

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

DEFEITOS RESPONSÁVEIS PELA ISOLAÇÃO DE GaAs IRRADIADO COM PRÓTONS*

Artur Vicente Pfeifer Coelho

Dissertação elaborada sob a
orientação do Dr. Henri Ivanov
Boudinov, em preenchimento
parcial dos requisitos para a
obtenção do título de Mestre em
Física.

Porto Alegre
2003

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

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a toda minha família, avós, tios, sobrinho(a), etc..., pelo apoio dado ao longo deste mestrado; ao pessoal do laboratório e da graduação por sua amizade; a todos aqueles que contribuíram, mesmo que indiretamente, para a realização deste trabalho: técnicos do Instituto, colegas de aula e professores; e, em especial, ao meu orientador, Henri Boudinov, por sua paciência e compreensão e aos meus pais e irmãos por toda a ajuda e o incentivo que me deram ao longo deste período.

RESUMO

A Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS – *Deep Level Transient Spectroscopy*) foi, detalhadamente, descrita e analisada. O processo de isolação por implantação em GaAs foi estudado. Sua dependência com a sub-rede, do As ou do Ga, em que o dopante é ativado foi investigada para material *tipo-p*. Semelhantes doses de implantação de prótons foram necessárias para se tornar semi-isolantes camadas de GaAs dopadas com C ou com Mg possuindo a mesma concentração de pico de lacunas livres. A estabilidade térmica da isolação nestas amostras foi medida. Diferenças no comportamento de recozimento destas apontaram a formação, provavelmente durante a referida etapa térmica, de uma estrutura diferente de defeitos em cada caso. Medidas de DLTS foram realizadas em amostras de GaAs *tipo-n* e *tipo-p* implantadas com prótons de 600 keV. A estrutura de picos observada apresentou, além de boa parte dos defeitos introduzidos para o caso de irradiação com elétrons, defeitos mais complexos. Um novo nível, com energia superior em $\sim 0,64$ eV ao valor correspondente ao topo da banda de valência, foi identificado nos espectros medidos em material *tipo-p*. A variação da concentração dos centros de captura introduzidos com diferentes etapas de recozimento foi estudada e comparada com o comportamento previamente observado para a resistência de folha em camadas de GaAs implantadas com prótons. Simulações foram feitas, indicando que a interpretação adotada anteriormente, associando o processo de isolação diretamente à formação de defeitos relacionados a anti-sítios, pode não estar completa.

ABSTRACT

The Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) measurement was properly described and analyzed. The implant isolation process in GaAs was studied. Its dependence on the sub-lattice activated dopant atom position was investigated for the *p-type* material case. Similar proton doses were obtained to convert C or Mg doped layers, possessing the same hole peak concentration, into semi-insulating ones. The isolation thermal stability of these samples was measured. Differences in the annealing behaviors in both cases had pointed out the formation of dissimilar defect structures during the thermal treatment. DLTS measurements had been carried out in *n-type* and *p-type* GaAs samples implanted with 600 keV protons. The DLTS peaks structure presented many of the defects observed in the case of electron irradiation and other more complex ones. A new level, with energy of $\sim 0,64$ eV from the valence band, was identified in *p-type* GaAs. The capture centers concentration variation for different annealing stages was studied and compared with the previously observed sheet resistance behavior in GaAs layers implanted with protons. Simulations had been made, indicating that the previously adopted interpretation, directly associating the isolation process to the anti-site and anti-site related defects formation, might not be complete.

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO	10
CAPÍTULO 2. ISOLAÇÃO DE ARSENETO DE GÁLIO ATRAVÉS DE IRRADIAÇÃO COM ÍONS E ELÉTRONS	14
2.1 Medidas em GaAs tipo-n	15
2.2 Medidas realizadas em GaAs tipo-p.....	32
CAPÍTULO 3. ESPECTROSCOPIA DE TRANSIENTES DE NÍVEIS PROFUNDOS (DLTS)	38
3.1 Introdução.....	38
3.2 Dinâmica eletrônica de um estado profundo.....	42
3.3 Comportamento de níveis profundos em uma camada de depleção.....	51
3.3.1 Camadas ou zonas de depleção.....	51
3.3.2 Níveis profundos na depleção.....	60
3.4 Medindo transientes de capacitância em uma camada de depleção.....	68
3.5 Medindo transientes de tensão em uma camada de depleção cuja capacitância é mantida constante.....	78
3.6 Princípios do DLTS.....	79
3.7 Outros tipos de DLTS.....	85
3.7.1 Métodos de Janelas de Taxas de Emissão.....	86
3.7.2 Método da Transformada de Fourier.....	93
3.7.3 Método dos Momentos.....	96
3.7.4 Método da Transformada de Laplace.....	99
3.8 Interpretação do plot de Arrhenius.....	103
3.9 Medindo centros de captura de minoritários.....	110
3.10 Uma Última Consideração.....	115
3.11 Conclusões.....	117
CAPÍTULO 4. ISOLAÇÃO DE GAAS TIPO-P.....	119
4.1 Introdução.....	119
4.2 Descrição experimental.....	120
4.3 Resultados e discussão.....	123
4.4 Conclusões.....	134
CAPÍTULO 5. CARACTERIZAÇÃO DOS DEFEITOS USANDO A ESPECTROSCOPIA DE TRANSIENTES DE NÍVEIS PROFUNDOS (DLTS).....	135
5.1 Introdução.....	135

5.2 Descrição Experimental.....	137
5.3 Resultados e Discussão.....	142
5.4 Conclusão.....	163
CAPÍTULO 6. DISCUSSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	164
CAPÍTULO 7. CONCLUSÕES.....	175
REFERÊNCIAS.....	177
APÊNDICE A: MEDIDA DE SECÇÃO DE CHOQUE DE MAJORITÁRIOS PARA CENTROS DE CAPTURA DE MAJORITÁRIOS.....	184
APÊNDICE B. CÁLCULO DO NÍVEL DE FERMI E ESTIMATIVA DA RESISTÊNCIA DE FOLHA DE AMOSTRAS DE GAAS COM NÍVEIS PROFUNDOS.....	187
APÊNDICE C: SIMULAÇÃO DOS ESPECTROS DLTS.....	200

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

A microeletrônica está cada vez mais presente em nosso cotidiano. Eletrodomésticos, veículos automotivos, computadores, brinquedos, etc ... vivemos hoje cercados por itens que necessitam direta ou indiretamente de circuitos integrados para funcionarem. Há estudos^[1] indicando que, em média, uma única pessoa ocidental interaja mais de uma centena de vezes por dia com dispositivos microeletrônicos. Toda esta demanda gerou cerca de um trilhão de dólares^[1] para a indústria global de circuitos integrados em 2000, e a expectativa é de se ter números ainda mais significativos para este ano e para anos posteriores, consolidando a microeletrônica como um dos ramos mais importantes da economia mundial.

O Silício é hoje o semicondutor mais utilizado para microeletrônica. Isto ocorre, basicamente, porque este material apresenta um óxido nativo, o SiO_2 , que propicia a criação de interfaces semicondutor / isolante de altíssima qualidade (com uma concentração muito baixa de defeitos), o que é essencial do ponto de vista tecnológico para a confecção de circuitos integrados (a tecnologia mais utilizada atualmente para a construção de chips, a tecnologia CMOS – *Complementary Metal-Oxide-Silicon*, depende crucialmente deste fator). No entanto, o silício apresenta uma desvantagem crítica em relação a outros semicondutores no que diz respeito à emissão de luz: sua estrutura de bandas cria um *gap* indireto, o que implica no fato de que a recombinação de portadores livres com emissão de fótons, neste caso, envolve também a participação de fônons (quantum de vibração da rede). Isto torna este último processo bem menos efetivo do que o que é observado para semicondutores de *gap* direto, diminuindo a aplicabilidade do silício para um campo que,

cada vez mais, tem ganho destaque: a optoeletrônica. Este novo ramo da tecnologia da informação é caracterizado pelo fato de alternar fótons / elétrons como os portadores de informação e também está cada vez mais presente em nosso cotidiano (quem, hoje em dia, não ouviu falar de sistemas que se comunicam através de fibras óticas, por exemplo). Desta forma, uma série de semicondutores com *gap* direto têm sido experimentados (principalmente semicondutores compostos III-V e semicondutores ternários). Dentre estes, destaque-se o arseneto de gálio (GaAs). Este material, além do *gap* direto, possui algumas outras vantagens sobre o Si, como, por exemplo, os altos valores observados para a mobilidade dos portadores livres (o que o torna propício para dispositivos de muito alta frequência). No entanto o GaAs não possui um óxido nativo. Mesmo assim, este material já vem sendo utilizado, em escala industrial, para a confecção de circuitos integrados (utilizando uma tecnologia diferente da CMOS) e de dispositivos discretos para uso principalmente em optoeletrônica.

Neste trabalho, iremos abordar um dos passos tecnológicos empregados na chamada tecnologia do GaAs: a isolação por implantação iônica ou, simplesmente, implantação de isolação. A implantação iônica é um processo já empregado na confecção de dispositivos microeletrônicos e circuitos integrados há mais de vinte anos. Ela permite a introdução precisa (criando perfis bem controlados) e facilmente reproduzível de impurezas na rede do semicondutor e também mantém a planaridade das amostras. Sua principal aplicação é a dopagem controlada dos semicondutores pela introdução de perfis precisos de impurezas dopantes. No entanto, para GaAs e outros semicondutores que podem ser considerados semi-isolantes quando intrínsecos, há ainda uma outra aplicação de destaque para esta técnica: a implantação de íons cria uma série de defeitos na rede de um semicondutor, e estes defeitos podem alterar significativamente as propriedades elétricas do

material. Assim, para os semicondutores mencionados acima, o simples e estabelecido processo de implantação iônica é capaz de tornar altamente resistivas camadas de semicondutor inicialmente condutivas. A este processo dá-se o nome implantação de isolamento. A implantação de isolamento já é usada como etapa tecnológica para materiais^[2,3] como o GaAs; no entanto, o processo físico envolvido na formação desta isolamento ainda não foi completamente entendido e caracterizado. O objetivo desta dissertação é somar aos diversos trabalhos anteriores, encontrados na literatura, dados e interpretações que possam levar a uma melhor compreensão desta isolamento e, conseqüentemente, à otimização da correspondente etapa tecnológica.

O texto que segue está organizado da seguinte maneira: o capítulo 2 apresenta os principais resultados obtidos em trabalhos anteriores; o capítulo 3 fornece uma detalhada discussão sobre uma das mais importantes medidas elétricas de defeitos em semicondutores, a Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (ou *Deep Level Transient Spectroscopy*, DLTS); o capítulo 4 mostra resultados comparando a isolamento de GaAs *tipo-p* dopado com Mg com a isolamento de GaAs *tipo-p* dopado com C; No capítulo 5, temos resultados de medidas DLTS de amostras de GaAs *tipo-n* e *tipo-p* implantadas com prótons, numa tentativa de identificação dos principais defeitos que participam da isolamento por implantação neste caso; o capítulo 6 traz uma discussão visando relacionar os resultados obtidos nos capítulos 4 e 5 com comportamentos e dados experimentais observados anteriormente e estimar até que ponto o nosso conhecimento sobre este processo chegou, indicando, no final, continuações lógicas para o trabalho até aqui desenvolvido que possam acrescentar mais a este conhecimento; e, por fim, o capítulo 7 apresenta as principais conclusões obtidas nesta dissertação.

Gostaria ainda de deixar esclarecidas duas questões relativas à notação que será adotada: neste texto, usarei aleatoriamente e sem restrições as palavras dose e fluência. Não entrarei na discussão da diferença entre estes termos e designarei, para ambos, o significado de número de íons implantados por unidade de área. Da mesma forma, não diferenciarei as palavras irradiação e implantação significando ambas aqui a incidência de partículas carregadas (sejam íons, elétrons, etc ...), previamente aceleradas, sobre a amostra em questão.

Esta dissertação teve também como objetivo, paralelamente à pesquisa mencionada nos parágrafos acima, a obtenção do conhecimento necessário para a implementação de um sistema de medidas DLTS no Laboratório de Microeletrônica do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Alguns detalhes experimentais ainda faltam para o completo funcionamento deste sistema de medidas, mas acredito que sua implementação tornar-se-á completa em curto intervalo de tempo, levando o Instituto a poder realizar esta que é, atualmente, uma das mais importantes medidas de defeitos em semicondutores e que, embora seja muito utilizada no mundo, ainda não havia ganho similar atenção no Brasil.

CAPÍTULO 2. ISOLAÇÃO DE ARSENETO DE GÁLIO ATRAVÉS DE IRRADIAÇÃO COM ÍONS E ELÉTRONS

A isolação elétrica de semicondutores compostos III-V por implantação iônica é um processo que já vem sendo usado, inclusive em escala industrial, na fabricação de diversos dispositivos e de circuitos integrados, principalmente em GaAs. A isolação com feixe de prótons foi utilizada com sucesso em circuitos de GaAs para isolar transistores adjacentes (tanto de efeito de campo como bipolares)^[4], em transistores de alta mobilidade de elétrons (HEMTs - *High Electron Mobility Transistors*)^[5] e na criação de regiões de guias de onda em dispositivos optoeletrônicos^[6]. O uso de íons leves é geralmente requisitado para que se possa, com energias compatíveis àquelas oferecidas pela maioria dos implantadores industriais (<500 keV), obter a isolação de toda a camada ativa.

Para que esta tecnologia pudesse chegar a tal escala de utilização, a isolação de materiais III-V (principalmente GaAs) por implantação foi e continua a ser um tema muito pesquisado entre diversos grupos no mundo. Embora antes mesmo da década de 80 alguns grupos já realizassem investigações no campo, foi a partir da década de 90 que os principais resultados que serão utilizados como base desta dissertação foram apresentados. Este capítulo destina-se à introdução e discussão destes resultados. Para tanto, ele está dividido em duas subsecções básicas, a primeira referente a medidas realizadas em GaAs *tipo-n*, e a segunda, em GaAs *tipo-p*.

2.1 Medidas em GaAs tipo-n

O comportamento usualmente observado da resistividade (ρ) ou da resistência de folha (R_s dada por $R_s = \rho/d$, onde “d” é a espessura da camada a ser medida) de um semicondutor composto III-V com o acúmulo da dose de íons leves implantados é de grande relevância para a compreensão do processo de isolamento por implantação. Sua interpretação, para poder ser feita de maneira adequada, no entanto, exige o conhecimento da montagem experimental utilizada. Assim sendo, antes de se entrar nos detalhes deste comportamento, serão feitos alguns breves comentários quanto ao arranjo experimental usualmente adotado (arranjo este que também foi utilizado em partes da pesquisa que será aqui exposta).

Vamos, então, descrever a montagem experimental adotada na referência [7].

Esta montagem é análoga às adotadas nos demais trabalhos de medidas de resistência de folha. As amostras consistem basicamente em lâminas de GaAs semi-insolante (a maioria dos trabalhos aqui apresentados utilizaram laminas de LEC, *Liquid Encapsulated Czochralski*, GaAs) sobre as quais fez-se, inicialmente, uma implantação de dopagem com íons de Si a baixas energias (30 a 50 keV), criando-se uma camada tipo-n de aproximadamente 200 nm de espessura, a chamada camada ativa (embora tenha sido, no exemplo adotado, criada por implantação, ela também pode ser crescida por epitaxia). Assim, chegou-se a uma estrutura com uma camada condutiva sobre um substrato semi-insolante (este último com R_s em torno de $10^9 \Omega/\square$ ^[8]). Sobre esta estrutura, então, foram depositados contatos de In, formando resistores como representado na Figura 2.1.

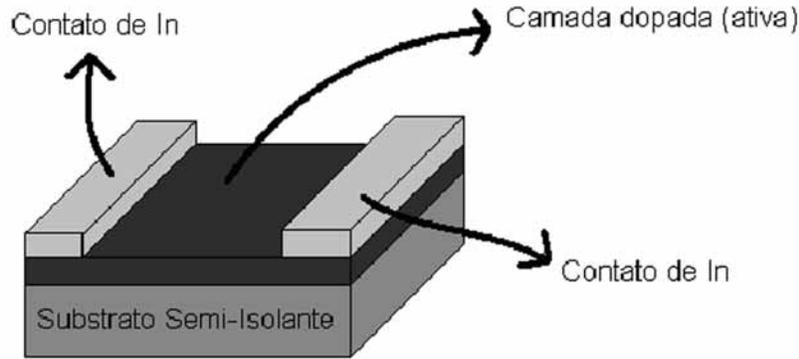


Figura 2.1. Estrutura dos resistores em barra.

A seguir, foi realizada a implantação de isolamento com um íon leve (no caso, próton) e a uma energia suficientemente alta para que o pico de defeitos ficasse dentro do substrato, resultando em um perfil de defeitos praticamente constante dentro da camada condutiva (ver Figura 2.2). As medidas de resistência de folha foram feitas *in situ* à medida em que se acumulava a fluência de prótons implantados.

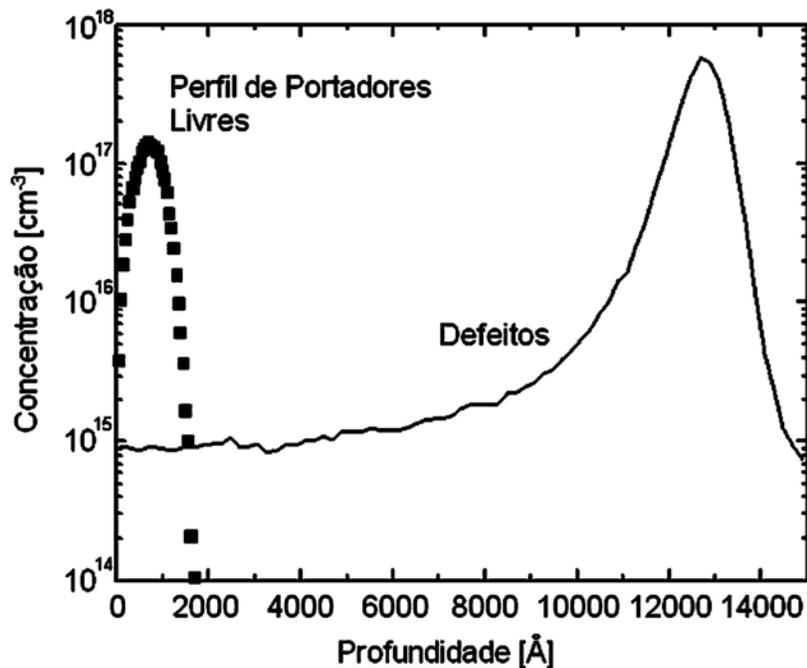


Figura 2.2. Comparação entre o perfil de defeitos gerados pela implantação com prótons e a camada ativa. A energia da implantação deve ser escolhida de forma que, na região dopada, tenha-se uma concentração constante de defeitos.

O comportamento usual da resistência de folha com a fluência de prótons para esta construção experimental está representado na Figura 2.3^[7].

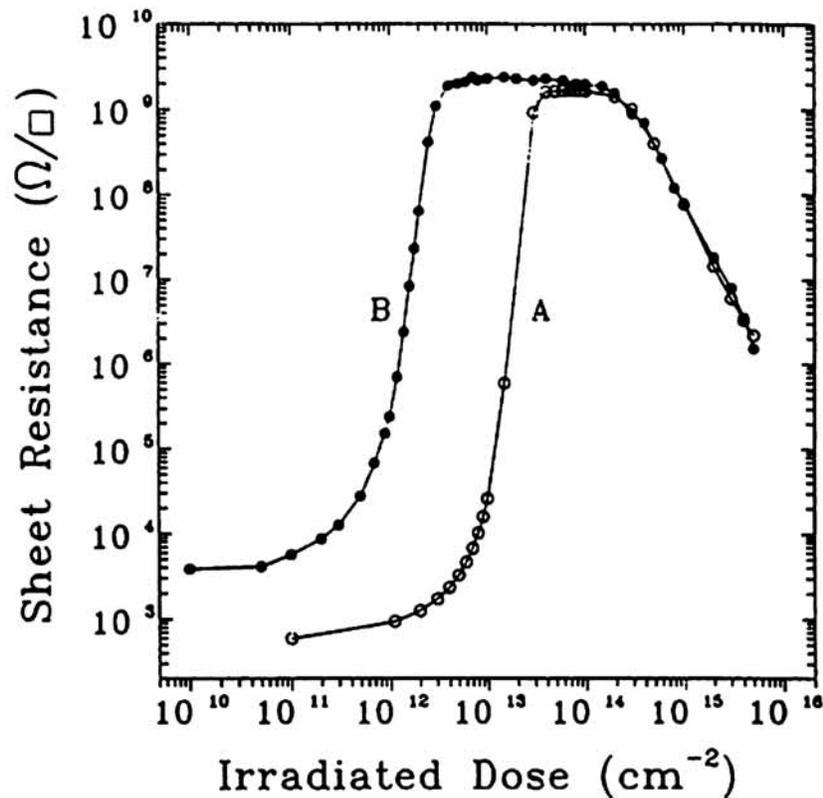


Figura 2.3. Evolução da resistência de Folha com a fluência de prótons para GaAs *tipo-n* com concentração de folha de portadores de (A) $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e (B) $6,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Referência [7].

