisson expresada en forma compacta  $\Phi'' = f(\Phi)$  podemos encontrar una expresión para el potencial:

$$\begin{aligned} & h_j \Phi(x_j + h_{j+1}) - (h_{j+1} + h_j) \Phi(x_j) + h_{j+1} \Phi(x_j - h_j) = \\ & = b_{j,j-1} \Phi''(x_j - h_j) + b_{j,j} \Phi''(x_j) + b_{j,j+1} \Phi''(x_j + h_{j+1}) \\ & = b_{j,j-1} f(\Phi_{j-1}) + b_{j,j} f(\Phi_j) + b_{j,j+1} f(\Phi_{j+1}) \end{aligned} \quad (14)$$

con

$$b_{j,j-1} = -\frac{1}{6} (h_{j+1} - h_j) h_{j+1}^2 + \frac{1}{12} \frac{h_{j+1}^3 + h_j^3}{h_{j+1} + h_j} h_{j+1} \quad (15)$$

$$b_{jj+1} = \frac{1}{6}(h_{j+1}-h_j)h_j^2 + \frac{1}{12} \frac{h_{j+1}^3+h_j^3}{h_{j+1}+h_j} h_j \quad (16)$$

$$b_{jj} = \frac{h_{j+1}h_j}{2}(h_{j+1}+h_j) + \frac{(h_{j+1}-h_j)^2(h_{j+1}+h_j)}{6} - \frac{h_{j+1}^3+h_j^3}{12} \quad (17)$$

La expresión (14) también se puede escribir en forma matricial:

$$A \cdot (\Phi) = B f(\Phi) + b \quad (18)$$

donde las matrices A, f, B y b son de la forma :

$$A = \begin{pmatrix} -(h_1+h_2) & h_1 & & & & \\ h_3 & -(h_2+h_3) & h_2 & & & \\ & & & h_{j+1} & -(h_j+h_{j+1}) & h_j \\ & & & & & & h_{n+1} & -(h_n+h_{n+1}) \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$f = \begin{pmatrix} f(\Phi_1) \\ f(\Phi_2) \\ \dots \\ f(\Phi_j) \\ \dots \\ f(\Phi_n) \end{pmatrix} \quad (20)$$



de esta manera quedan expresados los valores del potencial en la iteración k+1 en función e los valores de la iteración anterior, k.

Este método combinado de Cowell y Newton conduce a aproximaciones que convergen el doble de rápido que el de Stormer (este no utiliza la aproximación de Newton). Sin embargo el método de Cowell necesita de una mejor aproximación inicial. Se puede utilizar el resultado del método de Stormer como aproximación inicial del método de Cowell. En el caso de no tener centros profundos, una sola iteración con este último método es suficiente para conseguir la precisión requerida [30]. En nuestro caso, como en cada iteración se modifican los factores de ocupación, el método aunque sigue siendo convergente es algo más lento.

## INICIALIZACIÓN DEL POTENCIAL

Para comenzar la resolución de la ecuación de Poisson es necesario partir de unos valores iniciales para el potencial presente a lo largo de la unión.

Estos valores de potencial serán los que satisfagan la condición de neutralidad en cualquier punto de la muestra:

Región N.

$$p^{-n+N_D-N_A-N_{T1}} \frac{n+R_1 p_1}{n+n_1+R_1 p_1} + N_{T2} \left( 1 - \frac{n+R_2 p_2}{n+n_2+R_2 p_2} \right) = 0 \quad (26)$$

Región P.

$$p^{-n+N_D-N_A+N_{T2}} \frac{p R_2 + n_2}{(p+p_2) R_2 + n_2} - N_{T1} \left( 1 - \frac{p R_1 + n_1}{(p+p_1) R_1 + n_1} \right) = 0 \quad (27)$$

En la región N se desprecia la concentración de huecos y se obtiene la de electrones y en la región P despreciamos la concentración de electrones obteniendo la de huecos.

Una vez conocido n y p se calcula el potencial :

$$\Phi(x) = \frac{KT}{q} \ln \frac{n}{n_i} \quad (28)$$

para la región N, y

$$\Phi(x) = \frac{KT}{q} \ln \frac{n_i}{p} + V \quad (29)$$

para la región P.

Se elige el cero de energías en el nivel de Fermi de la zona neutra de la región N.

## CÁLCULO DEL FACTOR DE OCUPACIÓN

El grado de ionización de un nivel de impurezas viene determinado por el factor de ocupación de ese nivel, que en general será dependiente del tiempo según la ecuación:

$$\frac{\partial f_T}{\partial t} = -(c_n n + c_p p + e_n + e_p) f_T + (c_n n + e_p) \quad (30)$$

Si se trabaja en condiciones estacionarias, el factor de ocupación se reduce a :

$$f_T(x) = \frac{n(x) + R p_T}{n(x) + n_T + R p_T + R p(x)} \quad (31)$$



donde  $R$  es el cociente entre el coeficiente de captura de huecos y electrones,  $R=c_p/c_n$ , y  $n_T$  y  $p_T$  satisfacen las relaciones:  $e_n=n_T \cdot c_n$  y  $e_p=p_T \cdot c_p$ .

Para regímenes transitorios habría que resolver la ecuación (30), donde se debe tener en cuenta la dependencia implícita de la concentración de portadores libres con el tiempo. Si se integra entre  $t-\Delta t$  y  $t$  y se supone el incremento de tiempo suficientemente pequeño como para considerar constantes la población de electrones y huecos, el resultado de dicha operación sería:

$$f_T(x,t) = \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} + \left[ f_T(x,t-\Delta t) - \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} \right] e^{-(n c_n + p c_p + e_n + e_p) \Delta t} \quad (32)$$

Para el caso particular de un transitorio debido a la emisión de electrones el factor de ocupación puede escribirse:

$$f_T(x,t) = \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} + \left[ f_T(x,t-\Delta t) - \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} \right] e^{-e_n \left( \frac{n}{n_T} + \frac{p}{n_T} + \frac{p_T}{n_T} + 1 \right) \Delta t} \quad (33)$$

y si es debido a la emisión de huecos se transforma en:

$$f_T(x,t) = \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} + \left[ f_T(x,t-\Delta t) - \frac{n(x,t-\Delta t) + R p_T}{n(x,t-\Delta t) + R p(x,t-\Delta t) + n_T + R p_T} \right] e^{-e_p \left( \frac{n}{p_T} + \frac{p}{p_T} + \frac{n_T}{p_T} + 1 \right) \Delta t} \quad (34)$$

## PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO DE LA CAPACIDAD EN ALTA FRECUENCIA

Según se obtuvo en el capítulo (1) el valor de la capacidad en alta frecuencia para una tensión inversa de polarización procede de la evaluación de la siguiente integral:

$$C = - \int_0^{w_n} \beta q n_0 y \, dx \quad (35)$$

a) En primer lugar hay que calcular  $y(x)$  a partir de la ecuación diferencial:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = - \frac{q}{\epsilon_s} \beta (-p_0 + n_0) y + p_0 \quad (36)$$

con las condiciones de contorno  $y(W_n)=0$  ,  $y(-W_p)=1$ .