A implantação cria defeitos na rede do GaAs, e acredita-se^[8,9,10] que estes, sejam eles defeitos relacionados à impureza implantada (isolação química^[9]) ou estruturais da rede, atuem como armadilhas, criando níveis no interior da banda proibida que capturam portadores livres, reduzem a mobilidade dos mesmos (uma vez que atuam como centros espalhadores) e, conseqüentemente, diminuem a condutividade da amostra. Podemos distinguir diferentes regiões na Figura 2.3: na primeira, correspondente a baixas fluências, a resistência de folha mostra um acréscimo pequeno com o acúmulo da irradiação, revelando que a concentração de dopantes ainda é muito superior à concentração de defeitos

induzidos pela irradiação e que, por conseguinte, a concentração e a mobilidade dos portadores livres, na região condutiva, ainda não haviam sido significativamente alterados. À medida em que a fluência vai sendo acumulada, a concentração de níveis profundos (que passaremos a chamar de armadilhas) aumenta e se torna comparável à de dopantes. Assim, não só ocorre um decréscimo significativo na concentração de portadores livres, como também ocorre uma diminuição na mobilidade dos mesmos, acarretando um notável acréscimo na resistência de folha medida (de quatro a seis ordens de grandeza para menos de uma ordem de grandeza de acréscimo na fluência acumulada). Até então, a resistividade na camada dopada era bem menor que no substrato, de forma que, ao medirmos a resistência de folha, pensando em um modelo simples de resistores em paralelo, estávamos medindo basicamente o valor correspondente à região dopada. Com o acúmulo da dose de prótons, no entanto, a resistividade na região dopada se torna comparável àquela do substrato. Assim, aumentando-se mais ainda a dose irradiada, chegamos a um valor a partir do qual a resistência de folha medida praticamente não aumenta, correspondendo à resistência de folha do substrato semi-isolante. Esta dose será chamada daqui por diante de dose de limiar, D_{Th} . Acumulando ainda mais fluência de prótons sobre a amostra, não se nota, praticamente, mudança no valor medido de R_s . Isto ocorre até que a quantidade de defeitos na região correspondente ao pico de sua distribuição, que fica no substrato, torne-se alta o suficiente para que se comece a observar condução entre defeitos (o chamado efeito *hopping*). Este mecanismo depende, basicamente, da concentração de níveis profundos criados pelos defeitos oriundos da irradiação ^[11,12]. Quanto maior esta concentração, maior a condutividade *hopping*. Assim, para a última região, de doses mais altas, na Figura 2.3, a resistividade na região do pico de defeitos passa a ser a menor e a

dominar a medida de R_s que apresenta, então, uma queda com o aumento da dose de implantação.

Na Figura 2.3, estão apresentados dois casos de amostras de GaAs *tipo-n* com diferentes concentrações iniciais de portadores (para o caso A, temos concentração de folha

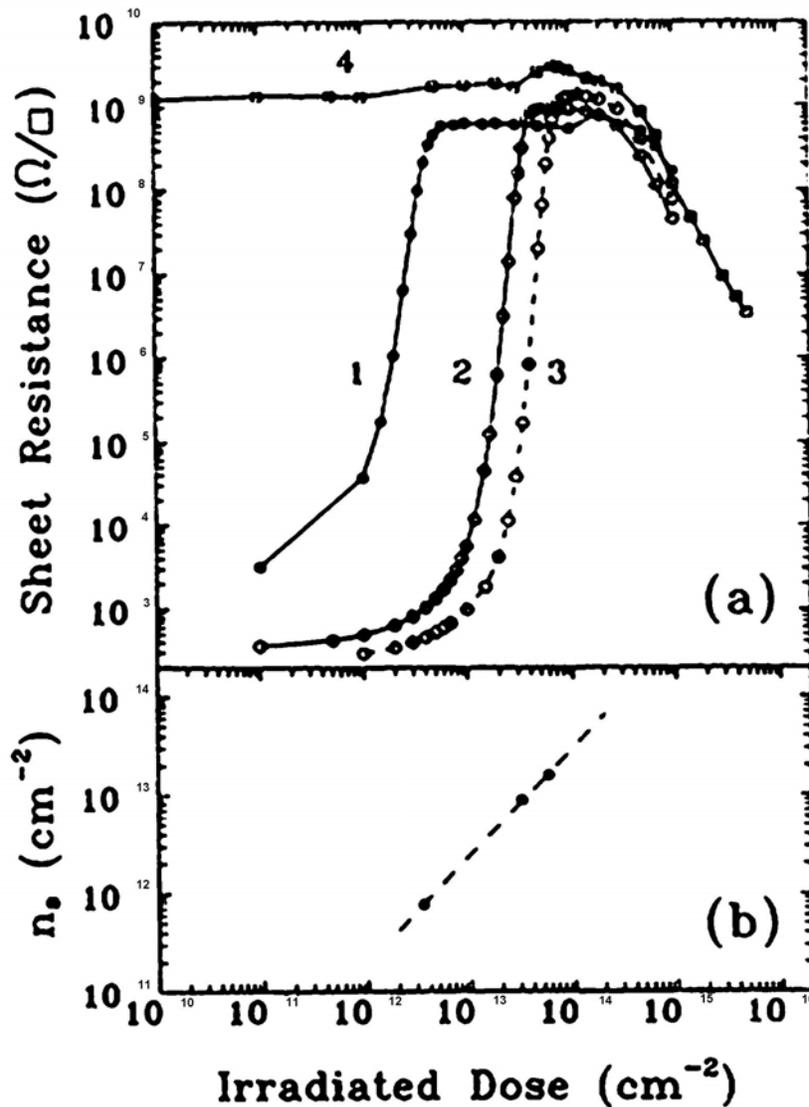


Figura 2.4 (a) Evolução da resistência de folha com a fluência de prótons de 50 keV para amostras de GaAs *tipo-n* com três diferentes concentrações de folha de portadores: $7,7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (1), $8,9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (2) e $1,6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (3). (b) Concentração inicial de portadores versus fluência de limiar (D_{Th}). Referência [13].

de elétrons $n_s = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, e, em B, $6,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). A comparação entre eles revela que doses maiores são necessárias para isolar amostras com concentrações maiores de portadores; afinal, para capturar uma quantidade maior de portadores livres é necessária uma maior quantidade de armadilhas. Esta comparação está melhor representada na Figura 2.4^[13].

A Figura 2.4(a) mostra a evolução da R_s com a dose de prótons com 50 keV acumulada em GaAs para quatro diferentes concentrações de dopantes. Como argumentado anteriormente, quanto menor a concentração inicial de dopantes, mais deslocada para a região de baixas doses fica a figura. A Figura 2.4(b) representa isto, mostrando uma relação linear entre as doses de limiar e as iniciais concentrações de folha de portadores. Desta figura, pode-se estimar uma média de 4,7 prótons implantados para a retirada de cada portador. Vale notar também que, embora os valores de D_{Th} dependam da concentração inicial de portadores, o valor para o início da condução hopping é praticamente o mesmo; afinal, ele depende apenas da concentração de danos acumulada que é basicamente a mesma em todos os casos (foi sempre utilizado o mesmo íon e a mesma energia).

A Figura 2.5(a) mostra o comportamento da resistência de folha de diversas amostras de GaAs *tipo-n*, possuindo estas a mesma concentração inicial de dopantes, com a dose irradiada para diferentes íons e diferentes energias de implantação. Quanto menor a energia do íon incidente (lembrando apenas que foram sempre usadas energias que colocam o pico de defeitos no substrato) ou quanto maior a massa do mesmo, mais deslocadas para a esquerda ficam as curvas. Este fato fica melhor evidenciado na Figura 2.5(b) que mostra a concentração estimada de átomos de Ga e As retirados de seus sítios na rede (N_d) contra a dose de limiar em cada caso. Os cálculos foram feitos usando o programa de simulação TRIM^[14], e este gráfico revela que o processo de remoção de portadores é inversamente

proporcional a N_d . Note-se também, em 2.5(a), que a dose correspondente ao início da condução *hopping* é menor para íons mais pesados, que, conseqüentemente, causam mais danos.

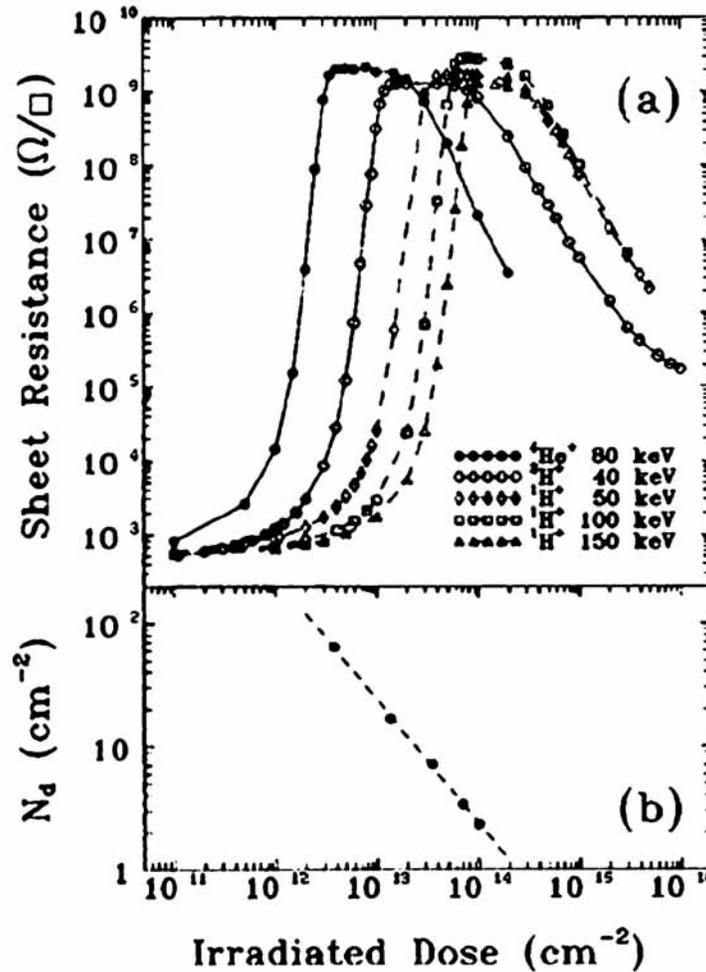


Figura 2.5. (a) Dependência da resistência de folha com a fluência irradiada para amostras com mesma concentração inicial de portadores, mas implantadas com diferentes íons e / ou diferentes energias. (b) Concentração estimada de colisões que retiram átomos da rede de suas posições originais (N_d) na camada ativa versus dose de limiar para cada diferente íon / energia utilizados. Referência [13].

A Figura 2.6(a) revela uma importante propriedade da isolação por implantação: a dose de limiar depende apenas fracamente do recozimento dinâmico. O gráfico mostra

curvas de R_s versus dose obtidas para diferentes temperaturas de implantação. Com o aumento da temperatura de implantação, esperava-se que a dose de limiar aumentasse consideravelmente; afinal, acredita-se^[15] que boa parte dos defeitos induzidos pela implantação sofre forte recozimento dinâmico. Mas apenas se nota uma variação considerável em D_{Th} para a implantação realizada a 300°C. Como veremos mais adiante, há

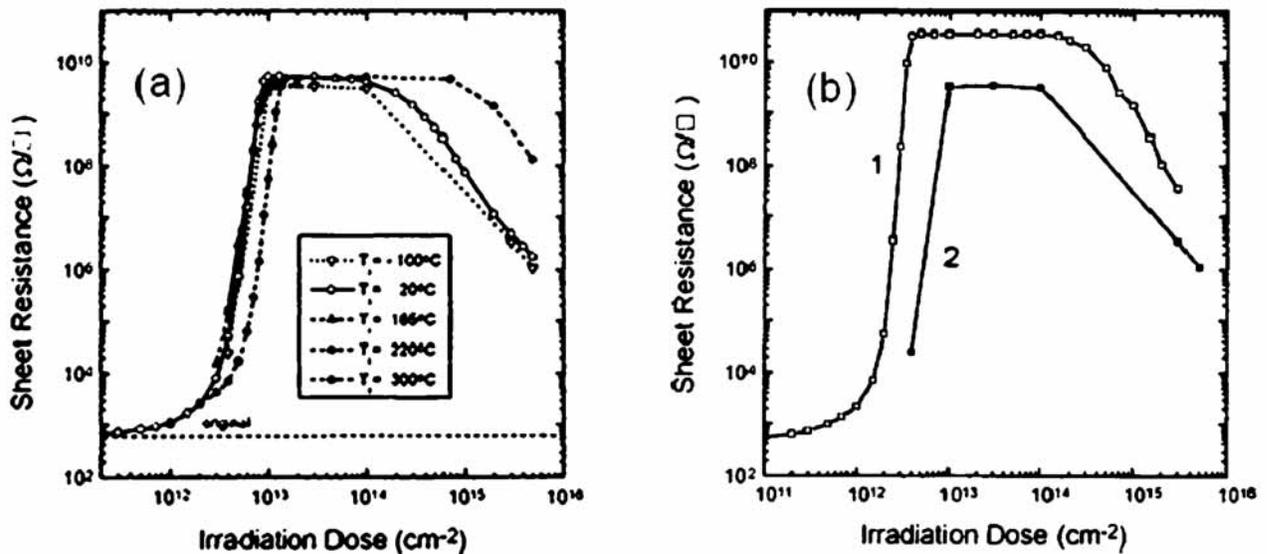


Figura 2.6. (a) Comparação entre as dependências da resistência de folha com a fluência acumulada para amostras de GaAs *tipo-n* irradiadas com prótons de mesma energia, mas a diferentes temperaturas de implantação (as medidas de R_s foram feitas à temperatura ambiente). (b) Comparação entre a implantação a temperatura ambiente (curva 2) e a -100°C (curva 1). Os valores de R_s foram medidos *in situ*. Referência [16].

uma região de forte recozimento de defeitos a temperaturas logo inferiores a esta. Assim, podemos dizer que os defeitos responsáveis pela isolação devem ser fracamente sensíveis ao recozimento dinâmico para temperaturas de implantação inferiores a esta última. Anti-sítios (um átomo de As em uma posição da subrede do Ga, As_{Ga} , ou vice-versa, Ga_{As}) e

defeitos relacionados a anti-sítios passam a se tornar fortes candidatos a responsáveis pela isolamento, uma vez que se atribui a estes^[16] um fraco recozimento dinâmico para temperaturas de implantação inferiores a 250°C.

A Figura 2.6(b) mostra a evolução de R_s medida *in situ* a -100°C e à temperatura ambiente com a dose irradiada. A evidente diferença entre as doses de limiar revela que há um forte recozimento de defeitos na região entre -100 e 20°C. Veremos mais adiante que, nesta faixa de temperaturas, ocorre o recozimento de vacâncias de Ga (V_{Ga}). A altura dos platôs é diferente porque a condutividade do substrato aumenta com o aumento da temperatura (as amostras foram medidas *in situ* nas temperaturas de implantação).

A evolução da resistência de folha de amostras de GaAs tipo-n com a temperatura de recozimento (T_r) também foi investigada. A Figura 2.7 apresenta a evolução de R_s com T_r para três diferentes doses (D1, D2 e D3) e para três diferentes íons. D1 é um pouco menor que D_{Th} , D2 corresponde a uma situação de condução *hopping* fraca e D3 a uma condução *hopping* forte. Note que, para os três íons utilizados, no caso da dose D1, há um forte recozimento em temperaturas entre 200 e 300°C e um novo recozimento para temperaturas maiores que 400°C. Como mostrado na Figura 2.8, esta primeira região de recozimento é devida ao aumento tanto da concentração de folha de elétrons, n_s , quanto da mobilidade dos mesmos, μ_e . Este comportamento, como veremos, é característico de níveis que possuem estado de carga menor que zero quando estão com o elétron aprisionado. A segunda região de recozimento (400°C), no entanto, apresenta um forte aumento em μ sem causar uma mudança muito evidente em n_s . Este comportamento foi associado^[17] ao recozimento de centros espalhadores carregados que não atuam como armadilhas. Como também apresentado na referência [17], fazendo o gráfico de μ^{-1} (proporcional à variação na

concentração de centros espalhadores carregados) contra $1/T$, se obtém, da declividade da reta apresentada, um valor de energia de ativação de aproximadamente 0,51 eV, valor este que corresponde à energia obtida para a migração do As intersticial^[18].

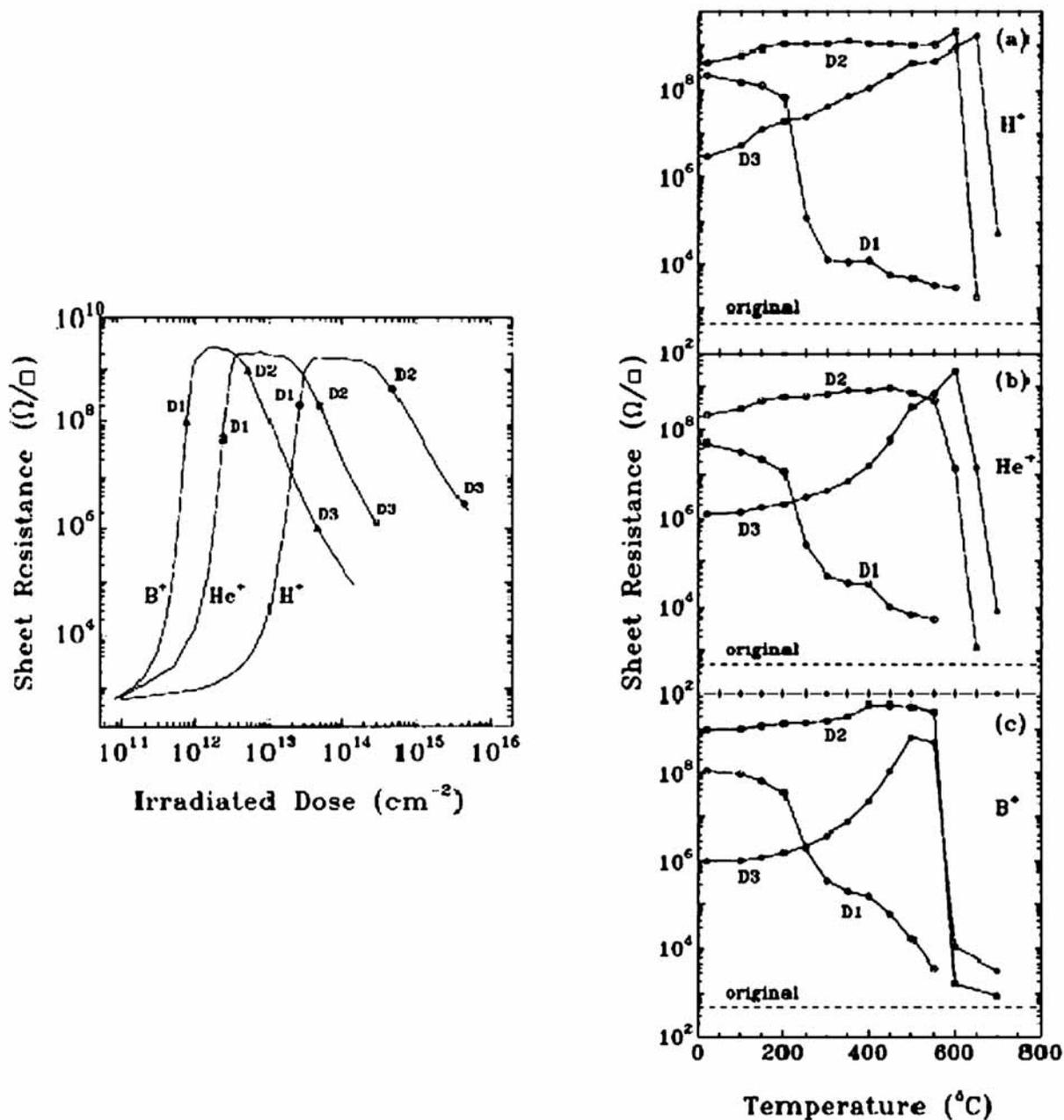


Figura 2.7. Evolução da resistência de folha com a temperatura de recozimento pós-irradiação para H^+ a 50 keV(a), He^+ a 80 keV (b) e B^+ a 150keV (c). Referência [17].

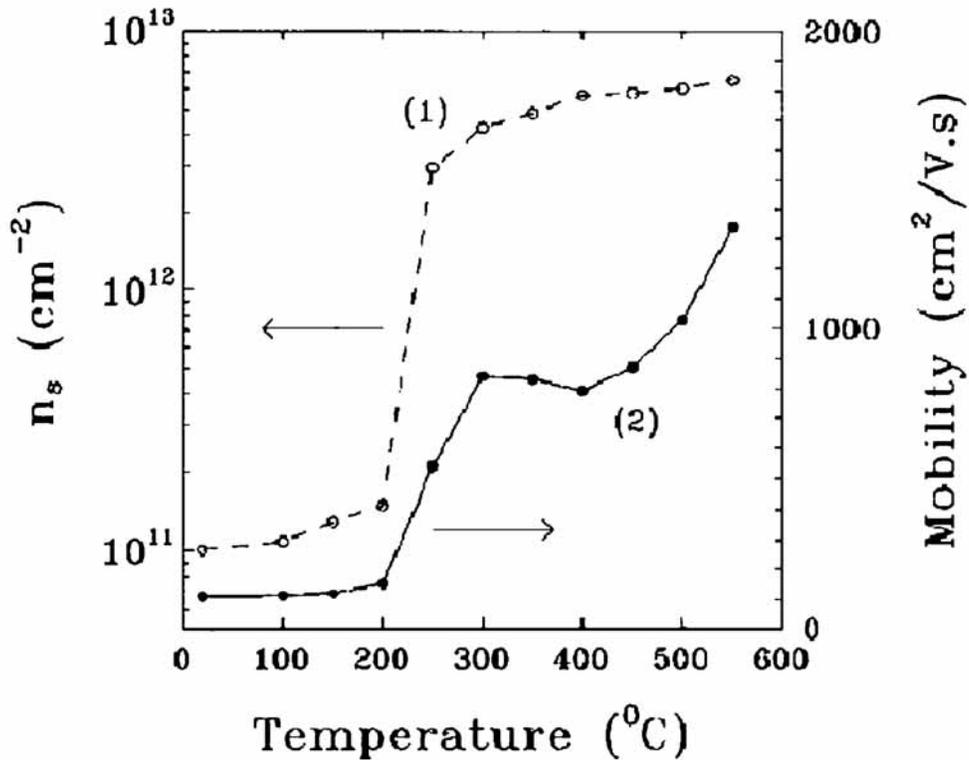


Figura 2.8. Concentração de folha de portadores e mobilidade Hall efetiva como função da temperatura de recozimento (300 s por etapa) para amostra de GaAs *tipo-n* (com n_s original de $1,36 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e mobilidade de $1910 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) submetida a implantação de prótons de 50 KeV e fluência de $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Referência [17].