La resolución de esta ecuación diferencial se hará por métodos numéricos, aunque no necesita de un proceso iterativo ya que es lineal, siguiéndose los pasos siguientes:

a1) Condiciones iniciales. Inicialización de  $y$ :

$$y(-W_p) = 1 \quad \text{en el contacto de la región P}$$

$$y(+W_n) = 0 \quad \text{en el contacto de la región N}$$

a2) Resolución de la ecuación diferencial (30) mediante el método de Newton. Al igual que se hizo para la ecuación de Poisson, pero en aquel caso, ecuación diferencial de segundo grado no lineal, se llegó a una expresión matricial:

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{y}) = \mathbf{B} f(\mathbf{y}) + \mathbf{b} \quad (37)$$

Como en este caso la función  $f(\Phi)$  es lineal de la forma :

$$f(y_j) = M_j \cdot y_j + K_j \quad (38)$$

donde  $M_j$  y  $K_j$  son constantes, podemos expresar (37) como:

$$(A - B') \cdot (y) = (b') \quad (39)$$

con

$$(B') = (B) \cdot (\delta_{ij} M_j) \quad (40)$$

$$(b') = (b) + (K) \quad (41)$$

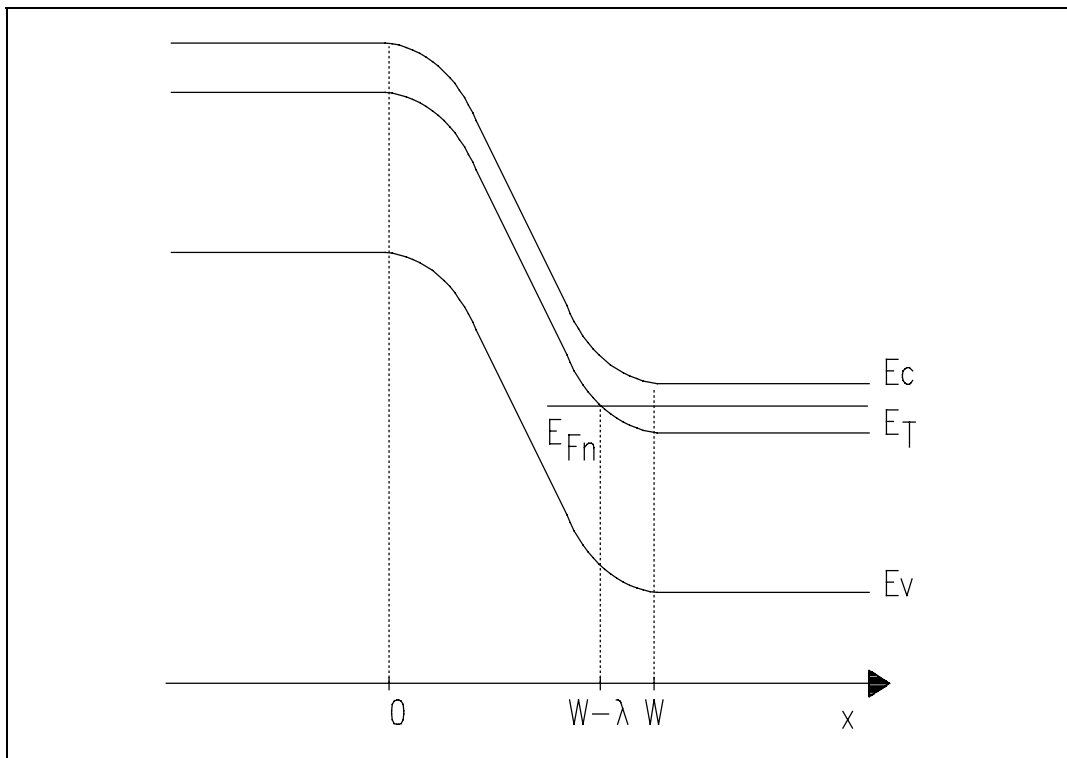
de donde se obtiene un número de ecuaciones igual al número de puntos donde queremos calcular el potencial.

b) Para el cálculo de la capacidad no se ha tenido en cuenta la aproximación de vaciamiento pues se integra en toda la región N; a pesar de no hacer esta aproximación, la expresión de la capacidad tiene una forma bastante simple (35). Al depender solo de la concentración de electrones se podría extender la integral a través de toda la muestra, pues  $n(x) = 0$  para  $x < 0$ .



## APÉNDICE 2. MÉTODO DE CAPACIDAD CONSTANTE

Consideremos una unión gradual. La zona de carga espacial se reparte a ambos lados de la unión. Supongamos que en la región N de la unión tenemos un nivel profundo situado a una energía  $E_a$ , con una concentración  $N_T(x)$  y de carácter



**Figura 1.** Diagrama de bandas de una unión PN polarizada en inverso con un centro profundo aceptador.

aceptador (figura 1).

La zona de carga espacial se extiende desde  $x=0$  a  $x=W$ . La concentración de impurezas básicas es  $N(x) = N_D - N_A$ . El caso de la región P y centros profundos donadores es similar sin más que cambiar electrones por huecos. En general se considera que bajo estado estacionario los centros están cargados negativamente en el intervalo  $W - \lambda < x < W$  y neutros para  $x < W - \lambda$  donde  $W - \lambda$  es el punto en el que el cuasinivel de Fermi de los electrones coincide con el nivel energético creado por los centros profundos

en la banda prohibida.

Suponiendo válida la aproximación de depleción se puede relacionar la tensión total con el ancho de la zona de carga espacial mediante la integración de la ecuación de Poisson:

$$V_g + V_0 = \frac{q}{\epsilon_s} \int_0^W xN(x) dx - \frac{q}{\epsilon_s} \int_{W-\lambda}^W xN_T dx \quad (1)$$

donde se ha supuesto que todas las impurezas están ionizadas entre  $W-\lambda$  y  $W$ :  $N_T^- = N_T$ .

Partiendo del diodo en estado estacionario, lo cortocircuitamos durante un corto espacio de tiempo  $-\tau < t < 0$ . Después de ese intervalo se aplica una nueva tensión inversa de manera que se obtenga de nuevo el valor de la capacidad original y por lo tanto la misma anchura de la zona de carga espacial que en el estado estacionario previo.

Durante el periodo de tiempo en el que se cortocircuita el diodo la anchura de la zona de carga espacial se reduce a un valor  $W_s$ , y los centros comprendidos en la región  $W_s < x < W-\lambda$  pueden capturar un electrón, que puede ser emitido después de que de nuevo se polarice en inverso a la unión. Esa relajación hacia el reposo se describe mediante la cinética de Shockley-Read-Hall (S-H-R) :

$$\frac{dN_T^-}{dt} = c_n n (N_T - N_T^-) - e_n N_T^- \quad (2)$$

donde  $c_n$  es el coeficiente captura de electrones y  $e_n$  el coeficiente de emisión de electrones.