A estabilidade térmica da isolação é definida como a temperatura de recozimento máxima para a qual ainda se obtenha valores de R_s da ordem de $10^8 \Omega/\square$. Para o caso das doses D2, pode-se dizer que esta isolação é estável até temperaturas na faixa de 550-600°C. Esta é também a região de temperaturas em que Wörner et al^[19] observaram uma queda considerável no sinal de ressonância de spin eletrônico do que se acredita ser um anti-sítio $\text{As}_{\text{Ga}}^{4+}$ em amostras de GaAs irradiadas com nêutrons.

As doses D3, por sua vez, não causam significantes alterações no comportamento já observado para D2 (a estabilidade térmica das amostras não mudou mais do que 50°C).

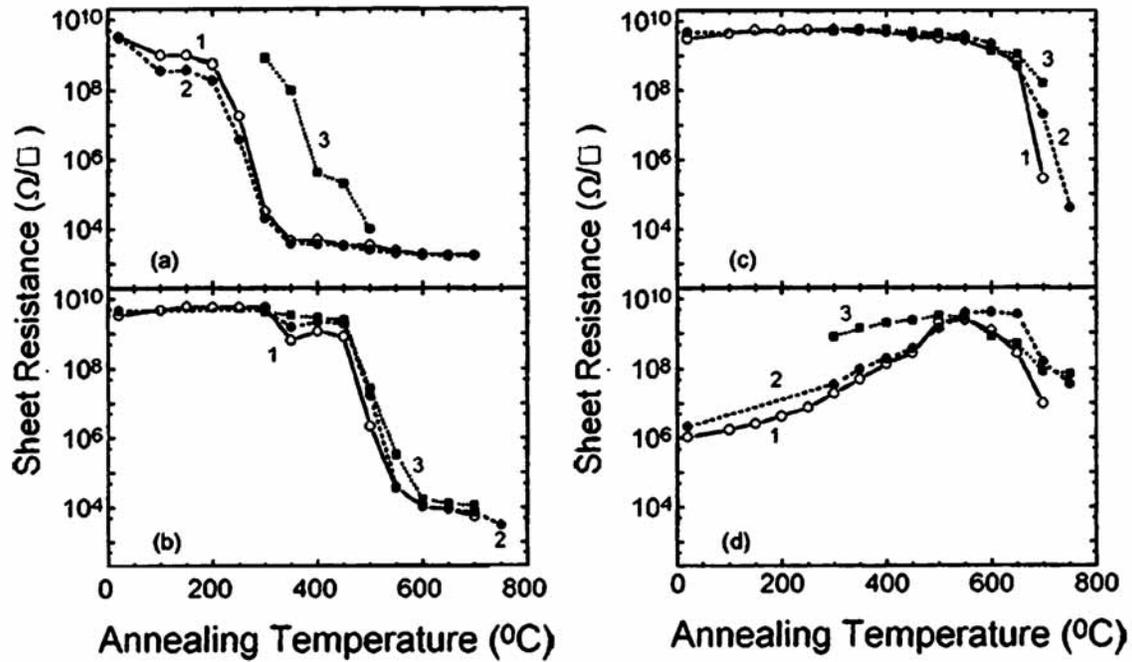


Figura 2.9. Evolução de R_s com a temperatura de recozimento pós-implantação para amostras irradiadas a D_{Th} (a), $3D_{Th}$ (b), $10D_{Th}$ (c) e $500D_{Th}$ (d). Curvas 1, 2 e 3 correspondem respectivamente a temperaturas de implantação de -100°C , temperatura ambiente e 300°C . Referência [16].

A mudança na estabilidade térmica da isolação com a temperatura de implantação também foi estudada. A Figura 2.9 ilustra a evolução de R_s com a temperatura de recozimento para amostras de GaAs *tipo-n* (dopadas com Si e para uma concentração de pico de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) implantadas com prótons de 150 keV a temperaturas de -100°C (1), ambiente (2) e 300°C (3) para os casos de D_{Th} (a), $3 D_{Th}$ (b), $10 D_{Th}$ (c) e $500 D_{Th}$ (d). Note-se que, em todos os casos, não há grande diferença nos comportamentos observados para as amostras implantadas a -100°C e à temperatura ambiente, mostrando que a implantação a frio não introduz nenhuma diferença significativa na estabilidade térmica da isolação. Para as irradiadas a D_{Th} (a), evidencia-se um valor bem maior da resistência de folha medida na região de recozimentos pós-implantação entre 300 e 500°C no caso da amostra implantada a 300°C do que para as demais. Isto indica que diferentes estruturas de armadilhas são

geradas em cada caso. Para a implantação a 300°C, estas armadilhas têm que ser estáveis a pelo menos esta temperatura, e, como vimos na Figura 2.6, há um forte estágio de recozimento para amostras irradiadas à D_{Th} entre 200 e 300°C. Assim, é de se esperar que os defeitos no caso da implantação à mais alta temperatura sejam diferentes daqueles nos demais casos. Para o caso de 3 D_{Th} (b), observa-se estabilidade térmica até aproximadamente 450°C em todas as amostras. Nas implantações a -100°C e à temperatura ambiente, evidencia-se um pequeno recozimento em aproximadamente 350°C seguido de um recozimento reverso na região entre 350 e 400°C. As causas deste recozimento inverso ainda não estão claras.

Para doses de 10 D_{Th} (c), a estabilidade térmica aumenta para ~650°C e não se notam significativas diferenças entre os três casos. Já para doses de 500 D_{Th} (d), onde evidencia-se a condução *hopping*, verifica-se um aumento de R_s com a temperatura de recozimento até 500°C devido à diminuição da concentração de estados profundos e conseqüente decréscimo da condução intra-defeitos. Não há uma variação significativa na estabilidade térmica em relação ao caso anterior (10 D_{Th}).

Ahmed et al^[20] também pesquisaram a estabilidade térmica de amostras de GaAs *tipo-n* implantadas com $^4He^-$ a diferentes temperaturas. Seus dados mostram uma diferença considerável (mais de 200°C) nesta estabilidade térmica para amostras implantadas a temperatura ambiente, 100°C e 200°C até uma fluência correspondente a uma situação de evidente condução *hopping*.

Além do estudo da resistividade do material, diversas outras medidas foram empregadas na tentativa de se estabelecer a estrutura dos defeitos presentes em GaAs irradiado. Dentre estas, destacam-se a ressonância paramagnética de elétrons (EPR), a

espectroscopia de transientes de nível profundo (DLTS – *Deep Level Transient Spectroscopy*) e a aniquilação de pósitrons.

Há uma vasta literatura de medidas de DLTS em GaAs irradiado. A maioria destas publicações, no entanto, adotou a irradiação com elétrons a energias em torno do MeV tendo como intuito a obtenção de defeitos mais simples, que pudessem ser comparados com as previsões teóricas. A implantação com íons leves, como é de se esperar, gera uma quantidade maior de defeitos mais complexos, mas, como veremos adiante, também cria grande parte dos defeitos observados após a irradiação com elétrons, de forma que a compreensão das principais características destes últimos defeitos é de grande importância.

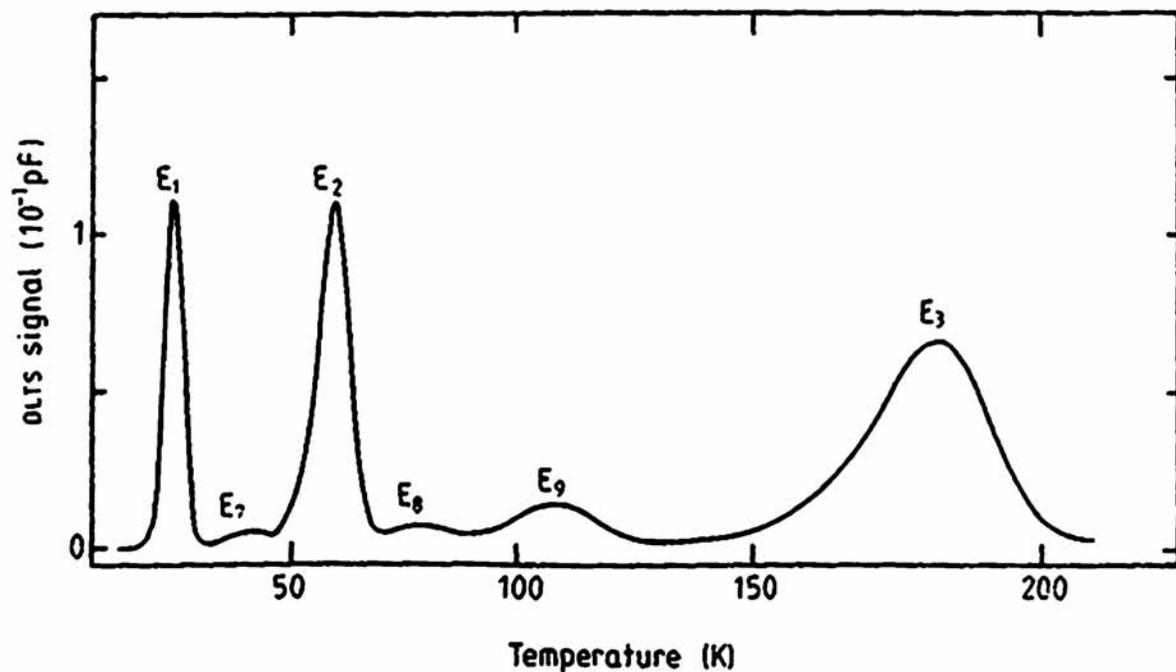


Figura 2.10. Típico espectro DLTS para GaAs *tipo-n* irradiado com elétrons de energia em torno de 1 MeV. Referência [21].

Após a irradiação com elétrons de 1 MeV a 4 K, o espectro DLTS de amostras de GaAs *tipo-n* para portadores majoritários (toda a nomenclatura utilizada na medida DLTS será discutida em detalhe no capítulo 3) revela uma série de picos que foram historicamente nomeados E_1 , E_7 , E_2 , E_8 , E_9 , E_3 , E_4 e E_5 , como representado na Figura 2.10 à exceção de E_4 e E_5 que aparecem a mais altas temperaturas. Para todos estes picos, a taxa de introdução, definida como a razão entre a concentração de defeitos e a dose irradiada, mostrou-se independente da espécie química e da concentração dos dopantes^[21,22]. Conseqüentemente, acredita-se que sejam todos correspondentes a defeitos intrínsecos da rede. Estudos de anisotropia^[21], os quais tentam observar (levando em conta que os elétrons incidentes a 1 MeV conservam sua direção em uma camada superficial de alguns micrometros da amostra e que as medidas DLTS foram realizadas nesta região) a diferença entre a introdução dos defeitos com a amostra nas direções [111]As ou [111]Ga, revelaram que E_1 , E_2 e E_3 (os demais não foram medidos) devem ser defeitos da sub-rede do As. Quanto à estabilidade térmica destes defeitos, Thommen^[23] relatou que os defeitos introduzidos pela irradiação com elétrons recozem basicamente em três etapas: estágio I ~ 230 K, estágio II ~280 K e estágio III ~ 500 K. Os defeitos E_1 - E_5 recozem no estágio III^[21,24], enquanto que os demais, no estágio II^[21].

Como E_1 , E_2 , E_3 e E_5 são criados a 4 K ou à temperatura ambiente com taxas de introdução idênticas, têm sua introdução independente de impurezas ou da forma de crescimento do cristal e recozem juntos a 220°C com fração de recozimento de aproximadamente 100% e energia liberada por defeito de $8,5 \pm 0,5$ eV^[25], acredita-se^[18,24,26] que estes níveis correspondam a pares de Frenkel. E_1 , E_2 e E_3 mostraram visível anisotropia em suas taxas de introdução, relacionando-os à rede do As. Essas mesmas taxas

revelaram-se independentes do valor de x em amostras $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ^[27], e concluiu-se que se tratam de pares de Frenkel $V_{\text{As}} + \text{As}_i$.

Tabela 2.1. Temperatura aproximada correspondente ao pico, taxa de introdução (τ) para irradiação com elétrons de 1MeV, energia aparente, secção de choque aparente e temperatura de recozimento para as armadilhas observadas em GaAs *tipo-n* irradiado com elétrons. Referência [21].

Defeito	T₀ (K)	τ (cm⁻¹)	E_a (eV)	σ_{na} cm²	T_r (K)
E ₁	20	1,5	0,045	$2,2 \times 10^{-15}$	500
E ₂	60	1,5	0,14	$1,2 \times 10^{-13}$	500
E ₃	160	0,4	0,3	$6,2 \times 10^{-15}$	500
E ₄	310	0,08	0,76	$3,1 \times 10^{-14}$	500
E ₅	360	0,1	0,96	$1,9 \times 10^{-12}$	500
E ₇	40	$\sim 5 \times 10^{-4}$	-	-	250
E ₈	80	$\sim 5 \times 10^{-4}$	-	-	-
E ₉	110	$\sim 2 \times 10^{-3}$	-	-	250
P ₁	200	$\sim 10^{-2}$	0,36	$6,9 \times 10^{-15}$	-
P ₂	280	$\sim 10^{-2}$	0,5	$1,4 \times 10^{-15}$	-
P ₃	350	$\sim 10^{-2}$	0,72	$1,4 \times 10^{-13}$	-

Quanto ao defeito E₄, não se pode fazer semelhante associação devido a diferenças em suas características de recozimento^[28]: acredita-se que a mobilidade do As_i dependa da concentração de lacunas no material; assim sendo, alguns estudos de recozimento dos defeitos E's estimulados com injeção de portadores minoritários foram realizados. Apenas E₄ mostrou-se insensível à provável modificação na mobilidade do As_i causada por esta injeção de lacunas. Após ser descartada a hipótese de um par de Frenkel de As, estudos de EPR^[29,30] foram realizados e associaram E₄ ao defeito $V_{\text{As}} + \text{As}_{\text{Ga}}$. Segundo o referido estudo, este defeito seria devido a uma instabilidade da V_{Ga} em GaAs *tipo-n* que decairia em E₄ ($V_{\text{As}} + \text{As}_{\text{Ga}}$) e, com o aumento da temperatura ou acúmulo da fluência irradiada, formaria o anti-sítio As_{Ga} isolado.

Após a etapa de recozimento correspondente ao estágio III, verificou-se^[24] o aparecimento de três novos picos no espectro DLTS de GaAs *tipo-n* irradiado com elétrons de 1MeV. Estes picos foram nomeados P₁, P₂ e P₃. Acredita-se que P₁ seja originado a partir do recozimento dos picos E₁-E₅ e que P₂ e P₃ já estivessem presentes após a irradiação, mas encobertos por E₄ e E₅.

Alguns trabalhos também usaram DLTS para determinar os principais defeitos oriundos da implantação com prótons. H.H. Tan et al^[31] observaram os picos provenientes da implantação de H⁺ a 600 keV em uma camada epitaxial fracamente dopada ($1-2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$). F. H. Eisen et al^[32] compararam o espectro DLTS devido à irradiação de elétrons de 1MeV com o devido a uma implantação de prótons com baixas energias (50keV) em GaAs *tipo-n*. Os picos E₁, E₂ e E₄ foram observados com assinaturas (energia e secção de choque aparentes) semelhantes em ambos os casos. Um pico foi detectado próximo ao E₅ na implantação com H⁺, mas sua largura e assinatura revelaram que se tratava de P₃ sobreposto a E₅, ou seja, mostrou-se que, para o caso de implantação com íons mais pesados, P₃ se torna maior que E₅. Na região de temperaturas correspondente a E₃, um pico bem mais largo que este último foi observado. Estudos variando o campo elétrico na região de depleção mostraram que este pico se desdobra em dois, um deles sendo E₃ e o outro um defeito mais complexo.

Uma boa quantidade de trabalhos também foi realizada no intuito de descrever os defeitos relativos à rede do Ga. Medidas de absorção de infravermelho, DLTS, fotoluminescência, Hall com temperatura variável e aniquilação de pósitrons foram empregadas neste intuito^[33,34,35,36]. Phil Won Yu et al^[33], medindo fotoluminescência, observaram o surgimento de um nível a 77 meV da banda de valência em amostras (tanto *tipo-p* quanto *tipo-n*) de LEC GaAs crescidas em ambiente rico em Ga. Acredita-se que este

nível se deva ao anti-sítio de gálio no lugar do arsênio (Ga_{As}). Estudos de aniquilação de pósitrons também foram realizados em amostras de GaAs *tipo-n* irradiado com elétrons^[35] e com prótons^[36]. No primeiro caso, bolachas de LEC GaAs *tipo-n* foram irradiadas com elétrons de 1,5 MeV a fluências suficientemente altas para se ter a compensação dos portadores livres do material. Observou-se a formação de vacâncias de Ga e de íons negativamente carregados que foram associados a Ga_{As} . Foi também evidenciado um estágio forte de recozimento de V_{Ga} a 200-300K (similar comportamento foi observado em amostras semi-isolantes). Os anti-sítios Ga_{As} , por sua vez, recozeram apenas a 520K, temperatura em que se observou a restauração da condutividade do material. No caso da implantação com prótons^[36] (a elevadas energia (15MeV) e fluência ($1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$)) em amostras GaAs *tipo-n* (com concentração de elétrons livres de $1,3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$), observou-se a formação de defeitos negativamente carregados mais complexos, que recozem apenas a temperaturas da ordem de 700K.

2.2 Medidas realizadas em GaAs tipo-p

Para o caso de GaAs *tipo-p*, não há a mesma fatura de trabalhos como no caso do *tipo-n*. Algumas medidas de resistividade foram feitas^[37] e indicaram que, supondo que o tipo de condutividade do material não influi na criação dos defeitos, aproximadamente a mesma concentração de armadilhas de lacunas e de elétrons são formadas na implantação

com íons leves. Este resultado está rerepresentado na Figura 2.11. Note que, para concentrações iniciais de portadores livres iguais e usando o mesmo íon para a implantação de isolamento, amostras de GaAs *tipo-p* e *tipo-n* apresentam praticamente a mesma dose de limiar.

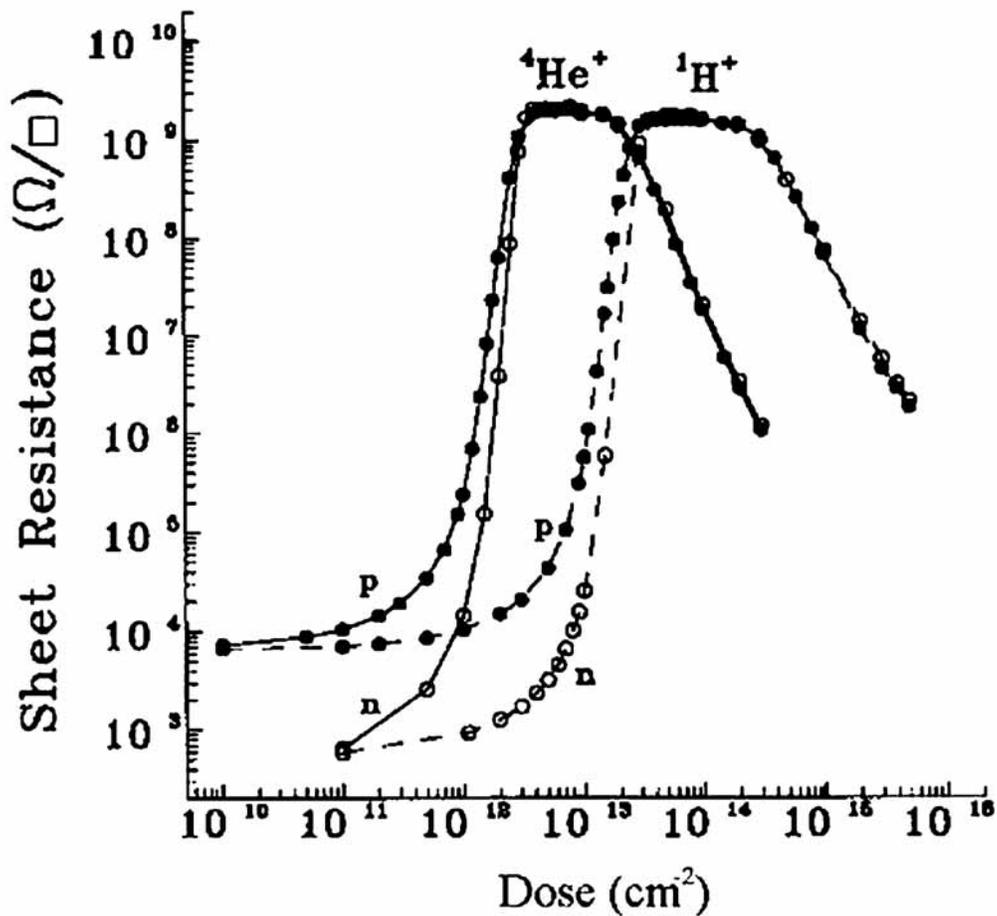


Figura 2.11. Evolução da resistência de folha com a fluência de $^1\text{H}^+$ (50keV) ou $^4\text{He}^+$ (80keV) para amostras *tipo-p* e *tipo-n* com a mesma concentração de folha de portadores ($6,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Referência [37].

Um comportamento bastante distinto do observado para GaAs *tipo-n* foi observado para amostras de GaAs *tipo-p* implantadas com íons leves e recozidas após a

implantação. Como mostra a Figura 2.12, na região de temperaturas de recozimento em torno de 140°C, pode-se notar um aumento da resistividade do material para amostras irradiadas a 0,5 D_{th} ou D_{th} . Após, há uma etapa de recozimento similar à obtida no caso *tipo-n*, a aproximadamente 300°C. Aumentando-se a dose para 16 D_{th} , a estabilidade térmica sofre um considerável acréscimo, atingindo valores em torno de 600°C. Já para fluências de 160 D_{th} , apenas um pequeno aumento (de ~50°C) é observado nesta estabilidade.