En la región  $W_s < x < W-\lambda$  tenemos tres situaciones:

$$\begin{aligned}
a) \quad t \leq -\tau \quad N_T^-(x) &= 0 \\
b) \quad -\tau \leq t \leq 0 \quad c_n n &\gg e_n \\
c) \quad t > 0 \quad c_n n &\ll e_n
\end{aligned} \tag{3}$$

La condición (b) se cumple siempre que estemos a temperaturas suficientemente bajas como para que el coeficiente de emisión  $e_n$  sea muy pequeño.

La condición (c) se cumple siempre ya que la concentración de electrones en la zona de deplexión es muy pequeña.

Con estas condiciones podemos resolver la ecuación (2):

$$N_T^-(t, \tau) = (1 - e^{-c_n n \tau}) e^{-e_n t} \quad \begin{matrix} t > 0 \\ W_s < x < W - \lambda \end{matrix} \tag{4}$$

Para  $t > 0$  se debe polarizar en inverso a la muestra de manera que  $W$  sea igual a su valor original, dado por la ecuación (1). La diferencia entre esta tensión y el valor estacionario original  $V_0$  se puede ver que es:

$$\Delta V_0(t, \tau) = \frac{q}{\epsilon_s} \int_{W_s}^{W-\lambda} x N_T^- (1 - e^{-c_n n t}) e^{-e_n t} dx \tag{5}$$

La ecuación (5) nos permite determinar  $c_n n$  y  $e_n$  midiendo la dependencia de  $\Delta V_0$  con  $\tau$  y con  $t$ . Debido al principio de equilibrio microscópico que nos dice que en equilibrio térmico el número de electrones capturados por el centro iguala al de emitidos hacia la banda de conducción, se puede llegar a una relación entre el coeficiente de emisión y captura:

$$e_n = g_n c_n N_c e^{\frac{E_T - E_c}{KT}} \tag{6}$$

donde la densidad efectiva de estados en la banda de conducción,  $N_c$ , es proporcional a  $T^{3/2}$ .

La constante de captura se expresa generalmente como el producto de la sección eficaz de captura por la velocidad térmica que es proporcional a  $T^{1/2}$ :

$$c_n = \sigma_n v_{th} \quad (7)$$

Por lo tanto tenemos que

$$\frac{e_n}{T^2} = A e^{\frac{E_T - E_c}{KT}} \quad (8)$$

donde A es independiente de la temperatura salvo una posible dependencia de la sección eficaz de captura  $\sigma_n$ .

Midiendo  $e_n$  en función de T, la energía de activación térmica se puede determinar con el uso de la ecuación (8) bajo la consideración de que  $\sigma_n$  es independiente de la temperatura.

La ventaja de usar un valor de capacidad constante durante la medida ( $t > 0$ ) se demuestra claramente en la ecuación (5) donde se ve que  $\Delta V_0$  tiene una dependencia exponencial simple tanto respecto de t como de  $\tau$ . Si durante la medida,  $V_0$  se mantiene constante y se mide el cambio de la capacidad, no existe una relación tan simple como la anterior. Se encontraría una relación simple para el caso que la concentración de centros profundos sea pequeña respecto a la concentración de impurezas donadoras y el cambio en la tensión aplicada también sea pequeño, mientras que la ecuación (5) es válida también para grandes cambios en la tensión. Esto es debido básicamente al hecho de que con la técnica de capacidad constante mantenemos un volumen constante de la zona de carga espacial durante las medidas y consecuentemente un número constante de centros profundos, mientras que con una tensión inversa



constante este volumen cambia durante la medida.

La base sobre la que se sustentan estas técnicas es la aproximación de vaciamiento con la cual se encuentra una relación entre el potencial total y el ancho de la zona de carga espacial. Para una unión gradual, debido a los gradientes de concentración, el potencial se distribuye en toda la unión y no de forma exclusiva en la región de transición. Sin embargo, se encuentran muchas variaciones de esta aproximación: potencial barrera en la unión abrupta, potencial gradiente en la unión lineal [24], aproximación de vaciamiento en la unión exponencial [26].

La limitación de esta técnica la impone la existencia de un bloqueo interno de la zona de carga espacial que se superpone al externo, forzado este último por la aplicación de una tensión variable a la unión. La pregunta es cómo debe responder esa tensión externa si existe ya un mecanismo interno que provoca que una parte de la zona de transición esté fija. La imposibilidad de encontrar expresiones analíticas generales para este tipo de uniones hace que su solución se obtenga a partir de un tratamiento numérico. Estos fenómenos existen: los mostraremos en los capítulos experimentales y los explicaremos gracias a un estudio teórico.



### APÉNDICE 3. ANÁLISIS ISOTÉRMICO DE TRANSITORIOS, ITS.

Sea una señal exponencial decreciente

$$S(t) = A e^{-\frac{t}{\tau}} + B \quad (1)$$

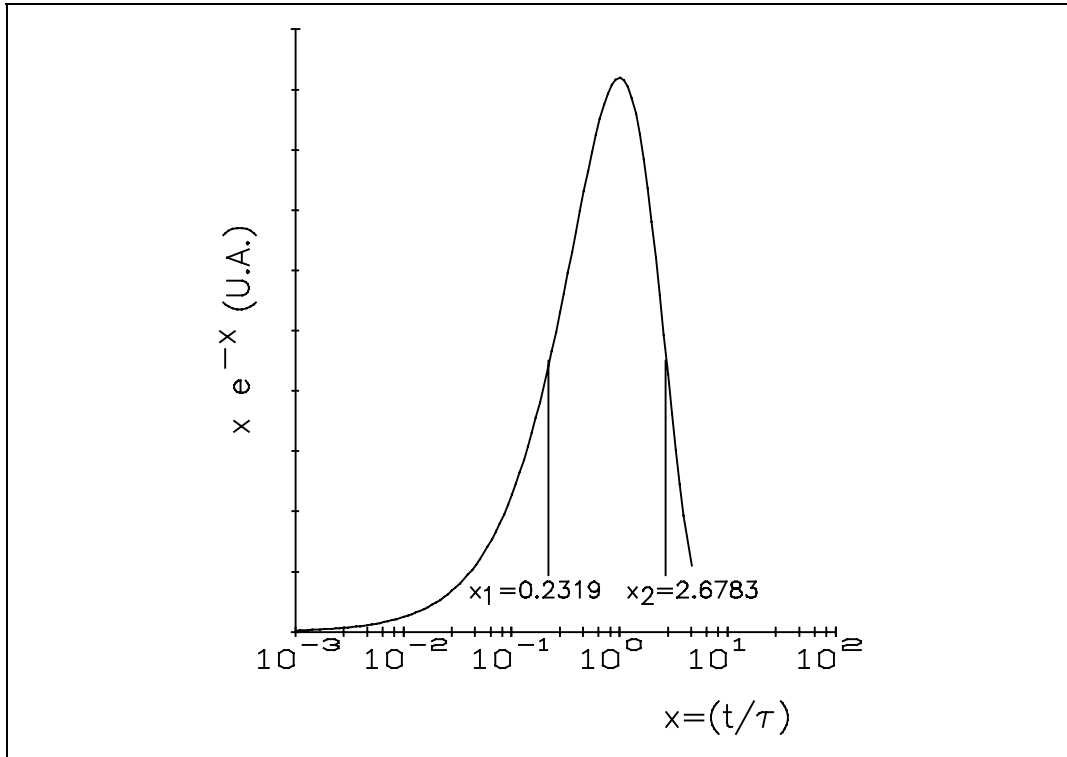
si derivamos esta función respecto al logaritmo del tiempo se obtiene una nueva señal  $S'(t)$ , que llamaremos señal ITS:

$$S'(t) = \frac{dS(t)}{d \ln t} \quad (2)$$

$$S'(t) = -A \frac{t}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3)$$

La función  $S'$  presenta un máximo para  $t = \tau$ , tomando dicha función un valor:  $S'_{\max}(t=\tau) = A/e$ . Para tiempos menores a la constante de tiempo, la función  $S'$  viene gobernada por el término lineal que aumenta más rápidamente de lo que disminuye el término exponencial. Para tiempos del orden de  $\tau$ , es el término exponencial quien domina la función  $S$  y esta tenderá rápidamente a cero.

La señal ITS no es completamente simétrica en torno al máximo como se observa en la figura 1. Así los valores a media altura corresponden a  $t_1/\tau = 0.231961$  y  $t_2/\tau = 2.67834$ . Sin embargo la anchura de los picos, tomando la escala de tiempos de forma logarítmica se mantiene constante, independientemente de cual sea el valor de  $\tau$ . Estas características son muy importantes pues permiten observar si el transitorio es exponencial o no.



*Figura 1. Señal ITS de una función exponencial.*

## CÁLCULO DE LA ITS MEDIANTE UNA SEÑAL DE CORRELACIÓN

El cálculo de la derivada de una función no analítica, que ha sido muestreada experimentalmente presenta varios inconvenientes. El ruido existente en la señal muestreada es amplificado al proceder a la derivada por métodos numéricos, convirtiéndose esta en una operación imprecisa y en una fuente de error relativamente importante.

Para resolver este problema consideramos una señal espectroscópica que llamaremos señal ITS,  $Y(t)$ , definida a partir de la señal muestreada  $S(t)$ .

$$Y(t) = \frac{S(t_1) - S(t_2)}{\ln r} \quad (4)$$

$$t = \sqrt{t_1 t_2} \quad (5)$$

$$r = \frac{t_2}{t_1} \quad (6)$$

tomando los valores de tiempo  $t_1$  y  $t_2$  que cumplan  $t_2/t_1 = r$ , siendo  $r$  una constante arbitraria mayor que 1.

En el caso de una señal exponencial de la forma:

$$S(t) = A_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} \quad (7)$$

la señal ITS será

$$Y(t) = \frac{A_i e^{-\frac{tr^{-\frac{1}{2}}}{\tau_i}} - A_i e^{-\frac{tr^{\frac{1}{2}}}{\tau_i}}}{\ln r} \quad (8)$$

si la constante  $r \rightarrow 1$  aplicando la regla de L'Hopital obtenemos:

$$\lim_{r \rightarrow 1} Y(t) = A_i \frac{t}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}} = \frac{dS(t)}{d \ln t} \quad (9)$$

La señal espectroscópica definida en la expresión (8) presenta un máximo cuando:

$$\left(\frac{t}{\tau_i}\right)_{\max} = \frac{\sqrt{r} \ln r}{r-1} \quad (10)$$

con un valor de amplitud igual a

$$Y_{\max} = |A_i| \left| \frac{r-1}{\ln r} r^{-\frac{r}{r-1}} \right| \quad (11)$$

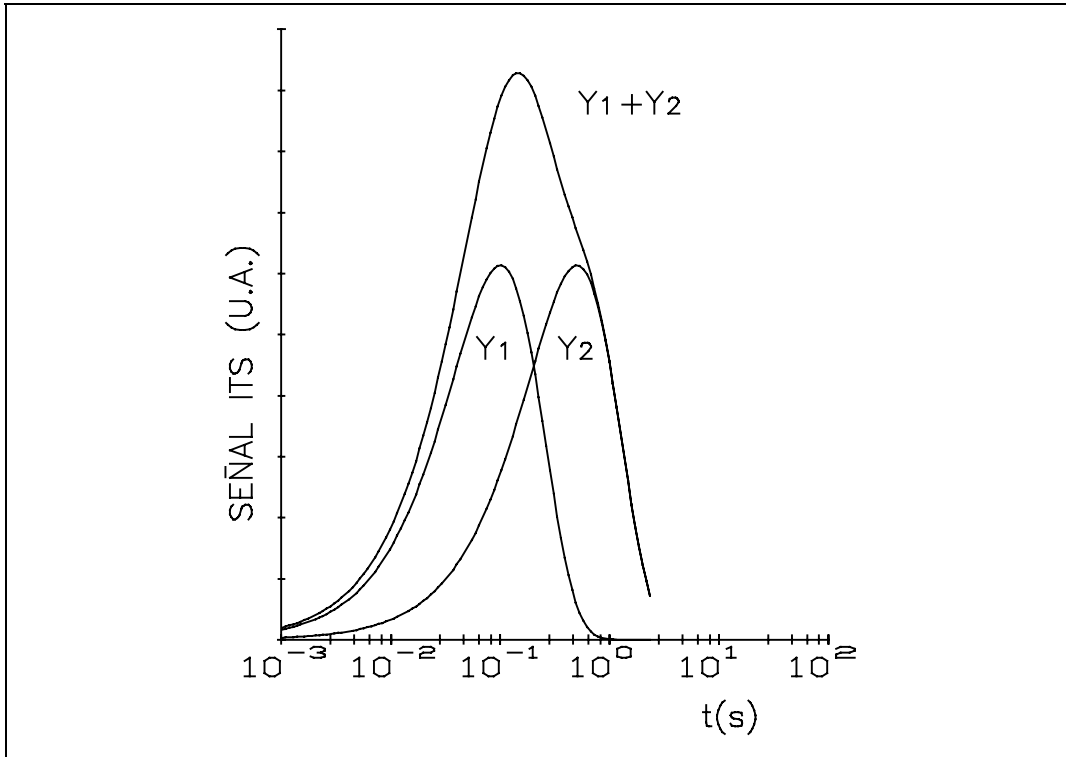
La máxima resolución se obtendría para  $r \rightarrow 1$  pero en este caso el ruido aumentaría considerablemente; aunque se puede aumentar la relación señal ruido incrementando el valor de  $r$  pero se ensanchan los picos perdiendo en resolución. Experimentalmente se comprueba que un buen valor para  $r$  es  $r=2$ , en cuyo caso el máximo se obtiene para  $t = 0.9803 \tau$  y la anchura a mitad de altura es  $\sigma = 2.4928 \tau$ .