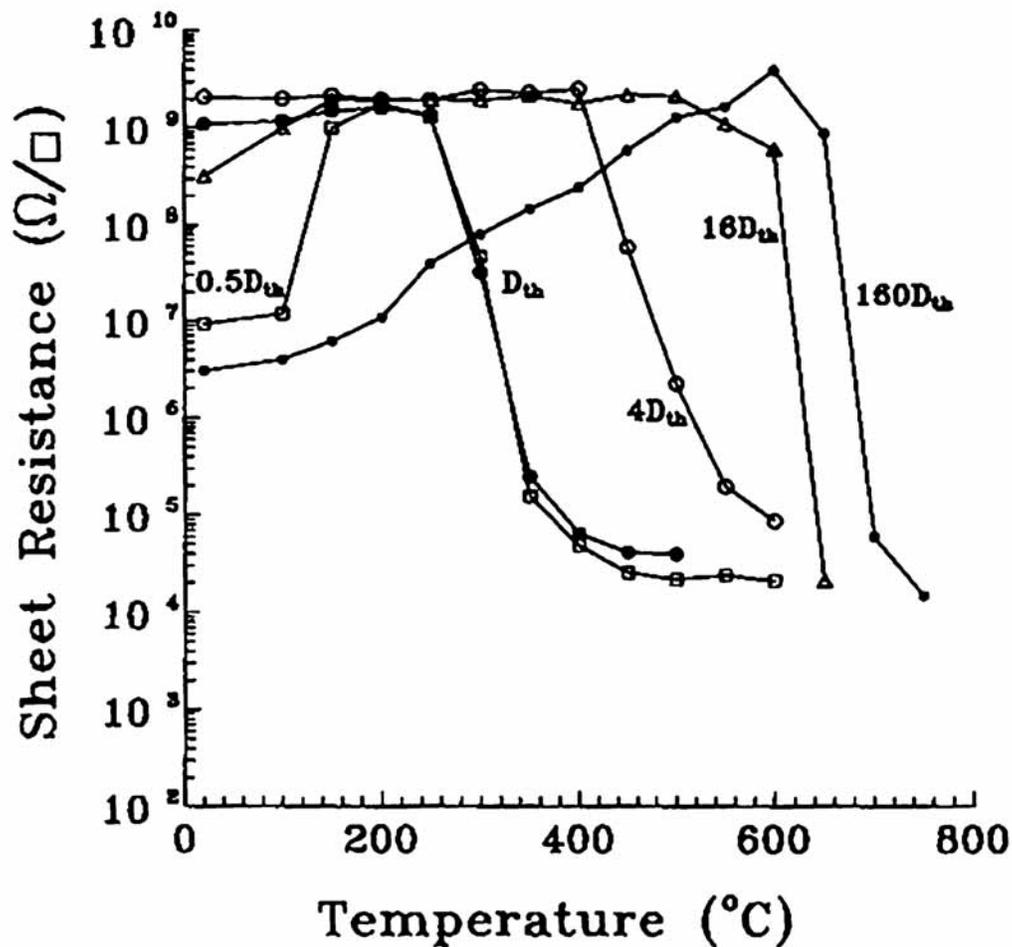


Figura 2.12. Evolução da resistência de folha com a temperatura de recozimento para amostras de GaAs *tipo-p* implantadas com prótons de 50 keV a doses de 0,5 D_{th} , D_{th} , 4 D_{th} , 16 D_{th} e 160 D_{th} . Referência [37].

Medidas DLTS em amostras de GaAs *tipo-p* irradiadas com elétrons também foram realizadas. O espectro típico está representado na Figura 2.13. Observa-se^[38] uma série de picos que foram nomeados H₀, H₁, H₂, H₃, H₄ e H₅. A Tabela 2.2 apresenta as principais informações obtidas para estes picos^[21]. H₀ e H₁ já haviam sido observados com injeção de portadores minoritários em GaAs *tipo-n*^[18]. Acredita-se que estes dois níveis

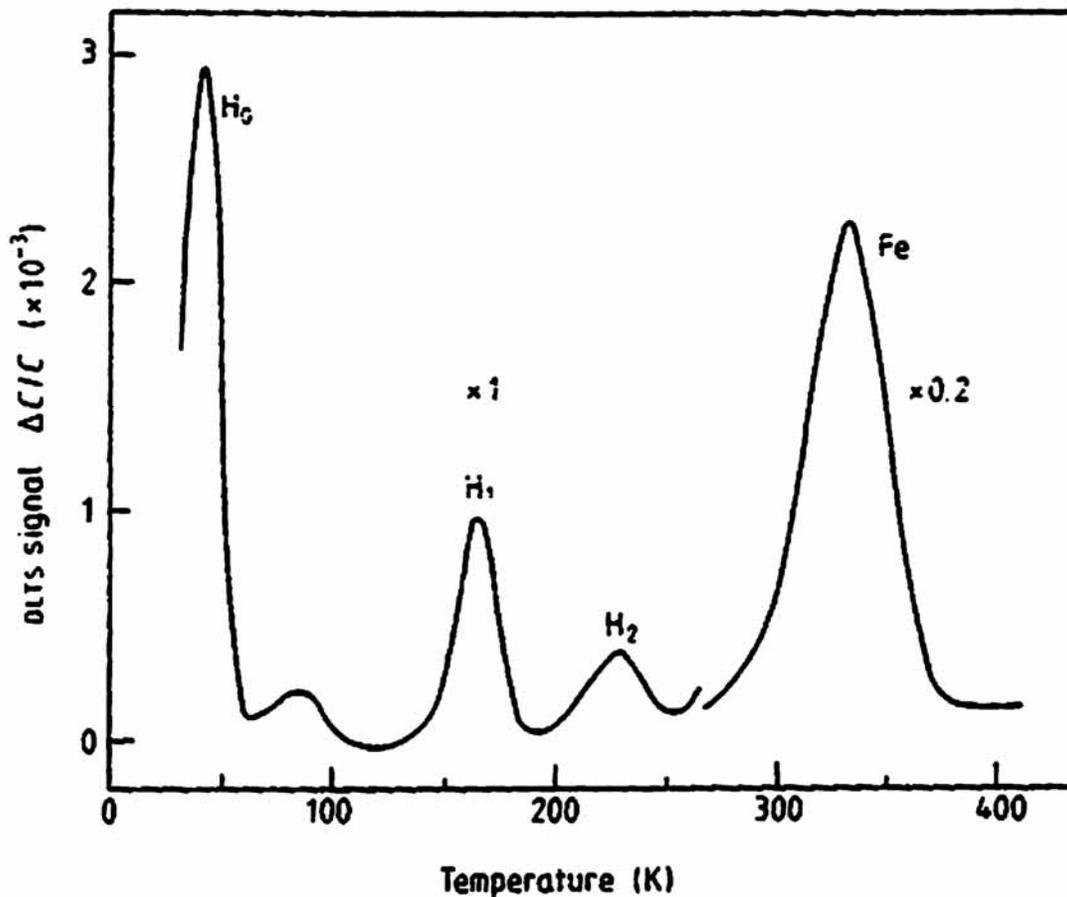


Figura 2.13. Espectro DLTS de uma amostra de GaAs *tipo-p* irradiada com elétrons de 1MeV. Referência [21].

também correspondam a pares de Frenkel da rede do As^[38,21], pois suas introduções independem da forma de crescimento do cristal ou do dopante utilizado, eles recozem a 200°C (como os E's) e foi verificada anisotropia em suas taxas de introdução quando se

mudava a orientação da amostra de [111]Ga para [111]As (revelando que eles correspondem a defeitos da rede do As). Os demais picos apresentam forte variação quando se muda a forma de crescimento do cristal ou o dopante utilizado, indicando que são defeitos complexos. Todos os picos E's são observados em material *tipo-p* usando injeção de elétrons.

Tabela 2.2. Temperatura aproximada correspondente ao pico, taxa de introdução (τ) para irradiação com elétrons de 1MeV, energia aparente, seção de choque aparente e temperatura de recozimento para as armadilhas observadas em GaAs *tipo-p* irradiado com elétrons. Referência [21].

Armadilha	T ₀ (K)	τ (cm ⁻¹)	E _{pa} (eV)	σ_{pa} (cm ⁻²)	T _r (K)
H ₀	50	0,8	0,06	1,6x10 ⁻¹⁶	-
H ₁	150	0,1-0,7	0,29	5x10 ⁻¹⁵	500
H ₂	190	-	0,41	2x10 ⁻¹⁶	-
H ₃	340	~0,2	0,71	1,2x10 ⁻¹⁴	-

Como já mencionado em 2.1, Phil Won Yu et al^[33] usaram medidas de fotoluminescência (tanto *tipo-p* quanto *tipo-n*) para determinar um nível a 0,77 meV da banda de valência. Com o auxílio de espectros DLTS, medidas de seção de choque para portadores como função da temperatura e ajustes dos dados de concentração de portadores versus 1/T obtidos com Hall a temperatura variável usando alguns parâmetros calculados teoricamente, estes pesquisadores identificaram este nível como sendo correspondente à transição 0/- do anti-sítio Ga_{As}. Outra transição de estado de carga deste mesmo defeito também foi observada a uma energia superior, em ~230 meV, ao valor correspondente ao topo da banda valência. Espectros de absorção de infravermelho em amostras com diferentes concentrações relativas de Ga e As^[34] também mostraram que a concentração do

defeito, correspondente ao nível localizado a 0,077 eV da valência, aumenta com o acréscimo da concentração de Ga, e a concentração do defeito nomeado EL2^[22], que acredita-se ser relacionado a As_{Ga}, diminui nestas condições. Estas medidas foram realizadas em GaAs semi-isolante, mas para frações de As menores do que 0,47, observou-se condução *tipo-p*.

Como pode se notar pelo texto acima, há uma grande quantidade de trabalhos realizados nesta área. No entanto, ainda existem diversos pontos controversos, e o volume de dados experimentais obtidos, por incrível que pareça, é insuficiente para propiciar um entendimento adequado do processo de isolação por implantação, que possa levar a uma otimização do mesmo em etapas tecnológicas. Assim sendo, repetindo o que já foi dito no capítulo 1, a presente dissertação visa acrescentar a estes trabalhos dados que possam auxiliar na compreensão do referido processo e, juntando estes resultados obtidos anteriormente com os que serão em seqüência apresentados, estimar até que ponto o nosso atual conhecimento é capaz de descrever esta isolação e quais os próximos passos que devem ser dados para atingir este objetivo.

CAPÍTULO 3. ESPECTROSCOPIA DE TRANSIENTES DE NÍVEIS PROFUNDOS (DLTS)

3.1 Introdução

Um dos principais fatores que tornaram a microeletrônica viável foi a possibilidade de se alterar de maneira controlada as propriedades elétricas de materiais semicondutores pela introdução intencional de determinadas impurezas, átomos “estranhos” à rede do semicondutor em questão. Pensando em termos da estrutura de bandas de energia em um semicondutor, estas alterações são ocasionadas pela criação de níveis discretos dentro da banda proibida. Para o caso mais conhecido, as impurezas dopantes, estes níveis ficam bem “próximos” (em energia) a uma das bandas e damos a eles a designação de níveis rasos. Mas há também impurezas que introduzem níveis localizados mais no interior da banda proibida, e estes níveis são chamados profundos.

De forma mais geral, não são apenas impurezas que podem introduzir níveis no interior da banda proibida de um semicondutor; defeitos na rede deste último também o podem fazer. De qualquer jeito, independentemente de terem sido introduzidos por defeitos na rede ou por impurezas, intencionalmente ou não, estes níveis irão influenciar as características elétricas do material semicondutor. Por conseguinte, o estudo, a caracterização e a determinação (medida) destes níveis são de vital importância à microeletrônica.

Os níveis rasos estão associados a impurezas constituídas por um caroço iônico e um elétron (lacuna) fracamente ligado(a), substitucionais, uma vez que ocupam um lugar da rede do semiconductor em questão, e correspondem aos dopantes. Existem diversas medidas associadas à caracterização destes defeitos (a palavra defeito será usada num contexto mais geral, significando qualquer imperfeição da rede ideal do semiconductor, seja ela uma impureza substitucional, uma vacância, um intersticial, um anti-sítio ou qualquer defeito complexo). Entre elas, destacam-se a medida Hall com temperatura variável, a medida C-V e medidas óticas.

Para defeitos que introduzem níveis profundos também há uma vasta gama de medidas utilizadas (Ressonância Paramagnética de Elétrons (EPR – *Electron Paramagnetic Resonance*), aniquilação de pósitrons, Efeito Hall com temperatura variável, etc...). No entanto, a maioria delas é insensível a concentrações pequenas de defeitos (quando comparadas à concentração de dopantes), e há propriedades dos semicondutores, como o tempo de vida de portadores, que são consideravelmente modificadas por estas concentrações. Neste caso, a principal medida utilizada é a Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS – *Deep Level Transient Spectroscopy*).

Originalmente introduzida por Lang^[39], a medida DLTS permite a detecção de concentrações bem baixas de defeitos (para Si com 10^{14} átomos de boro por cm^3 , pode-se medir concentrações da ordem de 10^{10} átomos de ferro por cm^3 ^[40]), mas não está restrito a elas. O uso do CC-DLTS (DLTS de capacitância constante) permite a identificação de defeitos com concentrações parecidas com a dos dopantes.

Esta técnica possibilita a separação de diferentes níveis (desde que estes estejam suficientemente separados na banda proibida) e a obtenção de suas concentrações e dos parâmetros necessários à sua caracterização (se associada a uma medida de secção de

choque para captura de portadores como veremos mais adiante). Sua principal desvantagem é a impossibilidade de uma direta identificação defeito – nível (a menos que este já esteja tabelado) como ocorre, por exemplo, no EPR.

De qualquer forma, desde sua invenção em 1976, a DLTS vem ganhando um papel cada vez mais relevante na caracterização de semicondutores e, hoje em dia, já pode ser considerado a principal medida elétrica de níveis profundos. Novas técnicas, consideradas outros tipos de DLTS, vêm sendo desenvolvidas para aumentar a resolução desta espectroscopia, principalmente no que diz respeito a níveis com energias muito próximas, tornando esta medida uma ferramenta cada vez mais completa na identificação de defeitos em semicondutores (a identificação nível / defeito é feita através de inúmeras tabelas encontradas na literatura, e o processo de tabelamento de novos defeitos está em constante avanço).

O emprego desta medida, hoje em dia, está tão difundido no mundo que a DLTS tem sido tema de destaque em conferências internacionais^[41], existem empresas especializadas em equipamentos de DLTS e até um contrato internacional foi feito, em 1997, para a implementação de um novo tipo desta espectroscopia^[42]. No entanto, no Brasil, não é de nosso conhecimento a existência de algum sistema DLTS. Esta realidade nos deixa sempre um passo atrás não só na área de caracterização, mas, também, na área de pesquisa, devido ao grande leque de possibilidades que a DLTS abre, principalmente em conjunto com outras medidas.

Tendo isto em vista, um dos objetivos deste trabalho de dissertação, paralelo ao estudo da isolação em GaAs, foi a aquisição do conhecimento necessário à implementação de um sistema DLTS no Laboratório de Microeletrônica do Instituto de Física da UFRGS. Assim sendo, faremos uma descrição detalhada desta técnica através de uma leitura crítica

das principais fontes relacionadas ao assunto, fontes estas que serão devidamente referenciadas ao longo do texto. Visamos, com isto, não somente possibilitar uma melhor compreensão da pesquisa exposta nos demais capítulos, mas também prover possíveis futuros usuários deste novo sistema com um texto que, embora não seja completo, permita uma razoável compreensão da medida. Assim sendo, vale salientar que a leitura completa deste capítulo não é necessária para o entendimento dos capítulos que seguem (o texto introdutório até a sub-seção 3.6 já é suficiente).

Iniciaremos, em 3.2, apresentando os principais parâmetros envolvidos na dinâmica dos níveis profundos. Em seguida, apresentaremos de forma sucinta as principais propriedades de uma zona de depleção e discutiremos o comportamento dos níveis nestas regiões (em 3.3). Nas sub-seções 3.4 e 3.5, respectivamente, mostraremos como obter parâmetros de níveis profundos a partir de medidas da capacitância de uma zona de depleção à tensão reversa constante, ou a partir de medidas da tensão reversa à capacitância constante. Em 3.6, introduziremos a medida em si, apresentando o tipo mais simples de DLTS, o chamado *Box-Car*, enquanto que, em 3.7, mostraremos outros tipos mais complexos de DLTS. A interpretação correta dos dados obtidos nesta medida será apresentada em 3.8. Em 3.9, especificaremos o caso particular de centros de captura de minoritários. Na penúltima sub-seção, uma discussão de grande relevância para o restante da dissertação será feita a respeito das diferentes notações utilizadas para classificar os níveis profundos. Por fim, em 3.11, serão apresentadas algumas conclusões.

3.2 Dinâmica eletrônica de um estado profundo

Seja um dado nível profundo com energia E_t e concentração N_t correspondente a uma dada mudança no estado de carga de um certo defeito (digamos $E(0,+)$ e digamos também, por simplicidade, que estes são os únicos estados de carga possíveis para este defeito). Pode-se dizer que há duas possíveis configurações para este nível: ou ele está com o elétron (correspondendo ao defeito com estado de carga 0 no exemplo dado) e o chamaremos cheio, ou ele está sem o elétron (correspondendo à situação onde o defeito está com estado de carga $+$) e será dito vazio. Chamemos de n_t a concentração de níveis cheios;

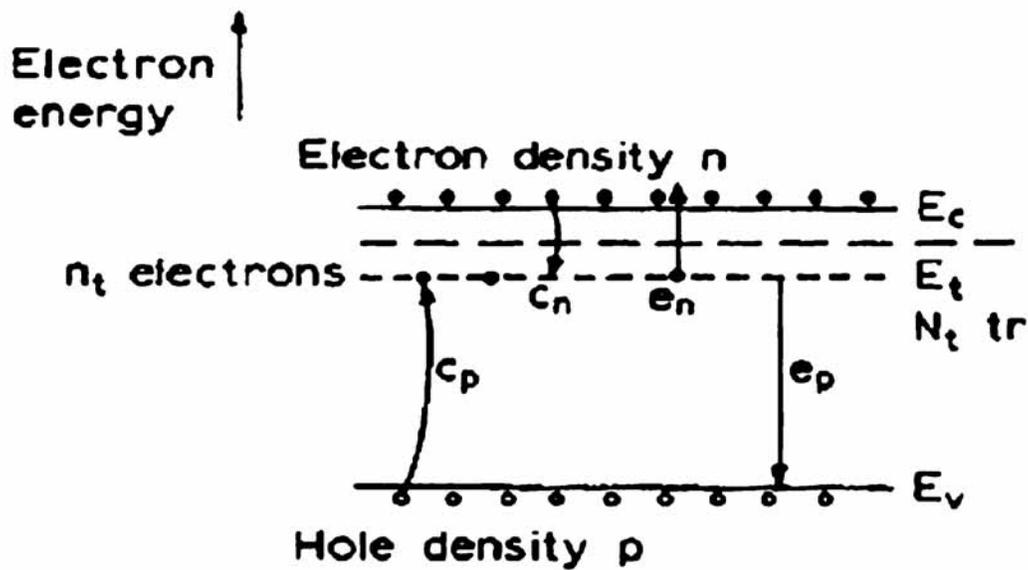


Figura 3.1 Processos de emissão e captura de elétrons e lacunas para um nível com energia E_t e concentração N_t . n_t corresponde à concentração de níveis cheios (com o elétron). Referência [43].

conseqüentemente, $N_t - n_t$ será a concentração de níveis vazios. Dado isto e imaginando que este nível apenas se “comunique” com (possa pegar elétrons de ou ceder elétrons para)

as bandas de valência e condução, há, basicamente, quatro possíveis processos que irão determinar a evolução temporal de seu estado eletrônico: a captura de elétrons da banda de condução (realizada por níveis vazios), a emissão de elétrons para a banda de condução (realizada por níveis cheios), a captura de lacunas da banda de valência (realizada por níveis cheios) e a emissão de lacunas para a banda de valência (realizada por níveis vazios). A Figura 3.1 representa todos estes possíveis processos.

Inicialmente, vamos analisar os processos de captura: de maneira mais geral, incidindo um fluxo de elétrons constante J (elétrons por unidade de tempo e por unidade de área) sobre um número N de centros de captura de elétrons, o número “ L ” de elétrons capturados por unidade de tempo será dado por:

$$L = JN\sigma_n \quad (3.1)$$

onde σ_n é chamado de secção de choque de captura de elétrons para este centro e corresponde à área efetiva em que cada centro captura o elétron.

No nosso caso, temos n elétrons por cm^3 com velocidade térmica média $\langle v_n \rangle$ (onde $\langle v_n \rangle = (3kT/m_e^*)^{1/2}$ [11]), o que corresponde a um fluxo $n\langle v_n \rangle$ (elétrons por cm^2 e por unidade de tempo). Assim sendo, o número de elétrons capturados por uma única armadilha vazia por unidade de tempo, “ c_n ”, será dado por :

$$c_n = \sigma_n n \langle v_n \rangle \quad (3.2)$$

De forma análoga,

$$c_p = \sigma_p p \langle v_p \rangle \quad (3.3)$$

Chamando, então, o número de elétrons emitidos de um nível cheio para a banda de condução por unidade de tempo de “ e_n ” e o número de lacunas emitidas de um nível

vazio para a banda de valência por unidade de tempo de “ e_p ”, podemos escrever a relação que irá reger a efetiva ocupação deste nível:

$$\frac{dn_t}{dt} = (c_n + e_p)(N_t - n_t) - (e_n + c_p)n_t \quad (3.4)$$

Em equilíbrio térmico, teremos $dn_t/dt = 0$, e o princípio do balanço detalhado deverá ser respeitado (a probabilidade de transição de um microestado “a” para um microestado “b” em um tempo t deverá ser igual à probabilidade de transição de “b” para “a” no mesmo período de tempo). Assim, não só teremos $(c_n + e_p)(N_t - n_t) - (e_n + c_p)n_t = 0$, mas, também, a probabilidade de o elétron estar no nível e ser emitido para a banda de condução após um tempo t deverá ser a mesma para o elétron estar na banda de condução e ser capturado pelo nível profundo após t (e analogamente para lacunas e a banda de valência); logo, a concentração de elétrons emitidos para a banda condução por unidade de tempo deverá ser igual à concentração de elétrons capturados da mesma banda por unidade de tempo, e a concentração de lacunas emitidas para a banda valência por unidade de tempo deverá ser igual à concentração de lacunas capturadas da mesma por unidade de tempo.