## SEPARACIÓN DE LOS PICOS ITS

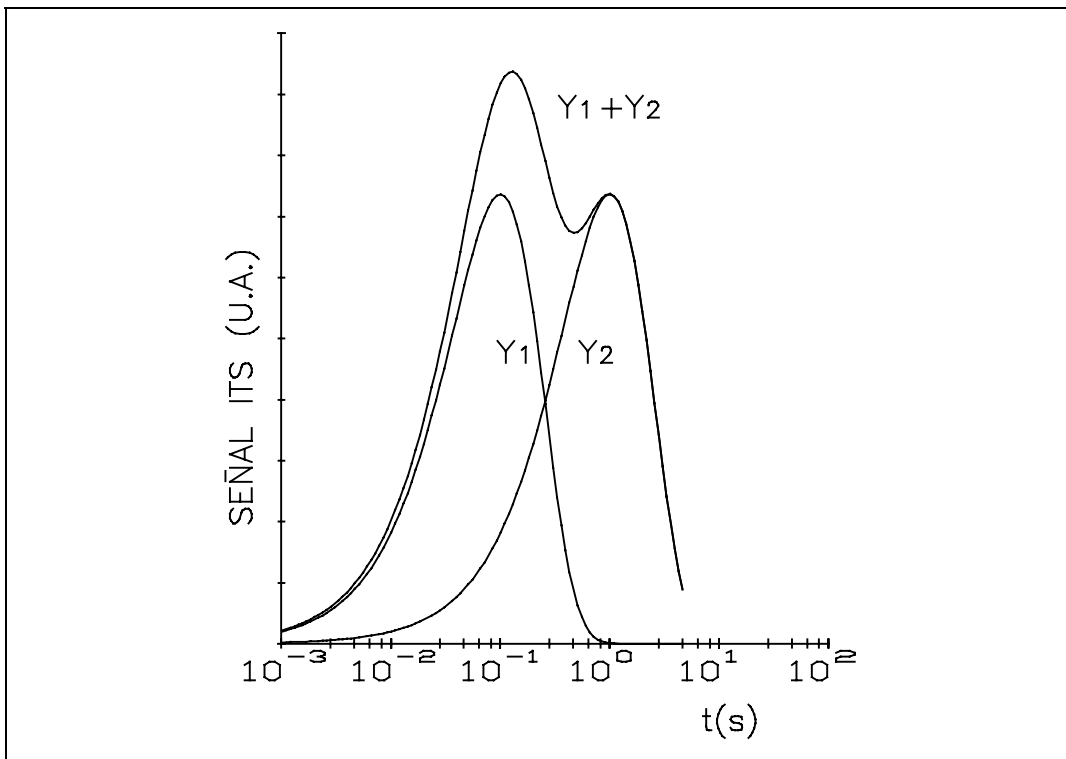
Si la señal de ITS está formada por la suma de diferentes contribuciones y si estas son exponenciales y con constantes de tiempo suficientemente distantes, la posición de los máximos así como la amplitud de los mismos no se verá distorsionada. En caso contrario deberemos de encontrar el valor de los parámetros de los términos exponenciales, que mejor ajusten la señal de ITS. Al añadir a la técnica ITS un método de ajuste, aumentaremos de forma considerable su potencia de resolución, así como la fiabilidad y precisión de los resultados obtenidos ya que en vez de utilizar la posición del máximo y su amplitud, utilizamos todos los valores muestreados. El método de ajuste utilizado ha sido el de regresión por mínimos cuadrados.

En las figuras 2-5 se muestran los espectros ITS correspondientes a una señal suma de dos exponenciales de igual amplitud y de diferentes constantes de tiempo:

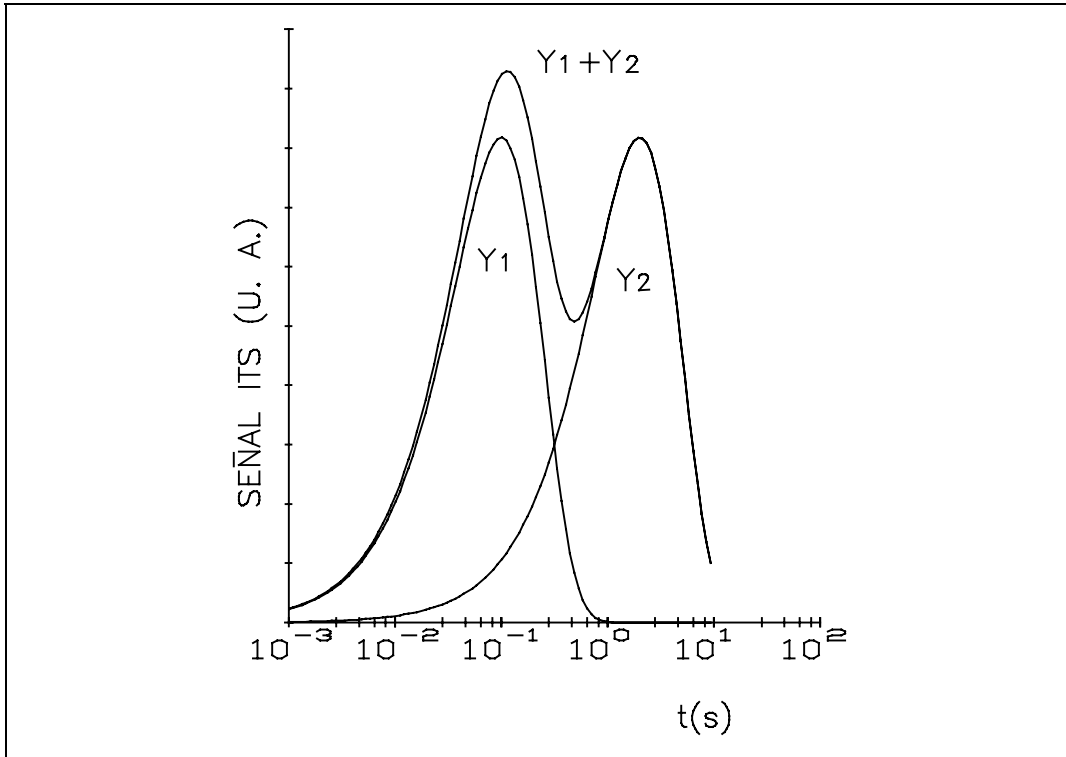
$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{t}{\tau_1} e^{-\frac{t}{\tau_1}} + \frac{t}{\tau_2} e^{-\frac{t}{\tau_2}} \quad (12)$$



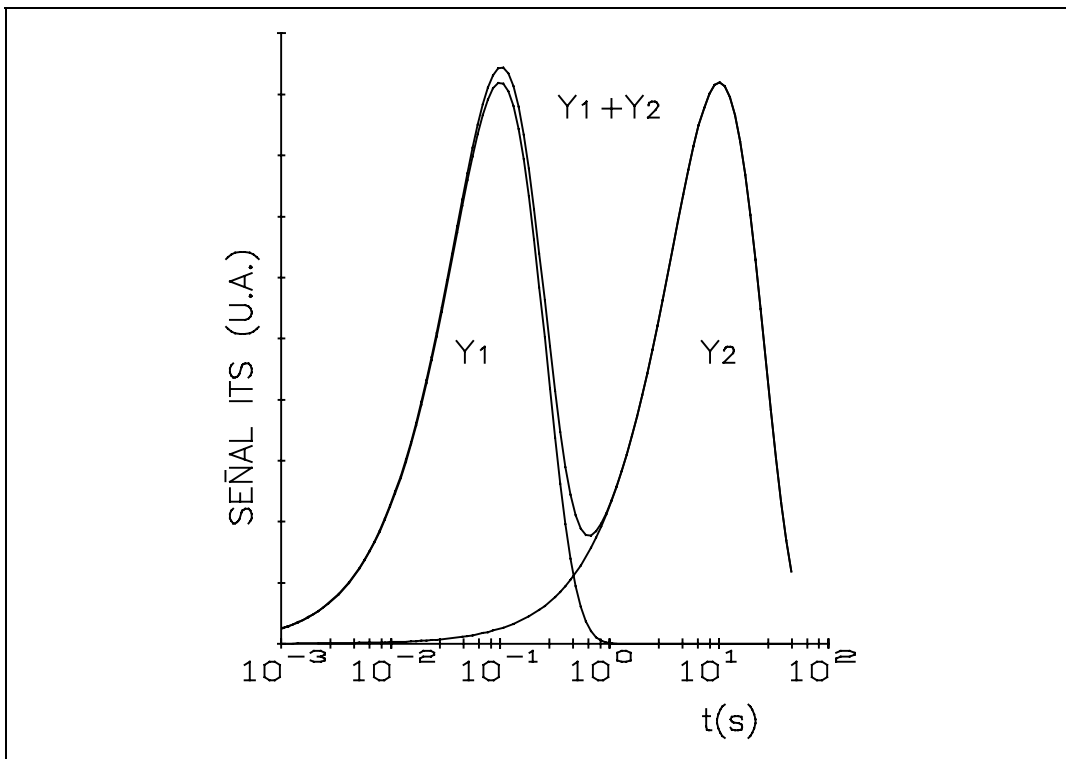
**Figura 2.** Espectro de ITS de una señal combinación de dos exponenciales. Relación de constantes de tiempo  $k=5$ .



**Figura 3.** Espectro de ITS de una señal combinación de dos exponenciales. Relación de constantes de tiempo  $k=10$ .



**Figura 4.** Espectro de ITS de una señal combinación de dos exponenciales. Relación de constantes de tiempo  $k=20$ .



**Figura 5.** Espectro de ITS de una señal combinación de dos exponenciales. Relación de constantes de tiempo  $k=100$ .



con  $\tau_2 = \tau_1 \cdot k$  y  $\tau_1 = 0.1$  s. En las mismas figuras están superpuestas los espectros ITS correspondientes a cada una de las exponenciales por separado.

Se han dado valores de  $k$  de 5, 10, 20 y 100 pudiéndose observar como para  $k=5$  se obtiene un solo pico. Conforme aumenta  $k$  aparecen dos picos correspondientes a cada una de las exponenciales.

Solo si la diferencia de constantes de tiempo es grande, podemos separar los efectos de cada una de las exponenciales, es decir, cada pico se puede estudiar por separado, obteniendo la constante de tiempo correspondiente. Como se ha estudiado antes, la anchura a mitad de altura debe cumplir unas determinadas condiciones para que el proceso sea el reflejo de una señal exponencial pura.

Por otro lado los transitorios de relajación al equilibrio pueden presentar comportamientos no exponenciales debido a múltiples causas como:

- Concentración de trampas elevada
- Dependencia con el campo eléctrico de los parámetros de emisión y captura.
- Efectos de borde de la zona de carga espacial.
- Inhomogeneidades en la estequiometría de semiconductores compuestos.
- Interacción entre defectos.

Mediante la técnica ITS podemos determinar fácilmente si el transitorio es no exponencial, permitiendo obtener además una medida de la importancia de la misma, mediante la diferencia de áreas entre los espectros experimentales y la simulación teórica.



## BIBLIOGRAFIA

- 001.- SAH C.T., Solid State Electron. **19**, 975 (1976)
- 002.- LANG D.V., J. Appl. Phys, **45**, 3023 (1974)
- 003.- GRIMMEIS H.G., Ann. Rev. Mater Sci. **7**, 341 (1977)
- 004.- MILLER G.L., LANG D.V. y KIMMERLING L.C. , Ann. Rev. Mater Sci. **7**, 377 (1977)
- 005.- SAH C.T., ROSIER L.L. Y TASCH A.F., Solid-State Electron., **13**, 759 (1970)
- 006.- PALS J.A., Solid-State Electron. **17**, 1139 (1974).
- 007.- PHILIPS W.E. y LOWNEY J.R., J. Appl. Phys. **54**, 2786 (1983)
- 008.- WANG A.C. y SAH C.T., J. Appl. Phys. **55**, 565 (1983)
- 009.- HILIBRAND J. y GOLD R.D., RCA rev., **21**, 245 (1960)
- 010.- BACCARANI G., RUDAN M., SPADINI G., MAEST H., VANDERVORST W. y Van OVERSTRAETEN R., Solid State Electron. **23**, 65 (1979)
- 011.- SCHOCKLEY W., Bell Syst. Tech J., **28**, 435 (1949)
- 012.- GROVE A.S. "Physics and Technology os Semiconductor Devices" New York: Wiley (1967)
- 013.- SZE S.M., "Physics of Semiconductor Devices", John Wiley & sons, New York, (1981)
- 014.- GHANDHI S.K. "Theory and Practise of Microelectronics" New York: Wiley (1968)
- 015.- MORGAN S.P.y SMITS F.M., Bell Syst. Tech. J., **39**, 1573 (1960)
- 016.- MOCK M.S., "Analysis of Mathematical Models of Semiconductor Devices" Boole, Dublín (1983)
- 017.- KURATA M., "Numerical Analysis for Semiconductor Devices" Heath, Toronto (1984)
- 018.- MAYERGOYZ I.D., J.Appl. Phys. **59**, 195 (1986)
- 019.- JINDAL C. Y PANAYOTATOS P., IEEE Trans. Electron Devices, **ED-18**, 8 (1987)
- 020.- JINDAL C. Y PANAYOTATOS P., Solid-State Electron. **31**, 5 (1988)
- 021.- KOTESWARA RAO K.S.R., KUMAR V., PREMACHANDRAN S.K. y RAGHUNATH K.P., J. Appl. Phys. **69**, 2714 (1991)
- 022.- SILARD A.P. y DUTA M.J., Solid State Electron. **34**, 167 (1991)
- 023.- NUYTS W. y VAN OVERSTRAETEN R.J., Electron Lett., **5**, 54 (1969)
- 024.- CHAWLA B.R. Y GUMMEL H.K., IEEE Trans. Electron Devices, **ED-18**, 3 (1971)
- 025.- CRANK J., The Mathematics of Diffusion. Oxford. Clarendon, (1976).
- 026.- PIMBLEY J.M., IEEE Trans. Electron Devices, **ED-35**, 11 (1988)
- 027.- GUMMEL H.K., IEEE Trans. Electron Devices, **ED-11**, 455 (1964)
- 028.- DE MARI A., Solid-State Electron. **11**, 33 (1968).