Desta forma, teremos:

$$e_n n_t = c_n (N_t - n_t) \quad (3.5)$$

e

$$e_p (N_t - n_t) = c_p n_t \quad (3.6)$$

ou

$$\frac{\hat{n}_t}{N_t} = \frac{c_n}{c_n + e_n} = \frac{e_p}{e_p + c_p} \quad (3.7)$$

onde o “ $\hat{}$ ” indica um valor em equilíbrio térmico.

Mas, no equilíbrio térmico, a ocupação do nível é dada pela estatística de Fermi-

Dirac:

$$\hat{n}_t = \int_{E_v}^{E_c} \frac{N_t(E)}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E-E_f}{kT}}} dE \quad (3.8)$$

onde E_v é a energia correspondente ao máximo da banda de valência, E_c é aquela correspondente ao mínimo da banda de condução, E_f é a energia de Fermi (no caso de semicondutores, define-se a energia de Fermi como o potencial químico dos elétrons. Esta descrição coincide com a usual definição de energia de Fermi em estado sólido para temperatura $T = 0$ K), g_0 é a degenerescência do defeito quando está no estado de carga correspondente ao nível vazio e g_1 , a degenerescência do defeito no estado de carga correspondente ao nível cheio (olhar referências [43,36 e 61]).

Aproximando a distribuição $N_t(E)$ por uma delta centrada em E_t :

$$\frac{\hat{n}_t}{N_t} = \frac{1}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t-E_f}{kT}}} \quad (3.9)$$

Usando esta expressão em (3.7), chega-se a:

$$\frac{e_n}{c_n} = \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t-E_f}{kT}} \quad (3.10)$$

e

$$\frac{e_p}{c_p} = \frac{g_1}{g_0} e^{\frac{E_f-E_t}{kT}} \quad (3.11)$$

A partir de (3.10), substituindo-se a relação para c_n (3.2) e usando $n = N_c e^{-(E_c - E_f)/kT}$ [44] para semicondutores não degenerados e em equilíbrio térmico, podemos encontrar a seguinte descrição para e_n :

$$e_n(T) = \sigma_n \langle v_n \rangle \frac{g_0}{g_1} N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} \quad (3.12)$$

Analogamente:

$$e_p(T) = \sigma_p \langle v_p \rangle \frac{g_1}{g_0} N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}} \quad (3.13)$$

Retomando o que foi dito anteriormente, diversos parâmetros caracterizam um nível profundo: sua concentração, sua energia relativa a uma das bandas, suas taxas de emissão e captura de portadores e suas secções de choque para a captura dos mesmos. Felizmente, como mostrado nas relações acima, estes parâmetros não são independentes; de forma que o conhecimento de sua energia E_t , concentração (N_t) e das secções de choque σ_n e σ_p são suficientes para completamente caracterizar este nível.

Os valores de e_n , e_p , c_n e c_p irão, então, ditar a dinâmica de um estado profundo. A esta altura, convém definir os principais comportamentos que podem ser observados para os níveis profundos^[11]: centros de captura de elétrons, centros de captura de lacunas, centros de geração e centros de recombinação. O motivo para o uso da palavra “centros de captura” ao invés de armadilhas, nestes casos, ficará claro mais adiante. Como representado na Figura 3.2, centros de captura de elétrons são definidos como aqueles estados que se comunicam basicamente com a banda de condução. Para que isto ocorra, então, é necessário que o nível, quando cheio, tenha uma probabilidade bem maior de emitir seu elétron

para esta última banda do que de capturar uma lacuna da banda de valência; logo, $e_n \gg c_p$. De maneira análoga, quando este nível estiver vazio, deverá ter maior probabilidade de

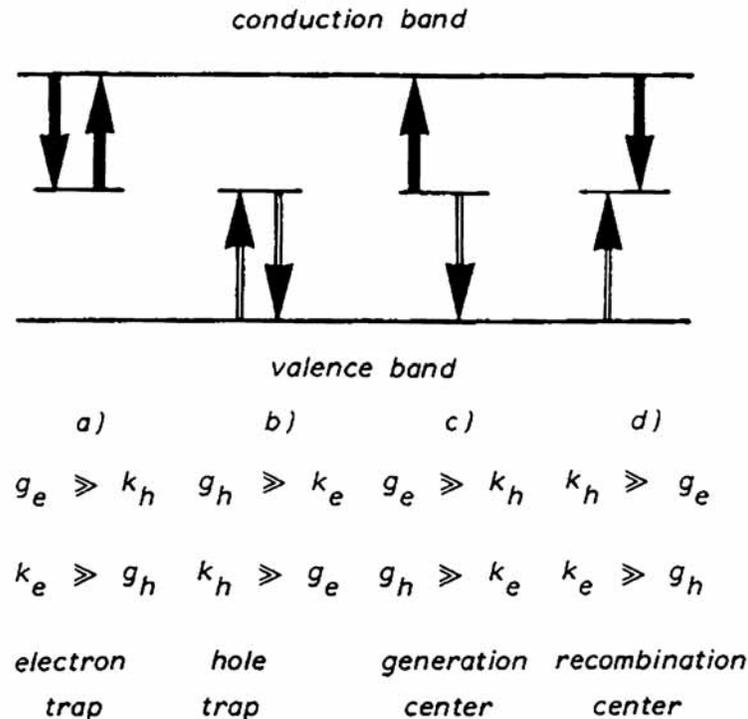


Figura 3.2 Definição de centros de captura de elétrons e de lacunas, centros de geração e centros de recombinação. Referência [11].

capturar um elétron da condução do que emitir uma lacuna para a valência: $c_n \gg e_p$. Centros de captura de lacunas, por sua vez, correspondem à situação em que o nível comunica-se apenas com a banda de valência. Neste caso, teremos: $c_p \gg e_n$ e $e_p \gg c_n$. Um centro de recombinação é definido como um nível profundo que, quando cheio, tem $c_p \gg e_n$ e, quando vazio, tem $c_n \gg e_p$. Por fim, um centro de geração é tal que $e_n \gg c_p$ e $e_p \gg c_n$.

Como c_n e c_p dependem das concentrações de portadores n e p , o comportamento exibido por um nível profundo depende das características da amostra. Inclusive, como veremos mais adiante, dentro de uma região de carga espacial (criada, por exemplo, por um

contato Schottky polarizado reversamente), um mesmo nível pode apresentar diferentes comportamentos.

Consideremos, inicialmente, a situação de equilíbrio térmico:

$$\frac{e_n}{c_p} = \frac{g_0 \langle v_n \rangle \sigma_n N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}}}{g_1 \langle v_p \rangle \sigma_p p} \quad (3.14)$$

Mas no equilíbrio e para semicondutores não degenerados, temos^[44]:

$$p = N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}} \quad (3.15)$$

; logo:

$$\frac{e_n}{c_p} = \frac{g_0 \langle v_n \rangle \sigma_n N_c e^{\frac{E_i + E_f - E_c - E_v}{kT}}}{g_1 \langle v_p \rangle \sigma_p N_v} \quad (3.16)$$

e, como o nível intrínseco^[44] é dado por

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right), \quad (3.17)$$

chega-se a:

$$\frac{e_n}{c_p} = \frac{g_0 \langle v_n \rangle \sigma_n}{g_1 \langle v_p \rangle \sigma_p} e^{\frac{E_i + E_f - 2E_i}{kT}} \quad (3.18)$$

Seguindo passos análogos, mostra-se que:

$$\frac{c_n}{e_p} = \frac{g_0 \langle v_n \rangle \sigma_n}{g_1 \langle v_p \rangle \sigma_p} e^{\frac{E_i + E_f - 2E_i}{kT}} \quad (3.20)$$

Definindo, então, E_1 como:

$$E_1 \equiv E_i + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{\langle v_p \rangle \sigma_p g_1}{\langle v_n \rangle \sigma_n g_0}\right), \quad (3.21)$$

as relações $e_n/c_p \gg 1$ e $c_n/e_p \gg 1$ serão satisfeitas se:

$$\frac{E_t + E_f}{2} \gg E_1 \quad (3.22)$$

Esta situação corresponde a um centro de captura de elétrons. Para um centro de captura de lacunas, por sua vez, teremos:

$$\frac{E_t + E_f}{2} \ll E_1 \quad (3.23)$$

Evidentemente, para a situação de equilíbrio térmico, os níveis não podem, por definição, atuar como centros de geração ou recombinação. Isto porque, pelo princípio do balanço detalhado, (3.5) e (3.6) têm que ser obedecidas $\left(\frac{e_n}{c_n} = \frac{c_p}{e_p} \rightarrow \frac{e_n}{c_p} = \frac{c_n}{e_p} \right)$ e, conseqüentemente, se a taxa de captura de um tipo de portador é muito maior que a taxa de emissão do outro tipo de portador, é necessário que a taxa de emissão deste primeiro seja muito maior que a captura do último; logo, dentro do grupo das configurações definidas, somente configurações de centros de captura são possíveis neste caso.

Como veremos mais adiante, fora do equilíbrio, as outras configurações também serão possíveis. Vale salientar que há possíveis situações em que o comportamento de um nível não corresponderá a nenhuma destas configurações.

Para uma situação fora do equilíbrio térmico, a evolução temporal de n_t será dada por (3.4): $\frac{dn_t}{dt} = (c_n + e_p)(N_t - n_t) - (e_n + c_p)n_t$. Esta equação diferencial, de forma mais rigorosa, não é linear porque as concentrações de portadores livres n e p (presentes em c_n e c_p por (3.2) e (3.3)) dependem de $n_t(t)$. No entanto, se considerarmos N_t muito menor que a concentração efetiva de dopantes (onde se entenda por concentração efetiva a subtração da concentração de dopantes do tipo correspondente aos portadores majoritários pela

concentração de dopantes do outro tipo), podemos tomar n e p na relação acima como constantes. Assim sendo, $n_i(t)$ será dado por:

$$n_i(t) = \frac{c_n + e_p}{c_n + e_p + c_p + e_n} N_i - \left\{ \frac{c_n + e_p}{c_n + e_n + c_p + e_p} N_i - n_i(0) \right\} e^{-(c_n + c_p + e_n + e_p)t} \quad (3.24)$$

Embora não seja completamente geral por limitar N_i a valores bem menores que a dopagem efetiva e considerar apenas processos térmicos (ignorando processos óticos), esta relação demonstra o comportamento básico que se observa para n_i . Ela nos mostra que, uma

vez retirada da sua situação estacionária $n_i = \frac{c_n + e_p}{c_n + e_p + c_p + e_n} N_i$, esta concentração

retorna a este valor exponencialmente onde o tempo característico desta exponencial será dado por $\tau^{-1} = e_n + c_n + e_p + c_p$. A base de muitas medidas de níveis profundos é justamente observar este tempo característico para retirar informações sobre as taxas de emissão e captura de portadores.

Uma vez introduzidas as relações básicas que regem a dinâmica da ocupação dos estados profundos, podemos passar a tratar de casos mais específicos que, como veremos na próxima sub-seção, nos permitirão, experimentalmente, determinar os parâmetros presentes nestas relações.

3.3 Comportamento de níveis profundos em uma camada de depleção

3.3.1 Camadas ou zonas de depleção

Quando um semicondutor *tipo-p* e um *tipo-n* (vamos considerar, por simplicidade, dopagem uniforme) são “colocados em contato”, as lacunas majoritárias do *tipo-p* difundem em direção ao material *tipo-n* e os elétrons, majoritários no material *tipo-n*, difundem em direção ao material *tipo-p*. Ao atravessarem a “fronteira” entre os materiais, os portadores rapidamente se recombinam com os majoritários (de tipo agora oposto ao seu) do novo material, criando, nesta região, uma zona onde a concentração das cargas fixas correspondentes aos dopantes ionizados se torna muito maior que a concentração de portadores livres. Isto resulta em duas regiões onde, localmente, não mais há efetiva conservação de carga. Como representado na Figura 3.3, o campo elétrico não será nulo nestas regiões, e tenderá a “empurrar” os portadores no sentido contrário à difusão. Quando este campo for suficientemente forte para conter a difusão dos majoritários do outro lado, chegaremos à situação de equilíbrio. Na Figura 3.3, está representada esta situação de equilíbrio. À região que, praticamente desprovida de portadores livres, apresenta carga efetiva não nula, dá-se o nome de zona de depleção (ou camada de depleção ou região de carga espacial). A mesma configuração pode ser descrita através de um diagrama de bandas de energia como apresentado na Figura 3.4.

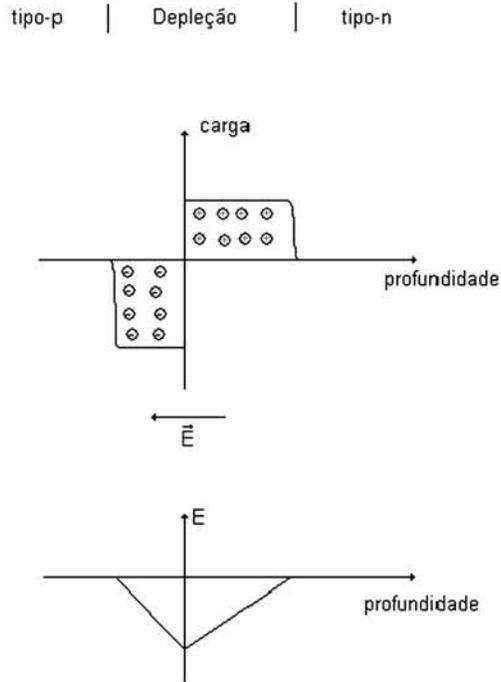


Figura 3.3. Distribuição de carga e campo elétrico em uma zona de depleção formada por uma junção p-n.

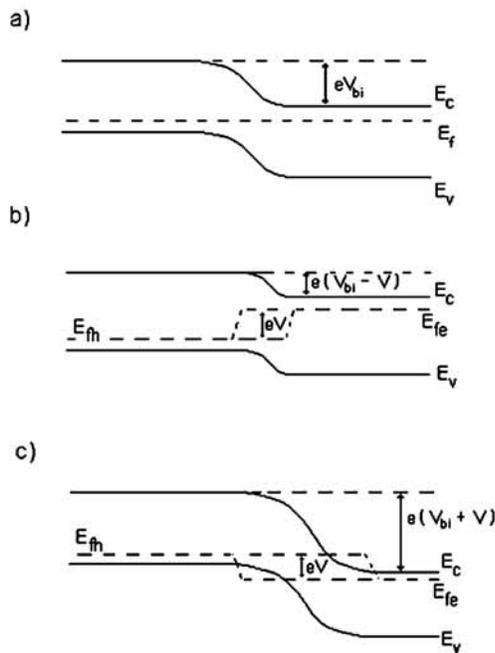


Figura 3.4. Diagrama de bandas para uma junção p-n. (a) equilíbrio térmico, (b) V direta aplicada $0 < V < V_{bi}$ e (c) tensão reversa aplicada $V < 0$ (o valor V no gráfico deve ser considerado $|V|$).

Na Figura 3.4 (a) está representada a barreira de altura eV_{bi} que impede que elétrons do lado *tipo-n* difundam para o lado *tipo-p* e lacunas deste último lado difundam para o lado *tipo-n*. As situações (b) e (c) correspondem ao regime estacionário observado quando uma tensão V externa é aplicada no lado *tipo-p*, deixando-se o lado *tipo-n* aterrado. Note que, para $0 < V < V_{bi}$ (caso (b)), a barreira tem sua altura reduzida de eV . Para $V > V_{bi}$, se observará corrente direta passando pela junção. Para $V < 0$ (caso (c)), diz-se que o diodo está reversamente polarizado, e a altura da barreira é incrementada em eV . Nesta figura também estão representados os quase-níveis de Fermi de elétrons e lacunas (E_{fe} e E_{fh} respectivamente). Estas energias ^[44,45,43] são definidas de forma que:

$$n \equiv n_i e^{\frac{E_{fe} - E_i}{kT}} \quad (3.25)$$

$$p \equiv n_i e^{\frac{E_i - E_{fh}}{kT}} \quad (3.36)$$

mesmo fora do equilíbrio térmico (n_i é a concentração de lacunas e elétrons para semiconductor intrínseco^[44]).

Outro tipo de junção muito comum é a junção metal-semicondutor. Estas junções são caracterizadas pela altura da barreira ϕ_b dada pela diferença entre a função trabalho ϕ_m do metal e a afinidade eletrônica do semiconductor χ_s (desconsiderando-se a pequena queda de potencial no metal V_m) como representado na Figura 3.5. Estas últimas duas grandezas, por sua vez, são definidas em relação ao nível de vácuo (correspondente à energia de um

elétron em repouso fora do material). A função trabalho do metal é a energia necessária para “levar” um elétron do nível de Fermi do metal E_f^m ao nível do vácuo (retirar um elétron do metal) e a afinidade eletrônica do semiconductor é a energia necessária para colocar um elétron da banda de condução no nível de vácuo. Considerando, então, o nível de vácuo contínuo na interface, ϕ_m e χ_s constantes ao longo de todo o material (com exceção de uma região muito próxima à interface onde ϕ_m sofre uma pequena variação) e alinhando os níveis de Fermi dos dois materiais (condição de equilíbrio térmico ^[44]), se constrói o diagrama de bandas representado na Figura 3.5.

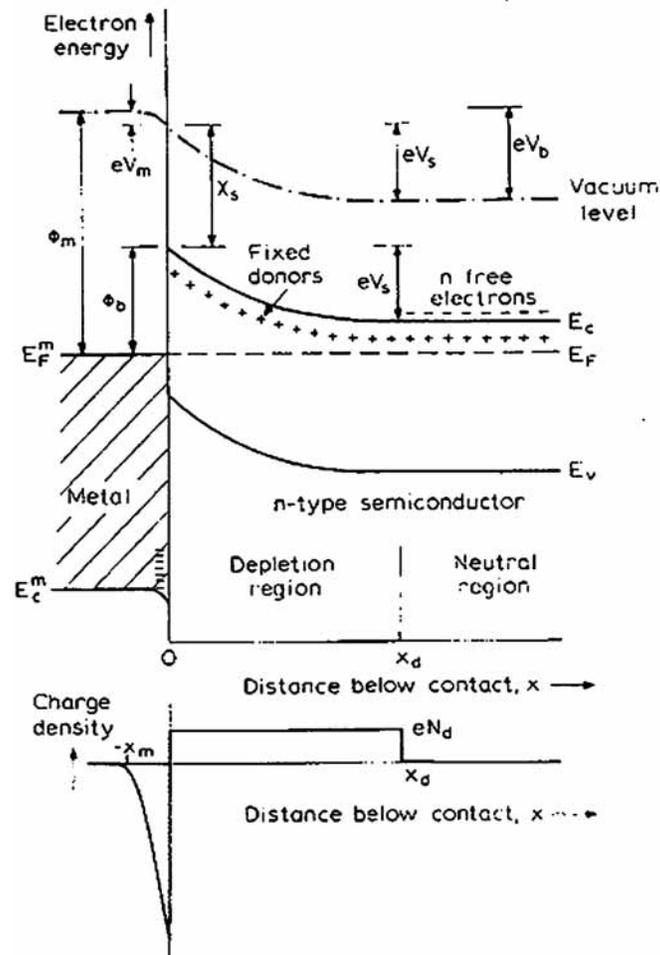


Figura 3.5. Diagrama de bandas de uma junção metal-semicondutor e o associado perfil de densidade de carga para concentrações uniformes de dopantes no semiconductor. Referência [43].

Uma vez introduzidas as junções que serão utilizadas, podemos definir a largura da zona de depleção, calculá-la e, após, determinar a capacitância associada a esta região.

Partiremos da equação de Poisson unidimensional para o potencial ψ :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \rho(x) \quad (3.27)$$

Integrando esta relação entre um ponto anterior à junção ($x = 0$) e suficiente afastado da mesma (o chamaremos $x = -\infty$) e um ponto y qualquer:

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_y = -\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_{-\infty}^y \rho(z) dz = -\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} u(y) \quad (3.28)$$

Integrando esta nova relação entre $-\infty$ e x :

$$\psi(x) - \psi(-\infty) = -\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_{-\infty}^x u(y) dy \quad (3.29)$$

Mas

$$\int_{-\infty}^x u(y) dy = yu(y) \Big|_{-\infty}^x - \int_{-\infty}^x y \frac{du(y)}{dy} dy = x \int_{-\infty}^x \rho(z) dz - \int_{-\infty}^x z \rho(z) dz. \quad (3.30)$$

Podem-se definir, então, os limites da zona de depleção como o primeiro valor de $x < 0$ onde $d\psi/dx = 0$ (numa junção p-n, chama-lo-emos $-x_p$ e, num contato metal-semicondutor *tipo-n*, $-x_m$) e o primeiro valor de $x > 0$ em que também se tem $d\psi/dx = 0$ (o chamaremos de x_n para a junção p-n e x_d para a junção metal-semicondutor (ou contato Schottky)), onde $x = 0$ é a posição correspondente à junção. Assim sendo, substituiremos $-\infty$ por $-x_p$ (ou $-x_m$). Colocando, então, o referencial $\psi(x) = 0$ para valores de x maiores ou

iguais a x_n (ou x_d) e percebendo que $\int_{-x_p(-x_m)}^{x_n(x_d)} \rho(z) dz = 0$ (basta imaginar uma superfície

gaussiana com secção transversal correspondente à área da junção e extremidades em $x = -x_p, -x_m$ e $x = x_n, x_d$. O campo elétrico, por aproximação, só tem componentes na direção x e, nos valores correspondentes a estas extremidades, é nulo, de forma que a carga total dentro desta superfície também o deve ser), teremos:

$$\psi(x_n) - \psi(-x_p) = -\psi(-x_p) \equiv V = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_{-x_p}^{x_n} x\rho(x)dx \quad (3.31)$$

ou

$$-\psi(-x_m) \equiv V = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_{-x_m}^{x_d} x\rho(x)dx \quad (3.32)$$

Mas, para este último caso (junção Schottky) ou para o caso em que uma das partes da junção p-n é muito mais dopada do que a outra, se pode desprezar a espessura da depleção do lado muito fortemente dopado (ou do metal) em relação à espessura da depleção do outro lado da junção. Assim, para um diodo Schottky, teremos:

$$-\psi(0) \equiv V = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_0^{x_d} x\rho(x)dx \quad (3.33)$$

Considerando que as dopagens no semiconductor sejam uniformes (concentração de aceitadores no *tipo-p* dada por N_a e de doadores no *tipo-n* dada por N_d), chegaremos, para a junção p-n, a:

$$V = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left\{ (-N_a) \int_{-x_p}^0 xdx + N_d \int_0^{x_n} xdx \right\} = \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} \{x_p^2 N_a + x_n^2 N_d\} \quad (3.34)$$

Usando uma superfície gaussiana como descrito acima para este caso, é fácil

mostrar que $N_a x_p = N_d x_n$. Conseqüentemente, $x_p^2 = (x_n + x_p)^2 \frac{N_d^2}{(N_a + N_d)^2}$ e

$x_n^2 = (x_n + x_p)^2 \frac{N_a^2}{(N_a + N_d)^2}$. Logo:

$$x_n + x_p = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e} \left(\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) V} \quad (3.35)$$

Para um diodo Schottky, por sua vez (considerando que o semiconductor tem dopagem constante N_d):

$$V = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} N_d \frac{x_d^2}{2} \rightarrow x_d = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{eN_d} V} \quad (3.36)$$

A partir de agora, nos fixaremos apenas neste exemplo, o de uma junção Schottky com um semiconductor *tipo-n*, que, por sua vez, é completamente análoga a uma junção p^+-n . Antes de prosseguir, porém, vale lembrar que $V \equiv -\psi(0) = |V_b| - V_{ap}$, onde V_b é a tensão correspondente ao dobramento das bandas com tensão 0 aplicada ($eV_b = \phi_b - (E_c(x_d) - E_f)$) e V_{ap} é a própria tensão externa aplicada (sendo considerado $V_{ap} < |V_b|$, com valores positivos correspondendo a tensão direta e valores negativos a tensão reversa).

Podemos, então, determinar a capacitância de uma região de depleção. Como estamos trabalhando sempre com modelos unidimensionais, vamos chamar de “Q” a carga por unidade de área. Da definição de capacitância, teremos:

$$C = A \frac{dQ}{dV} \quad (3.37)$$

onde A é a área do diodo Schottky (a área do contato). Como V_b é constante, dV é, na verdade, $-dV_{ap}$. Precisamos, assim, de uma relação $Q = Q(V)$. Novamente, tomaremos o

potencial $\psi(x)$ tal que $\psi(x_d) = 0$ e $\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_d} = 0$, de forma que podemos escrever:

$$-e\psi(x) = E_c(x) - E_c(x_d) \quad (3.38)$$

Considerando dopagem uniforme:

$$\rho(x) = e[N_d - n(x)] \quad (3.39)$$

Mas, como vimos, $n(x)$ é dado por (3.25):

$$n(x) = n_i e^{\frac{E_{fe} - E_i(x)}{kT}} = N_c e^{\frac{E_{fe} - E_c(x)}{kT}} = N_c e^{\frac{E_{fe} - (E_c(x) - E_c(x_d)) - E_c(x_d)}{kT}} = n_0 e^{\frac{e\psi(x)}{kT}} \quad (3.40)$$

onde n_0 é a concentração de elétrons livres no material neutro.

Por conseguinte, a equação de Poisson será dada por:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left\{ N_d - n_0 e^{\frac{e\psi(x)}{kT}} \right\} \quad (3.41)$$

A partir desta relação, iremos obter o campo elétrico $E(x)$ e, mais uma vez especificando uma superfície gaussiana com secção transversal correspondente à área do contato do diodo Schottky e que, em profundidade, vai de 0 até x_d , acharemos Q pela

aplicação da Lei de Gauss: $\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int \rho dv = \oint E(x) dS \rightarrow \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} AQ = A|E(0)|$.

Para achar o campo elétrico a partir de (3.41), no entanto, é necessário fazer uma pequena mudança de variáveis^[43]: sejam $U = \frac{e\psi(x)}{kT}$ e $F = -\frac{dU}{dx}$, de forma que

$$\frac{d^2U}{dx^2} = -\frac{d}{dx}\left(-\frac{dU}{dx}\right) = -\frac{dU}{dx} \frac{d}{dU}\left(-\frac{dU}{dx}\right) = F \frac{dF}{dU}.$$

Reescrevendo (3.41):

$$\frac{kT}{e} F \frac{dF}{dU} = -\frac{e}{\epsilon\epsilon_0} (N_d - n_0 e^U) \quad (3.42)$$

Integrando esta relação entre $U(x = x_d)$ (lembrando que $\psi(x_d) = \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=x_d} = 0$;

logo, $F(x_d) = 0$ e $U(x_d) = 0$), e um ponto $U(x)$ tal que $0 \leq x \leq x_d$:

$$\frac{kT}{2e} F^2 = -\frac{e}{\epsilon\epsilon_0} [N_d U - n_0 (e^U - 1)] \quad (3.43)$$

Mas $E(x) = -\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{kT}{e} F$, de forma que podemos reescrever (3.43) como

$$E^2 = -\frac{2kT}{\epsilon\epsilon_0} \left[N_d \frac{e\psi(x)}{kT} - n_0 \left(e^{\frac{e\psi(x)}{kT}} - 1 \right) \right] \quad (3.44)$$

Já que $Q = \epsilon\epsilon_0 |E(0)|$ e $\psi(0) = V$, podemos chegar à expressão para Q :

$$Q = \sqrt{2\epsilon\epsilon_0 kT N_d e \left[V - \frac{kT}{e} \left(1 - e^{-\frac{eV}{kT}} \right) \right]} \quad (3.45)$$

onde foi assumido $n_0 = N_d$ e lembrando que V , por definição, é maior que zero.

Por fim, fazendo $C = A \frac{dQ}{dV}$:

$$C = A \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 N_d e \frac{kT}{2}} \frac{1 - e^{-\frac{eV}{kT}}}{\sqrt{V - \frac{kT}{e} \left(1 - e^{-\frac{eV}{kT}}\right)}} \quad (3.46)$$

Esta expressão pode ser simplificada, percebendo-se que, à temperatura ambiente,

$\frac{kT}{e} \approx 0,025$ Volts e, para uma tensão reversa aplicada, V é pelo menos maior que $\phi_b \approx 0,7$

Volts. Assim, pode-se, na prática, utilizar a expressão simplificada:

$$C = A \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 e N_d}{2V}} \quad (3.47)$$

que, combinada com (3.36) $V = eN_d \frac{x_d^2}{2\varepsilon \varepsilon_0}$, resulta em uma expressão idêntica à obtida

para um capacitor de placas paralelas:

$$C = \varepsilon \varepsilon_0 \frac{A}{x_d} \quad (3.48)$$

3.3.2 Níveis profundos na depleção

Abordados os principais aspectos de uma camada de depleção, podemos passar ao estudo do comportamento dos níveis profundos em camadas de depleção. Manteremos o exemplo utilizado até agora: um diodo Schottky cujo semiconductor é *tipo-n*. Como visto anteriormente, no equilíbrio térmico, níveis com $\frac{E_t + E_f}{2} \gg E_1$ atuarão como centros de captura de elétrons, comunicando-se quase que exclusivamente com a banda de condução e

níveis com $\frac{E_t + E_f}{2} \ll E_1$ atuarão como centros de captura de lacunas, comunicando-se apenas com a banda de valência. Mas, para o caso de um diodo Schottky, mesmo no equilíbrio térmico, há curvamento de bandas, de forma que, não mais teremos E_t uniforme, mas sim $E_t(x)$. Esta situação está representada na Figura 3.6. Note-se que a ocupação do

nível representado na figura é dada por (3.9) $n_t(x) = \frac{N_t}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t(x) - E_f}{kT}}}$. Assim, no *bulk*

(região para profundidades $x > x_{d0}$), $E_t + E_f \gg 2E_1$, o nível atua como centro de captura de elétrons e $n_t \approx N_t$ (porque $E_f - E_t \gg kT$). Entrando na zona de depleção ($x < x_{d0}$), ainda há uma região em que $E_t < E_F$, o nível ainda está cheio e atua como centro de captura de elétrons. A distância entre x_{d0} e o ponto x_1 em que $E_t = E_f$ é chamada λ . Para $x \sim x_1$, n_t diminui bruscamente, podendo ser considerado efetivamente igual a 0 para $x < x_1$. Observe-se também que, na região $x \sim x_2$, a condição $E_t + E_f \gg 2E_1$ deixa de ser satisfeita e o nível passa a se comunicar com ambas as bandas. Há ainda uma região em $x < x_1$ na qual $E_t + E_f \ll 2E_1$ e o nível porta-se como um centro de captura de lacunas.

Esta é a descrição básica para um nível com $E_t > E_1$ no equilíbrio térmico. Saindo desta situação de equilíbrio, podemos considerar a descrição do estado estacionário obtido quando aplicamos uma tensão reversa no diodo (Figura 3.6 (b)). Embora, neste caso, não estejamos mais autorizados a utilizar as relações obtidas para o equilíbrio (3.9), (3.18) e (3.20), suporemos que as taxas de emissão sejam independentes do campo elétrico (limite de campos fracos) e vamos utilizar as mesmas relações obtidas para estas no equilíbrio com

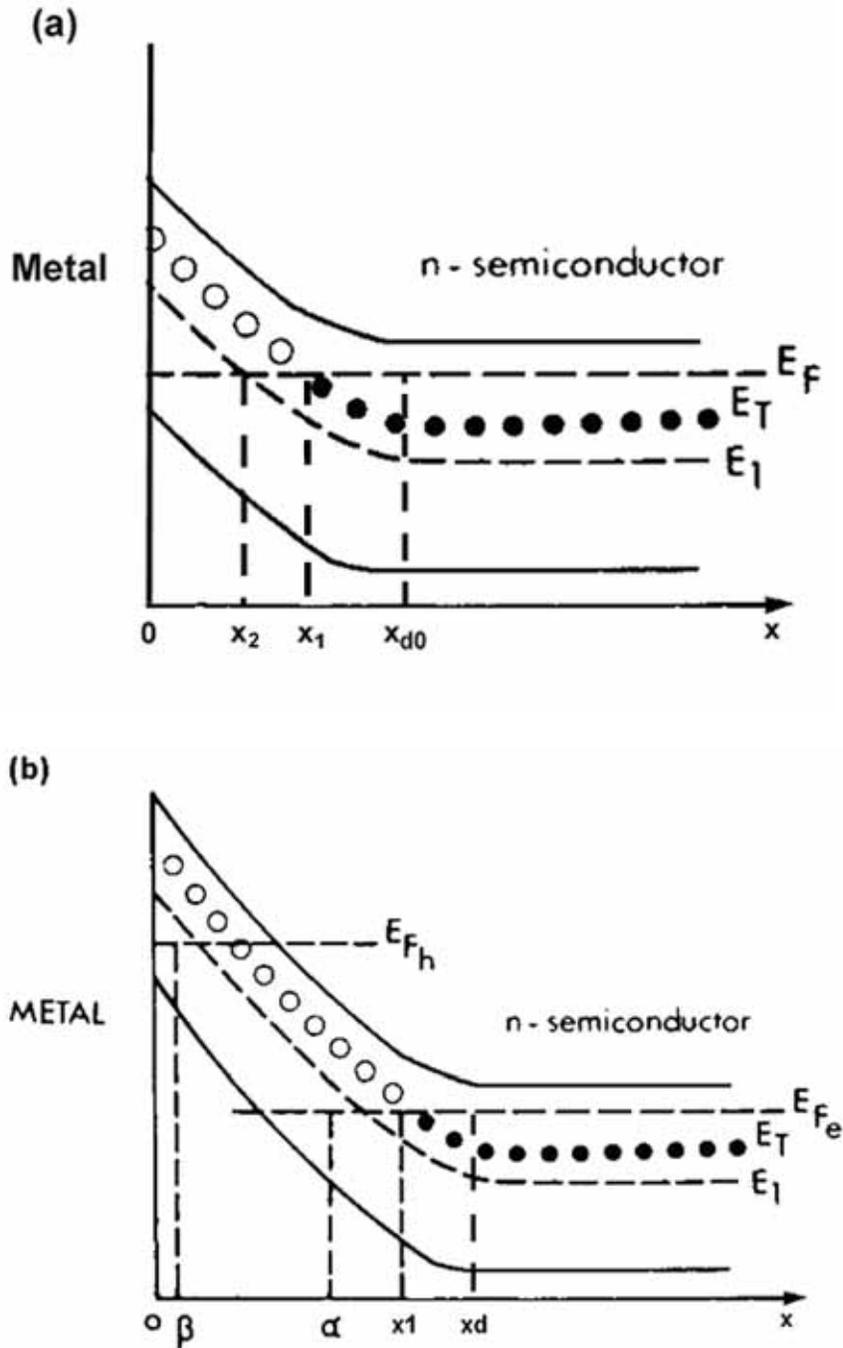


Figura 3.6 (a) Centro de captura de elétrons em uma junção metal - semiconductor *tipo-n* para a situação de equilíbrio (tensão 0 aplicada). x_{d0} é a profundidade da camada de depleção e x_1 é a profundidade em que o nível $E_t(x)$ cruza o nível de Fermi E_f . As bolas cheias correspondem a níveis cheios, e as vazias, a vazios. (b) Centro de captura de elétrons em uma junção metal - semiconductor *tipo-n* para a situação de tensão reversa aplicada. x_d é a profundidade da depleção, x_1 , a profundidade em que E_t cruza E_{fe} , α é a profundidade onde $E_t + E_{fe} = 2E_1$ e β , aquela em que $E_t + E_{fh} = 2E_1$. Referência [11].

as devidas concentrações de portadores para a situação fora do equilíbrio. Assim, se usarmos

$$n(x) = n_i e^{\frac{E_{fe}(x) - E_i(x)}{kT}} = N_c e^{\frac{E_c(x) - E_{fe}(x)}{kT}} \quad (3.25)$$

e

$$p(x) = n_i e^{\frac{E_i(x) - E_{fh}(x)}{kT}} = N_v e^{\frac{E_v(x) - E_{fh}(x)}{kT}}, \quad (3.36)$$

mantendo (3.12,13)

$$e_n(T) = \sigma_n \langle v_n \rangle \frac{g_0}{g_1} N_c e^{\frac{E_c - E_i}{kT}} \quad (3.12)$$

$$e_p(T) = \sigma_p \langle v_p \rangle \frac{g_1}{g_0} N_v e^{\frac{E_i - E_v}{kT}}, \quad (3.13)$$

chegaremos às seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{e_n}{c_p}(x) &= \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle}{\sigma_p \langle v_p \rangle p(x)} \frac{g_0}{g_1} N_c e^{\frac{E_c - E_i}{kT}} = \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle N_c g_0}{\sigma_p \langle v_p \rangle N_v g_1} e^{\frac{-E_c - E_v + E_i + E_{fh}}{kT}} \\ \rightarrow \frac{e_n}{c_p}(x) &= \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle g_0}{\sigma_p \langle v_p \rangle g_1} e^{\frac{E_i(x) + E_{fh}(x) - 2E_i(x)}{kT}} \end{aligned} \quad (3.49)$$

e

$$\frac{c_n}{e_p}(x) = \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle g_0}{\sigma_p \langle v_p \rangle g_1} e^{\frac{E_i(x) + E_{fe}(x) - 2E_i(x)}{kT}} \quad (3.50)$$

onde E_i foi definido em (3.17).

Estas relações irão determinar o comportamento do nível como função da profundidade x . Por exemplo, para $\frac{e_n}{c_p}(x) \gg 1$, teremos:

$$\frac{E_t(x) + E_{fh}}{2} \gg E_1(x) \quad (3.51)$$

com $E_1(x)$ definido em (3. 21).

Já para $\frac{c_n}{e_p}(x) \gg 1$:

$$\frac{E_t(x) + E_{fe}}{2} \gg E_1(x) \quad (3.52)$$

Olhando na Figura 3.6 (b), há quatro valores de x destacados: x_d (o limite da depleção), x_1 (onde $E_t = E_{fe}$), α (onde $E_t + E_{fe} = 2E_1$) e β (onde $E_t + E_{fh} = 2E_1$). Para $x > x_1$, (3.51,52) são satisfeitas e o nível atua como centro de captura de elétrons, comunicando-se apenas com a banda de condução. Assim, para o estado estacionário, teremos $c_n(N_t - n_t) = e_n n_t$, de forma que:

$$n_t = N_t \frac{c_n}{c_n + e_n} = N_t \frac{n}{n + \frac{g_0}{g_1} N_c e^{\frac{E_c - E_t}{kT}}} = N_t \frac{1}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t - E_{fe}}{kT}}} \quad (3.53)$$

Esta é exatamente a expressão do equilíbrio com E_f substituído por E_{fe} . Como, na região em questão, $E_t < E_{fe}$, pode-se aproximar $n_t (x > x_1) = N_t$.

Para $x_1 \leq x \leq \alpha$, a relação (3.52) já não é satisfeita, de forma que não podemos desprezar e_p em relação a c_n . Nesta região, evidentemente, o nível não mais atua como um centro de captura de elétrons. No estado estacionário, teremos $(c_n + e_p)(N_t - n_t) = e_n n_t$, ou:

$$n_t = N_t \frac{c_n + e_p}{c_n + e_p + e_n} = N_t \left(\frac{1}{1 + \frac{e_p}{c_n} + \frac{e_n}{c_n}} + \frac{1}{\frac{c_n}{e_p} + 1 + \frac{e_n}{e_p}} \right) \quad (3.54)$$

A relação entre e_p e c_n é dada por (3.50), e

$$\frac{e_n}{e_p} = \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle N_c g_0^2}{\sigma_p \langle v_p \rangle N_v g_1^2} e^{\frac{-E_c - E_v + 2E_i}{kT}} = \frac{\sigma_n \langle v_n \rangle g_0^2}{\sigma_p \langle v_p \rangle g_1^2} e^{\frac{2E_i - E_i}{kT}} = \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{2E_i - E_1}{kT}} \quad (3.55)$$

Assim sendo,

$$n_t = N_t \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{2E_1 - E_t - E_{fe}}{kT}} + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t - E_{fe}}{kT}}} + \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t + E_{fe} - 2E_1}{kT}} + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{2E_t - E_1}{kT}}} \right) \quad (3.56)$$

Como, nesta região, $E_t > E_{fe}$ e E_t é sempre maior que E_1 , teremos, efetivamente, $n_t = 0$.

Esta relação continua válida para valores de $x < \alpha$ até uma posição em que

$$\frac{E_t(x) + E_{fe}}{2} \ll E_1(x). \text{ Nesta região, o nível atuará como centro de geração } (e_p, e_n \gg c_n, c_p)$$

e teremos $n_t = \frac{N_t}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{2E_t - E_1}{kT}}} = 0$ porque $E_t > E_1$.

Por fim, na região $x < \beta$, teremos $\frac{E_t(x) + E_{fe}}{2} \ll E_1(x)$ e $\frac{E_t(x) + E_{fn}}{2} \ll E_1(x)$.

O nível atuará como um centro de captura de lacunas, e sua ocupação no estado estacionário será dada por $c_p n_t = e_p (N_t - n_t)$, de forma

$$\text{que } n_t = N_t \frac{e_p}{e_p + c_p} = N_t \frac{1}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t - E_{fn}}{kT}}} = 0 \text{ porque } E_t > E_{fn} \text{ nesta região.}$$

Para o caso de um nível com $E_t < E_1$, no entanto, a situação é diferente. Como mostrado na Figura 3.7 (a), a situação de equilíbrio é análoga, com $n_t = N_t$ para $E_t < E_f$ e n_t

$= 0$ para $E_t > E_f$. No entanto, a situação com tensão reversa aplicada (Figura 3.7 (b)) não é semelhante à obtida para o caso $E_t > E_1$. Há, novamente, algumas profundidades características marcadas na figura: x_1 corresponde à profundidade em que $E_t = E_{fe}$, x_2 àquela em que $E_{fh} + E_t$ deixa de ser muito maior que $2E_1$ e x_3 é a profundidade em que $E_t = E_{fh}$.

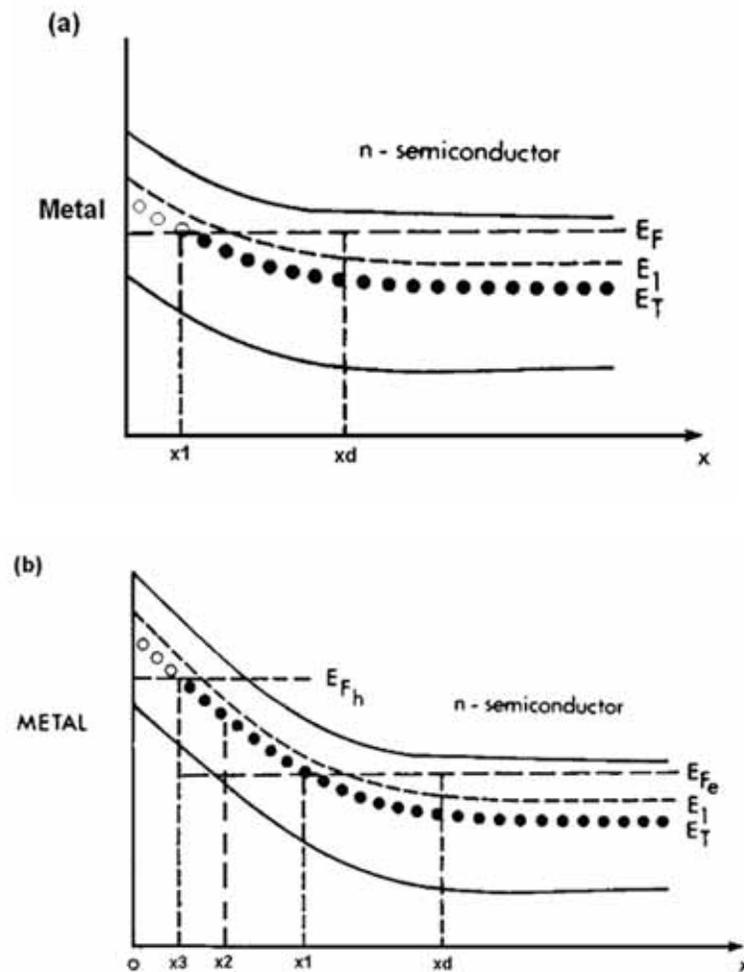


Figura 3.7. (a) Centro de captura de lacunas em uma junção metal - semiconductor *tipo-n* para a situação de equilíbrio (tensão 0 aplicada). x_d é a profundidade da camada de depleção e x_1 é a profundidade em que o nível $E_t(x)$ cruza o nível de Fermi E_f . As bolas cheias correspondem a níveis cheios, e as vazias, a vazias. (b) Centro de captura de lacunas em uma junção metal - semiconductor *tipo-n* para a situação de tensão reversa aplicada. x_d é a profundidade da depleção, x_1 , a profundidade em que E_t cruza E_{fe} , x_2 simboliza a região em que $E_t + E_{fh}$ deixa de ser muito maior que $2E_1$ e x_3 corresponde à profundidade em que E_t cruza E_{fh} . Referência [11].