- 029.- CHANG Y.F., Solid-State Electron. **107**, 281 (1967).
- 030.- KLOPFENSTEIN R.W. Y CHUNG P. WU, IEEE Trans. electron Devices, **ED-22**, 329 (1975).
- 031.- LOPEZ-VILLANUEVA J.A., JIMENEZ-TEJADA J.A., P. CARTUJO, J.R. MORANTE y J.E. CARCELLER, Solid State Electron. **33**, 805, (1990)
- 032.- JIMENEZ-TEJADA J.A., LOPEZ-VILLANUEVA J.A., P. CARTUJO, J.E. CARCELLER, Monografías del Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores. Granada (1990)
- 033.- JIMENEZ-TEJADA J.A., LOPEZ-VILLANUEVA J.A., P. CARTUJO, J.E. CARCELLER, Actas "Trobades Científiques de la Mediterranea" Barcelona (1991)
- 034.- WOODBURY H.H. Y LUDWIG G.W., Phys. Rev. **126**, 466 (1962).
- 035.- ZIBUTS Y.A., PARITSKII L.G. Y RYVKIN S.M., Sov. Phys.:Solid State, **5**, 2416 (1963).
- 036.- CARCHANO H. Y JUND C., Solid-State Electron. **13**, 83 (1970)
- 037.- CONTI M. Y PANCHIERI A.,alta Freq. **XL**, 544 (1970)
- 038.- GLINCHUK J.D. Y LITOVCHENKO N.M., Sov. Phys.Solid-State, **6**, 2963 (1965).
- 039.- CHARLOT J.J. Y VAPAILLE A., C.R. Acad. Sci. (Paris) **273**, 1027 (1971); **270**, 1488 (1970).
- 040.- AZIMOV S.A., ISLAMOV L.I. Y SULTANOV N.A., Sov. Phys. Semicond., **8**, 758 (1974).
- 041.- LISIAK K.P. Y MILNES A.G., J. Appl. Phys. **46**, 5229 (1975).
- 042.- EVWARAYE A.O., J. Appl. Phys. **47**, 3172 (1976).
- 043.- MILLER M.D., SCHADE H. Y NUESE C.J., J.Appl.Phys.,**47**, 2569 (1976)
- 044.- PUGNET M., BARBOLLA J., BRABANT J.C., SAINT-YVES F. Y BROUSSEAU M., Phys. Status Solidi, **35**, 533 (1976).
- 045.- LEBEDEV A.A. Y AKHMEDOVA M.M., Sov. Phys. Semiconductors, **9**, 92 (1975).
- 046.- AKHMEDOVAA M.M., LEBEDEV A.A. Y MAKHKAMOV S.H., Sov. Phys. Semiconductors, **9**, 861 (1976).
- 047.- CARCELLER J.E., CARTUJO P., MORANTE J.R.,BARBOLLA J.,BRABANT J.C., BROUSSEAU M., Reveu Physique Applique, **15**, 843 (1980).
- 048.- BRAUN S. Y GRIMMEISS H.G., J. Appl. Phys. **48**, 9, 3883 (1977).
- 049.- BROTHERTON S.D., BRADLEY P. Y BICKNELL J., J. Appl. Phys. **50**, (5), 3396 (1979).
- 050.- KWON Y.K., ISHIKAWA T. Y KUWANO H., J. Appl. Phys. **61** (3), 1055 (1987)
- 051.- THURBER W.R. Y LONEY J.R., J. Appl. Phys. **62** (2), 534 (1987).
- 052.- DI ZITTI E., G.M. BISIO, P.G. FUOCHI, B.V. PASSERINI y M. ZAMBELLI, J. Appl. Phys. **66** (3) (1989)
- 053.- GOTO G., YANAGISAWA S., WADA O. y TAKANASHI H.,Appl. Phys. Letts., **23**, 150 (1973)

- 054.- JOHNSON N. M., BARTELINK D. J., GOLD R.B. y GIBBONS J.F., J.Appl. Phys., **50**, 4828 (1979)
- 055.- OKUSHI H. y TOKUMARU Y., J.Appl. Phys., **19**, L335 (1980)
- 056.- SAMITIER J., Tesis doctoral, Universidad de Barcelona (1986)
- 057.- COLA A., LUPO M.G. y VASANELLI, J.Appl. Phys. **69**, 3072 (1991)
- 058.- SHOTTKY W., Z. Phys. **118**, 539 (1942)
- 059.- LIOU J.J. y LINDHOLM F.A. Proc. IEEE **76**, 1406 (1988)
- 060.- VAN MIEGHEN P., MERTENS R.P. y VAN OVERSTRAETEN R.J., J. Appl. Phys. **67**, 4203 (1990)
- 061.- Mc GILLIVRAY I.G., ROBERTSON J.M. y WALTON A.J., IEEE trans. Electron Devices **ED-35**, 174 (1988)
- 062.- HU S.M., J. Appl. Phys. **53**, 1499 (1982)
- 063.- JOHNSON W.C. Y PANOUSIS P.T., IEEE Trans. Electron Devices, **ED-18**, 956 (1971)
- 064.- GLOVER G.H., y TANTRAPORN W., J. Appl. Phys. **46**, 867 (1972)
- 065.- KENNEDY O.P. y O'BRIEN R.R., IBM J. Res. Develop., 252 (1967)
- 066.- BARTELINK D.J., IEEE Trans. Electron Devices **ED-26**, 1831 (1979)
- 067.- WILSON C.L., IEEE Trans. Electron Devices **ED-27**, 2262 (1980)
- 068.- BLACKSIN J.M., IEEE Trans. Electron Devices **ED-33**, 1387 (1986)
- 069.- OUWERLING G.J.L., Solid State Electron., **34**, 197 (1991)
- 070.- ANDERSON G.I. y ENGSTROM D., J.Appl. Phys. **67**, 3500 (1990)
- 071.- KHAN W.I., Solid State Electron. **30**, 1221 (1987)
- 072.- YEO Y.K., GAINER G.H., KIM J.H. y HENGHELD R.L., Appl. Phys. Lett. **56**, 75 (1990)
- 073.- GOODWIN-JOHANSON S.H., SUBRAHMANYAN R., FLOYD C.E. y MASSOUD H.Z., IEEE Trans. Comput. Aided Design, **CAD-8**, 323 (1989)
- 074.- KORDIC S., van LOENEN E.J., DIKJAMP D., HOEVEN A.J. y MORAAL H.K., J. Vac. Sci. Tech. **A8**, 549 (1990)
- 075.- KYUNG C.M. Electron Lett., **21**, 587 (1985)
- 076.- HILL C., PEARSON P.J., LEWIS B., HOLDEN A.J. y ALLEN R.W., Proc 17<sup>th</sup> Eur. Solid St. Devices Res. Conf. (ESSDERC-87) Bolonia (Editado por SONCINI G. y CALZOLARI P.V.) Amsterdam (1988)
- 077.- GODFREY D.J., GEC J. Res. **4**, 57 (1986)
- 078.- SUBRAHMANYAN R., MASSOUD H.Z. y FAIR R.B., Appl. Phys. Lett. **52**, 2145 (1988)