Para $x > x_1$, devemos usar a relação (3.56), uma vez que (3.51) é válida, mas (3.52) não. Como temos E_t menor que ambos E_1 e E_{fe} nesta região, podemos desprezar a última exponencial de cada denominador de (3.56), resultando em:

$$n_t = N_t \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{2E_1 - E_t - E_{fe}}{kT}}} + \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t + E_{fe} - 2E_1}{kT}}} \right) = N_t \left(\frac{2 + e^{\frac{E_t + E_{fe} - 2E_1}{kT}} + e^{\frac{2E_1 - E_t - E_{fe}}{kT}}}{\left(1 + e^{\frac{E_t + E_{fe} - 2E_1}{kT}}\right) \left(1 + e^{\frac{2E_1 - E_t - E_{fe}}{kT}}\right)} \right) \approx N_t$$

Para $x_2 < x < x_1$ teremos e_p e e_n dominando (condição correspondente a um centro de geração). A ocupação do nível será dada por: $n_t = \frac{N_t}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{2E_1 - E_t}{kT}}} \approx N_t$ porque $E_1 > E_t$.

Para valores de x menores que x_2 , mas próximos a x_2 , há competição entre e_n e c_p , de forma que teremos, para o estado estacionário, $(e_n + c_p)n_t = e_p (N_t - n_t)$. Ou seja:

$$n_t = N_t \frac{e_p}{c_p + e_p + e_n} = N_t \frac{1}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t - E_{fn}}{kT}} + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{2E_1 - E_t}{kT}}} \approx N_t \quad (3.57)$$

Para valores de $x < x_2$ e suficiente afastados de x_2 , teremos $E_t + E_{fn} \ll 2E_1$ e, no estado estacionário, observaremos uma ocupação dada por $n_t = N_t \frac{1}{1 + \frac{g_0}{g_1} e^{\frac{E_t - E_{fn}}{kT}}}$. Assim,

nesta região, para $x > x_3$ os níveis estarão praticamente ocupados e, para $x < x_3$ eles tenderão a ficarem vazios.

Resumindo, em semicondutores *tipo-n*, diferenciam-se dois tipos de níveis profundos: aqueles com $E_t > E_1$ e aqueles com $E_t < E_1$. Na situação de equilíbrio térmico, eles se comportam de maneira similar, mas, fora do equilíbrio, apresentam estados estacionários bastante distintos. Os níveis com $E_t > E_1$ estão cheios para profundidades

maiores que aquela correspondente a $E_t(x) = E_{fc}$ e vazios para profundidades menores. Níveis com $E_t < E_1$, por sua vez, estão cheios para todas as profundidades maiores que aquela em que $E_t(x) = E_{fn}$ e vazios para valores de x menores que este. Para o nosso caso de material *tipo-n*, estes primeiros são definidos centros de captura de majoritários, e estes últimos, centros de captura de minoritários.

O caso para material *tipo-p* é completamente análogo (trocando-se elétrons por lacunas) e resulta na definição, neste caso, de centros de captura de majoritários para níveis com $E_t < E_1$ e centros de captura de minoritários para aqueles com $E_t > E_1$.

3.4 Medindo transientes de capacitância em uma camada de depleção

Agora, já sabemos como se portam os diferentes níveis profundos para o equilíbrio e para o estado estacionário em uma região de depleção. O próximo passo é sair de uma situação de equilíbrio ($V_{ap} = 0$) e aplicar uma tensão reversa, observando, de alguma forma, a evolução da ocupação dos níveis profundos tender ao já apresentado estado estacionário.

Vamos, inicialmente, considerar o caso de centros de captura de majoritários. Como representado nas Figura 3.8, para $V = 0$, tanto centros de captura de majoritários como os de minoritários estão preenchidos para profundidades maiores de aquela em que $E_t(x) = E_f$. O ponto x_2 corresponde a esta profundidade para o caso dos centros de captura

de majoritários, mas, como apresentado no gráfico, não existe valor de $x > 0$ para o qual $E_t^h(x) \geq E_f$, e todos os níveis de minoritários estão preenchidos. Quando a tensão reversa é aplicada, a camada de depleção aumenta e, inicialmente, teremos ambos os tipos de centros de captura preenchidos para $x > x_2$. Esta já é a situação estacionária para os centros de captura de minoritários, mas não para os de majoritários. Assim, os níveis com $E_t > E_1$ que se encontram a profundidades maiores que x_2 , mas menores que aquela em que $E_t(x) = E_{fe}$ (x_1 no gráfico) terão que, de alguma forma, “esvaziar” para alcançarem a situação estacionária. Portadores livres respondem à aplicação do campo externo em tempos bem inferiores à resposta dos níveis profundos, de forma que, antes que os níveis presentes na região descrita acima tenham tempo suficiente para se “livrarem” de seu elétron, a região de depleção já está praticamente sem portadores livres. Assim, as taxas de captura, que são proporcionais à concentração de portadores livres, serão desprezíveis nesta região. Restará apenas a estes níveis emitir termicamente seus elétrons. Como, por (3.55), $e_n \gg e_p$ para eles, pode-se simplificar (3.24) a:

$$n_i(t) = n_i(0)e^{-e_n t} = N_i e^{-e_n t} \quad (3.58)$$

O caso para centros de captura de minoritários não é tão simples. Como mostrado na Figura (3.8), eles ficam sempre preenchidos na região onde $E_t < E_{fn}$. Assim, não se observará transiente algum envolvendo estes níveis quando pulsarmos de 0V para uma tensão reversa. Para se observar, efetivamente, transientes oriundos de emissão de portadores destes níveis, é necessário inicialmente esvaziá-los (ou analogamente enchê-los com lacunas) de alguma forma. Há diversas maneiras de fazê-lo. As mais comuns são: incidir luz com frequência ν tal que $E_g > h\nu > (E_c - E_t)$ na amostra à tensão reversa aplicada, de forma que os elétrons deste nível possam ser emitidos ópticamente para a con-

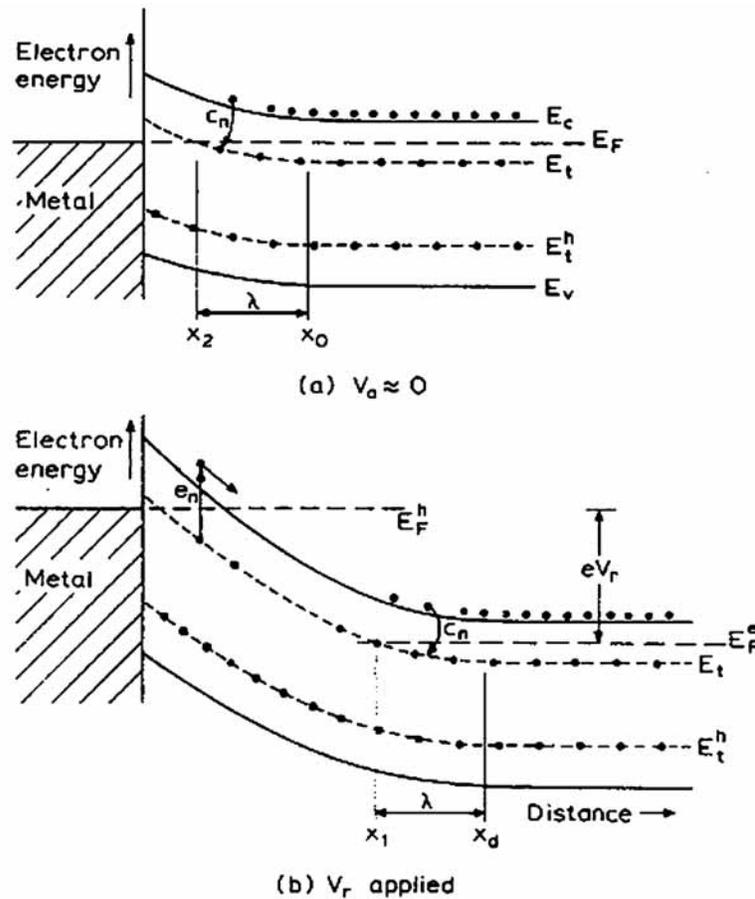


Figura 3.8 Diagrama de bandas para um diodo Schottky em um semiconductor *tipo-n* com dois níveis profundos (um centro de captura de majoritários com energia E_t e um centro de captura de minoritários com energia E_t^h) e para as situações de equilíbrio (a) e tensão reversa aplicada (b). [Referência 43]

dução (assim, os portadores livres que forem emitidos na zona de depleção serão repelidos pelo campo elétrico e a probabilidade de captura c_n continuará desprezível nesta região); ou aplicar uma tensão direta em uma junção p-n (ou p⁺-n para ficar mais parecida com o caso que adotamos como exemplo). Como veremos mais adiante, estes métodos nos permitirão a obtenção do que chamaremos a “assinatura” do nível, mas levarão a complicações para se determinar a concentração N_t destes níveis.

Vamos, inicialmente, nos ater ao caso dos centros de captura de majoritários. O próximo passo é analisar as mudanças que este transiente (a emissão térmica de portadores

dos centros de captura de majoritários após a aplicação da tensão reversa) acarreta na distribuição das cargas fixas dentro da zona de depleção. Partindo de (3.33):

$$-\psi(0,t) \equiv V(t) = V_r(t) + V_b = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_0^{x_d(t)} x\rho(x,t)dx \quad (3.59)$$

A Figura (3.9) representa a mudança na distribuição de cargas devido a este transiente supondo distribuições uniformes de dopantes e de níveis profundos. Nesta figura,

$$N^+ = N_d - N_a + N_t^{cte} + \sum_i N_{ii}^*$$

onde N_t^{cte} é a soma das concentrações de cada centro de captura de minoritários multiplicada pelo devido estado de carga do defeito associado a este centro quando ele está cheio, mais a soma das concentrações de cada centro de captura de majoritários cuja energia $E_t(x_d)$ seja maior que E_{fe} multiplicada, também, pelo devido estado de carga do defeito associado quando o nível está, desta vez, vazio (ou seja, a carga total dos centros de captura que não mudam seu estado no caso considerado). Note-se que estas duas quantidades são constantes ao longo do transiente (*traps* de minoritários não vão se esvaziar e centros de captura de majoritários com $E_t > E_{fe}$ ficam sempre vazios). O termo

$$\sum_i N_{ii}^*$$

por sua vez, corresponde aos níveis que geram o transiente (centros de captura de majoritários com $E_t(x_d) < E_{fe}$), de forma que $N_{ii}^*(x_d)$ corresponde à concentração do i -ésimo centro de captura de majoritários com $E_t(x_d) < E_{fe}$ multiplicada pelo estado de carga de seu correspondente defeito quando o nível está cheio. Vale salientar também que a Figura 3.9 esboça o exemplo de um único centro de captura de majoritários sendo o responsável pelo transiente e com distribuições retangulares de carga. Como veremos adiante, é normalmente possível se obter uma região de temperaturas em que o transiente obtido é devido, basicamente, à relaxação térmica de um único nível desde que os níveis estejam suficientemente “espaçados” na banda proibida (como as taxas de emissão

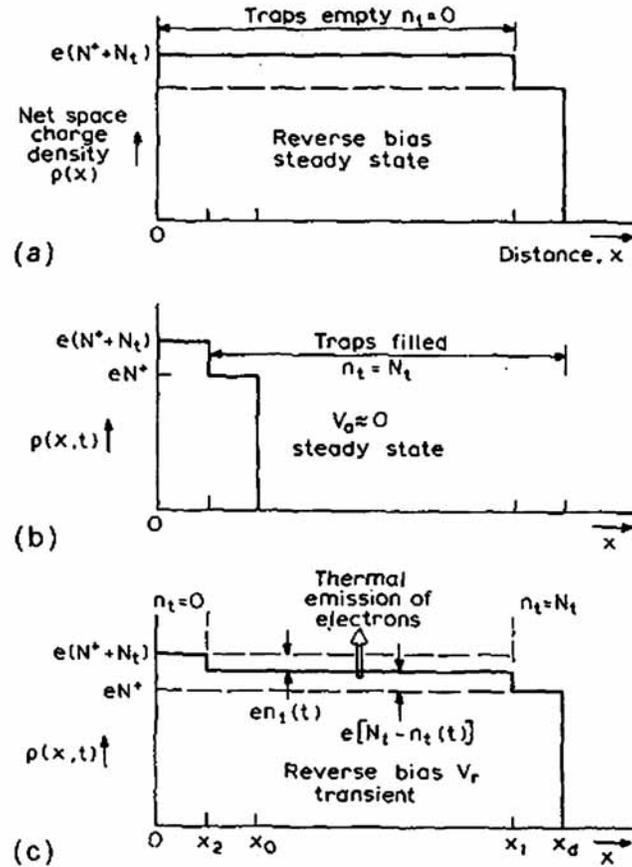


Figura 3.9. Distribuições de carga para concentrações uniformes de dopantes e níveis profundos para o estado estacionário à tensão reversa aplicada (a), para o pulso a 0V (b) e para o transiente observado após a restauração da tensão reversa (c). Referência [43].

dependem da temperatura através de (3.12,13), variando esta última, normalmente se acha um valor em que apenas um nível responde em tempo comparável ao tempo de medida, sendo todos os outros ou lentos ou rápidos demais em relação a este último tempo). Quanto à distribuição retangular de carga, pode-se dizer que esta é uma boa aproximação se as distâncias em questão (x_2 , $x_2 - x_1$ e λ) forem bem maiores que L_D , o comprimento de Debye

$$(L_D \equiv \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{e^2 N_{dop}}}, N_{dop} = N_d - N_a \text{ no nosso caso}) \text{ que pode ser pensado como a distância em}$$

que os portadores livres se redistribuem na vizinhança de uma região de carga espacial

fixa^[44,43]. Assim sendo, a situação apresentada na figura não é muito limitada e, na verdade, descreve de maneira satisfatória a maior parte dos casos de interesse experimental.

Nesta figura, distinguem-se três regiões básicas dentro da depleção:

(1) $0 < x < x_2$ – onde todos os centros de captura de majoritários ficam sempre vazios; $n_t(x) = 0$;

(2) $x_2 < x < x_1$ – onde estes níveis emitem os elétrons, capturados a $V = 0$, quando é aplicada a tensão reversa (região onde realmente ocorre o transiente);

$$n_t(x,t) = N_t e^{-en t};$$

(3) $x_1 < x < x_d$ – onde estes níveis permanecem sempre cheios, $n_t(x) = N_t$.

De forma geral, sem supor distribuições uniformes, teremos:

$$\rho(x,t) = e(N^+(x) + (N_t(x) - n_t(x,t))) \quad (3.60)$$

De (3.59):

$$V(t) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \int_0^{x_d(t)} x [N^+(x) + N_t(x) - n_t(x,t)] dx$$

$$V(t) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \int_0^{x_2} x(N^+(x) + N_t(x)) dx + \int_{x_2}^{x_1(t)} x(N^+(x) + N_t(x) - n_t(x,t)) dx + \int_{x_1(t)}^{x_d(t)} xN^+(x) dx \right\}$$

$$\rightarrow V(t) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \int_0^{x_d(t)} xN^+(x) dx + \int_0^{x_1(t)} xN_t(x) dx - \int_{x_2}^{x_1(t)} xn_t(x,t) dx \right\} \quad (3.61)$$

Para distribuições uniformes:

$$V(t) = \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0} [N^+x_d^2(t) + N_t x_1^2(t) - n_t(t)(x_1^2(t) - x_2^2)] \quad (3.62)$$

Desta relação, podemos perceber que a influência do transiente do estado profundo sobre a região de depleção se dá através de mudanças tanto em $V(t)$ quanto em

$x_d(t)$. A idéia, então, é manter um destes parâmetros constante e monitorar o outro, para se obter experimentalmente as informações contidas no transiente.

Antes de seguir com este procedimento, porém, vale fazer um breve comentário sobre a distância λ entre x_d e x_1 : o ponto x_1 é definido como a profundidade em que $E_t(x) = E_{fe}$ (supondo que este exista). De (3.38):

$$-e\psi(x_1) = E_c(x_1) - E_c(x_d) = E_{fe} - E_t(x_d) \quad (3.63)$$

Mas, a partir da expressão obtida para o campo elétrico em uma zona de depleção com distribuição uniforme de doadores N_d , (3.44), e com $-\psi(x) \gg \frac{kT}{e}$:

$$E^2(x) = \frac{2eN_d}{\epsilon\epsilon_0} [-\psi(x)] \rightarrow \frac{d(-\psi(x))}{dx} = -\sqrt{\frac{2eN_d}{\epsilon\epsilon_0} \{-\psi(x)\}} \quad (3.64)$$

; lembrando que $-\psi(x)$ é positivo e o campo elétrico no nosso caso é negativo.

$$\int_{-\psi(x)}^{-\psi(x_d)=-\psi(\infty)=0} \frac{d(-\psi')}{\sqrt{(-\psi')}} = -\sqrt{\frac{2eN_d}{\epsilon\epsilon_0}} \int_x^{x_d} dx' \quad (3.65)$$

$$\rightarrow \sqrt{-\psi(x)} = \sqrt{\frac{eN_d}{2\epsilon\epsilon_0}} (x_d - x) \rightarrow -\psi(x) = \frac{eN_d}{2\epsilon\epsilon_0} (x_d - x)^2 \quad (3.66)$$

Logo:

$$-e\psi(x_1) = \frac{e^2 N_d}{2\epsilon\epsilon_0} (x_d - x_1)^2 = E_{fe} - E_t(x_d) \quad (3.67)$$

Como $E_t(x_d) \equiv E_t$,

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e^2 N_d} (E_{fe} - E_t)} = \sqrt{2} L_D \sqrt{\frac{E_{fe} - E_t}{kT}} \quad (3.68)$$

e é independente de x_d . λ também pode ser pensado como a distância, a partir da extremidade da depleção, em que c_n é reduzido até um valor igual a e_n .

Voltando, após este breve comentário, para (3.62) e derivando-a em relação ao tempo t:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{dV_b}{dt} + \frac{dV_r}{dt} = \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0} \left[2N^+x_d \frac{dx_d}{dt} + 2N_t x_1 \frac{dx_1}{dt} - \frac{dn_t}{dt} (x_1^2 - x_2^2) - 2n_t x_1 \frac{dx_1}{dt} \right] \quad (3.69)$$

Considerando $dV_b = 0$ e $dx_d = dx_1$ (porque λ é constante):

$$\frac{dV_r}{dt} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[N^+x_d \frac{dx_d}{dt} + (N_t - n_t)x_1 \frac{dx_d}{dt} - \left(\frac{x_1^2 - x_2^2}{2} \right) \frac{dn_t}{dt} \right] \quad (3.70)$$

Como dito anteriormente, a idéia é manter ou $V(t)$ (e, conseqüentemente, $V_r(t)$) ou $x_d(t)$ constante. Iniciaremos mantendo $V(t)$ constante. Assim, teremos:

$$0 = \left[N^+x_d + (N_t - n_t)x_1 \right] \frac{dx_d}{dt} - \frac{1}{2} (x_1^2 - x_2^2) \frac{dn_t}{dt} \quad (3.71)$$

A esta altura, um outro pequeno comentário deve ser feito. Quando impomos $dV_r(t) = 0$, queremos obter os parâmetros contidos no transiente $n_t(t)$ medindo as alterações que ele provoca em $x_d(t)$. Isso é feito monitorando-se a capacitância desta zona de depleção. Esta capacitância, por sua vez, é observada através da aplicação de um sinal AC de pequena amplitude (normalmente algumas dezenas de mV) na tensão V_r que provoca uma variação ΔQ tal que $C = \Delta Q/\Delta V$ (pode-se obter este ΔQ observando-se a amplitude da componente da corrente deslocada (“*shiftada*”) de $\pi/2$ em relação ao sinal AC de tensão em uma ponte de impedâncias). Então, usa-se (3.48): $C = \varepsilon\varepsilon_0 \frac{A}{x_d}$. Mas na dedução desta relação, não foi levada em conta a influência dos níveis profundos (ao invés de (3.39), deveríamos ter algo do tipo $\rho(x) = e[N^+(x) - n(x) + N_t(x) - n_t(x)]$).

Esta influência pode se dar de duas formas:

(1) se a frequência do sinal AC usado for muito maior que as taxas características de emissão e captura dos centros de captura de majoritários (e_n e c_n no nosso caso), estes últimos não conseguirão responder ao ΔV aplicado e, conseqüentemente, não alterarão o ΔQ obtido (a não ser pela substituição da concentração uniforme N_d por N^+ , também uniforme na nossa aproximação). Assim, o resultado (3.48) continuará válido;

(2) se esta frequência não for suficiente alta, os níveis conseguirão responder ao ΔV e (3.48) não mais poderá ser aplicada (ver referência [43]).