- 079.- FURUKAWA S. y MATSUMURA H., J. Appl. Phys. **22**, 97 (1973)
- 080.- VAN SHIE E., HIDDELHOEK J. y ZALM P., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., **B42**, 109 (1989)
- 081.- BATES R.H.T., GARDEN K.L. y PETERS T.M., Proc IEEE **71**, 356 (1983)
- 082.- COEN S. y WANG-HO YU M., Geophysics **46**, 1702 (1981)
- 083.- DOGANIS K. y SCHARFETTER D.L., IEEE Trans. Electron Devices **ED-30**, 1219 (1983)
- 084.- SELBERHERR S., "Analysis and simulation of semiconductor devices", Springer-Verlag , Wien New York, (1984)
- 085.- DUTTON R.W., HANSEN S.E. Proc. IEEE **69**, 1305 (1981)
- 086.- ANTONIADIS D.A y R.W. DUTTON, IEEE J. Solid State Circuits **SC-14**, 2, 412 (1979)
- 087.- ANTONIADIS D.A, S.E. HANSEN y R.W. DUTTON, SUPREM-II-a program for IC Process Modeling and Simulation. Report 5019-2, Standford University (1978).
- 088.- ANTHONY P.J., Solid-State Electronics **25**, 10, 1003 (1983)
- 089.- MULLER R.S. y T.I. KAMINS, "Device Electronics for Integrated Circuits", John Wiley & sons, (1986)
- 090.- Emulsitone Notes, Platinum Film, Emulsitone Co., Milburn, New Yersey (1973)
- 091.- BALIGA B.J., Solid-State Electron. **21**, 1033 (1978)
- 092.- BROTHERTON S.D. Y BRADLEY P., Solid-State Electron. **25**, 119 (1982)
- 093.- BAILEY R.F. y T.G. MILLS, Electrochemical Society Meeting, New York, Semiconductor Silicon, 481 (1969)
- 094.- SMITH P.C. y A.G. MILNES, J.Electrochem. Soc. **117**, 260C (1970)
- 095.- AMMERLAAN C.A.J. y VAN OOSTEN A.B., Phys. Scr. **T25**, 342 (1989)
- 096.- PETERSEN J.W. y NIELSEN J., Appl. Phys. Lett. **56**, 1122 (1990)
- 097.- OLAJOS J.,KLEVERMAN M. y GRIMMEIS H.G., Phys. Rev. B **40**, 6196 (1989)
- 098.- BODAERT X., D. DERESMES, D.STIEVENARD y J.C. BOURGOIN, J.Appl.Phys. **65** 12, (1989)
- 099.- ZOHTA Y. y WATANABE M.O. J.Appl. **53**, Phys. 1809 (1982)
- 100.- MORANTE J.R., SAMITIER J., CORNET A., HERMS A. y CARTUJO P., J. Appl. Phys. **59**, 1562 (1986)
- 101.- LANDSBERG P.T. y SHABAN E.H. J. Appl. Phys. **61**, 5055 (1987)
- 102.- ZHAO J.H., LEE J., FANG Z.Q., SCHLESINGER T.E. y MILNES A.G., J. Appl. Phys. **61**, 565 (1987)
- 103.- TASH A.F., SAH C.T., Phys. Rev. B **1**, 800 (1984)
- 104.- LI G.P. y WANG K.L., Appl. Phys. Lett. **42**, 838 (1983)

- 105.- CHANG M.B., TOMOKAGE H., SHIAN J.J., BUBE R.H. y BRAUMAN J.C., J. Appl. Phys **65**, 2734 (1989)
- 106.- HANAK T.R., AHRENKIEL R.K., DUNLAVY D.J., BAKRY A.M. y TIMMONS M.L., J. Appl. Phys. **67**, 4126 (1990)
- 107.- SVENSSON B.G., RYDEN K.H. y LEWERENTZ B.M.S., J. Appl. Phys. **66**, 1699 (1989)
- 108.- MARTIN G.M. y S. MAKKREIM-EBEID, "Deep Centers in Semiconductor", Gordon & Breach, New York. 399 (1986)
- 109.- BOURGOIN J.C. y A. MAUGER, Appl. Phys. Lett. **53**, 749, (1988)
- 110.- PONS D., J. Appl. Phys. **55**, 3644 (1984)
- 111.- STIEVENARD D., LANOO M. y BOURGOIN J.C., Solid State Electron. **51**, 2038 (1980)
- 112.- LEBEDEV A.A., SOBOLEV N.A. y URUNBAEV B.M., Sov. Phys. Semicond. **15**, 880 (1981)
- 113.- KLEVERMAN M., OLAJOS J. y GRIMMEIS H.G., Phys. Rev. B **37**, 2613 (1988)
- 114.- ARMELLES G., BARRAU J., BROUSSEAU M. y NOGUIER J.P., Phys. Rev. B **33**, 1243 (1986)
- 115.- ARMELLES G., BARRAU J., BROUSSEAU M., PAJOT B. y NAUD C., Solid State Commun. **56**, 303 (1985)
- 116.- JAGADESH-KUMAR M., SELVAKUMAR C.R., RAMAMURTHY V. y BHAT N., Phys. Status Solidi **A87**, 651 (1985)
- 117.- GILL A.A., BABER N. y ZAFAR IQBAL M., J. Appl. Phys. **67**, 1130 (1990)
- 118.- GREEN M.A., J. Appl. Phys. **67**, 2944 (1990)