Vamos considerar que a frequência usada é suficientemente alta, o que é uma boa aproximação para valores em torno de 1MHz que são usualmente utilizados em pontes de impedâncias para medir capacitâncias. Assim sendo, teremos $C(t) = \epsilon\epsilon_0 \frac{A}{x_d(t)}$.

Voltando para (3.71) :

$$\left[N^+ x_d(t) + (N_t - n_t(t)) x_1(t) \right] \frac{dx_d}{dt} = \frac{1}{2} (x_1^2(t) - x_2^2) \frac{dn_t}{dt} \quad (3.71)$$

Esta relação não é linear, porque, à medida em que n_t cai exponencialmente no tempo, x_d e x_1 diminuem, tornando a região efetiva onde é observado o transiente ($x_1 - x_2$) também menor. Para linearizá-la, é necessário fazer $N_t \ll N_d$. Assim, o valor Δx_d , necessário para ocasionar uma mudança na carga de depleção que compense a saída dos portadores (no nosso caso, elétrons) emitidos dos níveis profundos, será bem pequeno e poderá ser desprezado em relação a um valor efetivo constante x_d . Desta forma, para $N_t \ll N_d$, teremos:

$$\left[N^+ x_d(t) + (N_t - n_t(t)) x_1(t) \right] \frac{dx_d}{dt} \approx N_d x_d \frac{dx_d}{dt} = \frac{1}{2} (x_1^2 - x_2^2) \frac{dn_t}{dt} \quad (3.72)$$

porque $N^+ \approx N_d$ e o termo em $(N_t - n_t(t)) \frac{dx_d}{dt}$ é de segunda ordem e pode ser desprezado.

Como $C = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 A}{x_d} \rightarrow \frac{dC}{dt} = -\frac{\varepsilon \varepsilon_0 A}{x_d^2} \frac{dx_d}{dt} \rightarrow x_d \frac{dx_d}{dt} = -\frac{x_d^2}{C} \frac{dC}{dt}$ e teremos:

$$\frac{1}{C} \frac{dC}{dt} = -\frac{1}{2N_d} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{dn_t}{dt} \quad (3.73)$$

onde $C = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 A}{x_d}$ é efetivamente constante assim como o são x_d e x_1 .

Seguindo o raciocínio:

$$\begin{aligned} \frac{1}{C(\infty)} \int_{\infty}^t \frac{dC(t')}{dt'} dt' &= -\frac{1}{2N_d} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \int_{\infty}^t \frac{dn_t(t')}{dt'} dt' \\ \rightarrow \frac{C(t) - C(\infty)}{C(\infty)} &= \frac{n_t(\infty) - n_t(t)}{2N_d} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \end{aligned} \quad (3.74)$$

De (3.58), $n_t(t) = N_t e^{-e_n t}$, de forma que:

$$\rightarrow \Delta C(t) = C(t) - C(\infty) = -\frac{C(\infty)N_t}{2N_d} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} e^{-e_n t} \quad (3.75)$$

$$\text{Ou } \Delta C(t) = -\Delta C_0 e^{-e_n t} \quad (3.76)$$

onde

$$\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{N_t}{N_d} \quad (3.77)$$

3.5 Medindo transientes de tensão em uma camada de depleção cuja capacitância é mantida constante.

A outra possível abordagem para simplificar (3.70)

$$\frac{dV_r}{dt} = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left[N^+ x_d \frac{dx_d}{dt} + (N_t - n_t) x_1 \frac{dx_d}{dt} - \left(\frac{x_1^2 - x_2^2}{2} \right) \frac{dn_t}{dt} \right],$$

é manter x_d fixo e medir o transiente através de V_r . Isso pode ser feito com o auxílio de um pequeno circuito com realimentação que mantenha a capacitância medida a alta frequência constante ao longo do transiente. Assim, teremos:

$$\frac{dV_r}{dt} = - \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} (x_1^2 - x_2^2) \frac{dn_t}{dt} \quad (3.78)$$

Esta relação é linear e pode ser integrada sem nenhuma restrição a N_t em relação a N_d (lembrando apenas que estamos considerando N_t e N_d uniformes):

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_{\infty}^t \frac{dV_r(t')}{dt'} dt' &= - \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} (x_1^2 - x_2^2) \int_{\infty}^t \frac{dn_t(t')}{dt'} dt' \\ \rightarrow \Delta V(t) = V(t) - V(\infty) &= - \frac{e}{2\epsilon\epsilon_0} (x_1^2 - x_2^2) [n_t(t) - n_t(\infty)] \end{aligned} \quad (3.79)$$

Ou seja, para o nosso exemplo em particular (centros de captura de majoritários em material semiconductor *tipo-n* e com $N_t \ll N_d$ para que possamos obter a relação exponencial para $n_t(t)$), teremos:

$$\Delta V(t) = - \frac{eN_t}{2\epsilon\epsilon_0} (x_1^2 - x_2^2) e^{-e_n t} = -\Delta V_0 e^{-e_n t} \quad (3.80)$$

$$\text{com } \Delta V_0 = \frac{eN_t}{2\epsilon\epsilon_0} (x_1^2 - x_2^2) \quad (3.81)$$

Como dito acima, para (3.79), não precisamos ter $N_t \ll N_d$. Mas a medida exige um circuito com realimentação para manter C constante, e este circuito pode tornar a medida mais lenta e incapaz de detectar transientes mais rápidos.

3.6 Princípios do DLTS

Uma vez estabelecidos os principais conceitos envolvidos nesta técnica, podemos avançar para a descrição da Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos propriamente dita. Para tanto, iniciaremos com o tipo mais simples de DLTS: o chamado *Box-car* DLTS. Este exemplo apresentará as características básicas da medida e permitirá posteriores introdução e discussão dos demais tipos de DLTS.

Imaginemos uma amostra semicondutora *tipo-n* com um único centro de captura de majoritários. Neste caso, construindo um diodo Schottky (pela deposição de um adequado metal, por exemplo), aplicando 0V a este diodo, esperando um tempo suficiente para que os defeitos que estão a profundidades maiores que x_2 se encontrem praticamente todos no estado de carga correspondente ao que definimos como nível cheio e, então, aplicando uma tensão reversa V (negativa neste caso), iremos observar (pela medida de capacitância à tensão aplicada constante, por exemplo) o comportamento descrito em

$$(3.76): \quad C(t) = C(\infty) - \Delta C_0 e^{-e_n t}. \quad \text{Mas, de (3.12),} \quad e_n(T) = \sigma_n \langle v_n \rangle \frac{g_0}{g_1} N_c e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}.$$

Substituindo nesta relação as usuais expressões para $\langle v_n \rangle$ e N_c ($\langle v_n \rangle = \sqrt{\frac{3kT}{m^*}}$ e

$N_c = 2M_c \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$, sendo M_c o número de mínimos da condução [44,43]), chega-se a

(consideramos $g_0/g_1 \approx 1$):

$$e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}} \quad (3.82)$$

onde $\gamma = 2\sqrt{3}M_c(2\pi)^{3/2}k^2m^*h^{-3}$ é uma constante para cada semiconductor como mostrado na Tabela 3.1. Uma relação completamente análoga a (3.82) existe para o caso de materiais *tipo-p*.

Tabela 3.1 Fatores γ para Si e GaAs. [Referência 46].

Semicondutor	γ (cm⁻²s⁻¹K⁻²)
Si <i>tipo-n</i>	1,07 x 10 ²¹
Si <i>tipo-p</i>	1,78 x 10 ²¹
GaAs <i>tipo-n</i>	2,3 x 10 ²⁰
GaAs <i>tipo-p</i>	1,7 x 10 ²¹

Assim sendo, se de alguma forma determinarmos o tempo característico do transiente medido para diferentes valores de temperatura, poderemos obter uma série de pares $(e_n(T), T)$. Colocando estes em um gráfico do tipo $\ln(e_n(T)/T^2)$ versus $1/T$ (chamado *plot* de Arrhenius), poderemos facilmente (usando um simples ajuste linear) chegar aos valores de $E_c - E_t$ e σ_n respectivamente da inclinação da reta obtida e do cruzamento da

mesma com a ordenada (porque, usando (3.82), $\ln\left(\frac{e_n(T)}{T^2}\right) = \ln(\gamma\sigma_n) - \left(\frac{E_c - E_t}{k}\right)\frac{1}{T}$; ver

Figura 3.10).

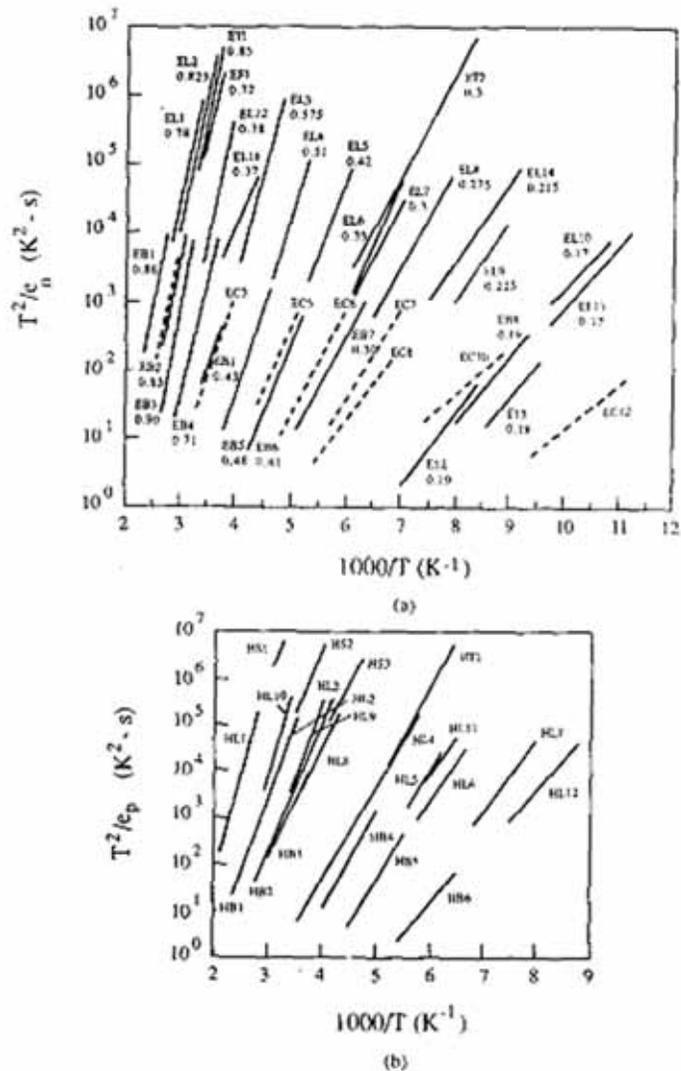


Figura 3.10. Plot de Arrhenius para os principais centros de captura de majoritários observados em GaAs tipo-n (a) e tipo-p (b). Convencionalmente, usa-se $\ln(T^2/c)$ como ordenada e observam-se inclinações positivas. Referência [45].

Mas normalmente, em uma amostra semicondutora, existe mais de um defeito que introduza níveis correspondentes a centros de captura de majoritários. Assim, o transiente medido não será somente devido à emissão de um dado nível, mas sim à soma das

contribuições de cada centro. A idéia da Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos está justamente em separar a contribuição de cada nível para o transiente, gerando um espectro onde cada pico corresponda a uma destas contribuições.

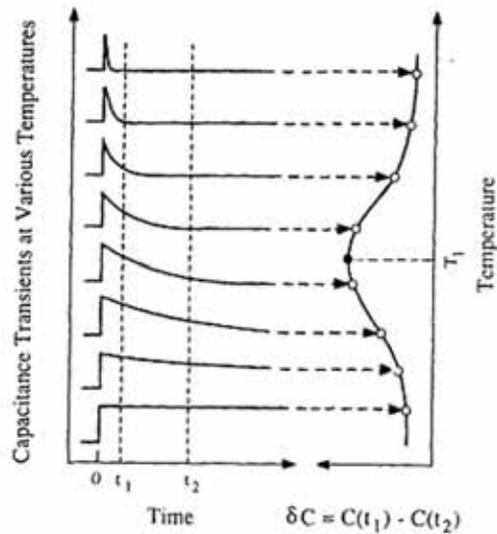


Figura 3.11. Uso do *Box-Car* DLTS para obtenção do espectro DLTS. O sinal medido é a subtração dos valores de capacitância nos tempos t_1 e t_2 . Transientes muito rápidos ou muito lentos geram sinal nulo. Referência [46].

O conceito utilizado no *Box-car* DLTS e em diversos outros tipos de DLTS está representado na Figura 3.11. Escolhe-se uma janela de taxas de emissão, ou seja, um intervalo de tempo de referência τ_{ref} . Níveis com o inverso da taxa de emissão (e_n^{-1}) $\ll \tau_{ref}$ terão emitido os elétrons (para o nosso caso) em um tempo muito curto e níveis com (e_n^{-1}) $\gg \tau_{ref}$ demorarão muito para emitir seus elétrons. Assim, o transiente que ocorre em um intervalo de tempo τ_{ref} será basicamente devido a emissões de níveis com e_n^{-1} da ordem de τ_{ref} , ou seja, cujas taxas de emissão estejam dentro da janela utilizada. Desta forma, mantendo-se a mesma janela e variando T , a taxa de emissão de cada nível passará por esta faixa de valores em uma determinada região de temperaturas, dando origem a picos como o

representado na figura (lembrando novamente que $e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}$, ou seja, aumentando-se a temperatura, aumenta-se e_n).

No caso específico do *Box-car* DLTS, esta janela é escolhida através da imposição de dois tempos: t_1 e t_2 (como também representado na Figura 3.11). Assim, supondo que os níveis estejam suficientemente separados na banda proibida de forma que tenhamos basicamente a resposta de um nível para a janela utilizada em cada região de temperaturas, (3.72) será válida e poderemos definir o sinal DLTS:

$$S \equiv C(t_2) - C(t_1) = \Delta C_0 \left\{ e^{-e_n t_1} - e^{-e_n t_2} \right\} \quad (3.83)$$

onde e_n é a taxa de emissão do nível que responde, para a janela utilizada, na temperatura em que o transiente foi obtido.

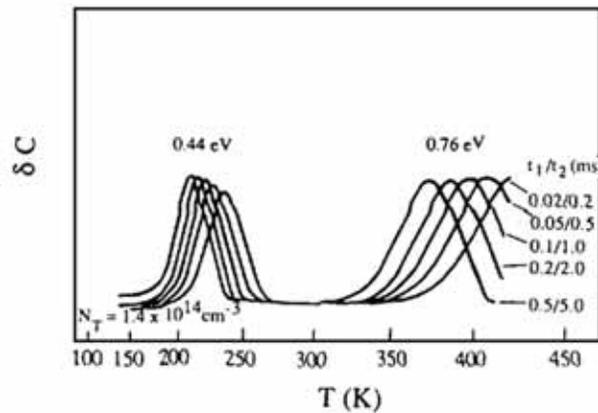


Figura 3.12. Espectros DLTS obtidos para diferentes janelas. Referência [46]

Desta forma, medindo $S(T)$ para diversos valores de T , obtém-se um espectro como o representado na Figura (3.12) (esta figura apresenta cinco espectros diferentes, obtidos para distintos valores de t_1 e t_2). Note-se que, pela nossa aproximação, cada um dos picos observados em um mesmo espectro corresponde a um único nível e, pela análise feita

acima, o máximo de cada pico corresponde ao valor de temperatura em que a taxa de emissão deste nível é igual ao inverso do tempo de referência τ_{ref} adotado. Ou seja:

$$\frac{dS}{de_n} = \Delta C_0 \left\{ -t_1 e^{-t_1 e_n} + t_2 e^{-t_2 e_n} \right\} \rightarrow e_n(T_{pico}) = \tau_{ref}^{-1} = \frac{\ln\left(\frac{t_2}{t_1}\right)}{t_2 - t_1} \quad (3.84)$$

Esta relação nos indica que, para cada espectro obtido com um dado valor de t_1 e de t_2 , teremos como achar um par correspondente a $(e_n(T_{pico}) = \tau_{ref}^{-1}, T_{pico})$ para cada nível. O próximo passo é variar t_2 e t_1 para se obter uma quantidade suficiente destes pares e construir o gráfico $\ln(e_n(T)/T^2)$ versus $1/T$ para cada nível. Assim, será possível chegarmos aos valores de $E_c - E_t$ e σ_n para os diferentes centros de captura de majoritários presentes na amostra (isso para a nossa aproximação de que cada um deles responderá à janela adotada em uma região diferente de temperaturas).

A Figura (3.12) mostra os espectros DLTS obtidos para diferentes valores de t_1 e t_2 .

Introduzindo um parâmetro adimensional β , tal que $t_2 = \beta t_1$, teremos :

$$e_n(T_{pico}) = \tau_{ref}^{-1} = \frac{1}{t_1} \frac{\ln(\beta)}{\beta - 1} \quad (3.85)$$

$$S_{pico} = \Delta C_0 \left\{ e^{-e_n(T_{pico})t_1} - e^{-e_n(T_{pico})t_2} \right\} = \Delta C_0 \left\{ e^{-\frac{\ln(\beta)}{\beta-1}} - e^{-\frac{\beta \ln(\beta)}{\beta-1}} \right\} \quad (3.86)$$

Ou seja, a relação entre S_{pico} e ΔC_0 depende apenas de β . Por isso, costuma-se variar t_1 e t_2 de forma que β seja mantido constante; afinal, como foi visto, a partir do valor de ΔC_0 pode-se obter a concentração de níveis N_t através de (3.77)

$$\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{N_t}{N_d}$$

Resumindo, escolhe-se t_1 e t_2 e obtém-se o espectro $S(T)$ versus T usando (3.83) sobre os transientes obtidos a diferentes temperaturas. Em seguida, guardam-se os pares (e_n, T) obtidos para cada nível através da temperatura do seu correspondente pico. Variam-se, então, t_1 e t_2 e se gera um novo espectro guardando sempre os pares (e_n, T) . Este procedimento se repete até que se chegue a um número suficiente de pares que possa propiciar um bom ajuste linear no gráfico $\ln(e_n(T)/T^2)$ versus $1/T$, a partir do qual, então, extrairemos os valores de $E_c - E_t$ e σ_n para cada nível. Este esquema descreve o funcionamento do *Box-Car* DLTS, mas também serve de base para diversos outros tipos de DLTS como veremos a seguir.

3.7 Outros tipos de DLTS

Uma vez comentada a idéia básica da medida DLTS através do chamado *Box-Car* DLTS, podemos introduzir algumas das outras diversas variações desta medida. Não é o objetivo aqui dar uma descrição completa de cada um destes tipos de DLTS, o que fugiria um pouco do escopo deste texto. Mas pelo menos uma base razoável para as variações mais simples e uma introdução para as mais sofisticadas serão apresentadas. Iniciaremos com o chamado DLTS de janelas de taxas de emissão (que, inclusive, engloba o *Box-Car*); passaremos, então, para métodos um pouco mais sofisticados como o da transformada de Fourier e o método dos momentos, e concluiremos com uma pequena introdução ao chamado Laplace DLTS.

3.7.1 Métodos de janelas de taxas de emissão

Vamos imaginar um transiente exponencial mais geral que possa representar não somente o caso usado acima para medidas de capacitância, mas também transientes de níveis profundos obtidos medindo-se a tensão reversa (como visto anteriormente) ou corrente (caso não abordado aqui, ver a referência [43]) em uma zona de depleção:

$$A(t) = B + A_0 e^{-t/\tau} \quad (3.87)$$

onde τ é o tempo característico deste transiente na temperatura em que ele foi observado (lembrando que estamos considerando a aproximação de que, dentro do tempo característico de medida, apenas uma emissão predomine em cada temperatura, de forma que $e_n = \tau^{-1}$ e temos um transiente mono-exponencial).

Assim, podemos generalizar a obtenção do sinal DLTS como:

$$S(\tau) = \frac{1}{t_m} \int_0^{t_m} A(t)w(t)dt \quad (3.88)$$

onde t_m é o tempo total de medida.

No caso ideal do *Box-Car* DLTS, a função peso $w(t)$ é dada por $t_m (\delta(t-t_2) - \delta(t-t_1))$. Na prática, o *Box-Car* DLTS corresponde a uma função peso como a representada na Figura 3.13.

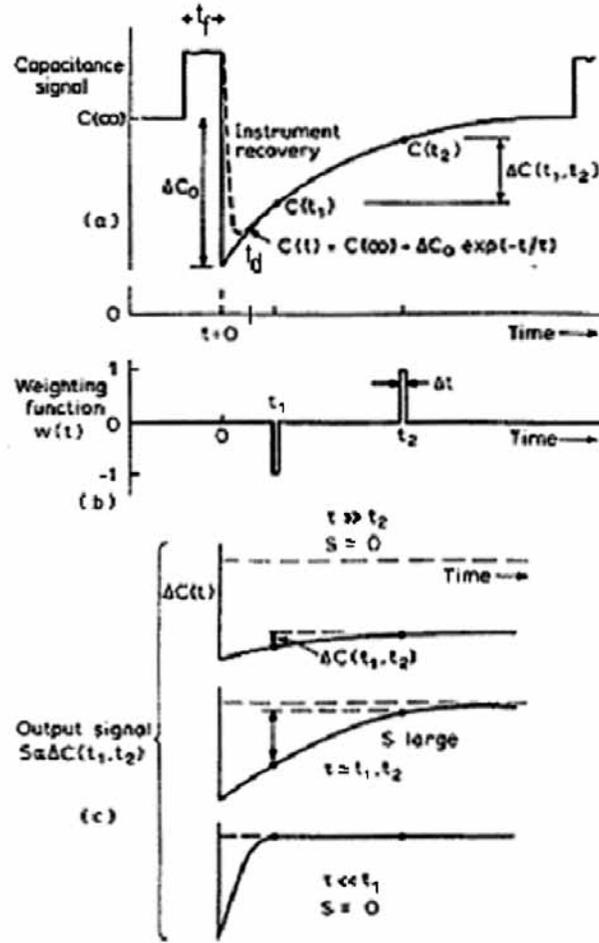


Figura 3.13 Ilustração da função peso utilizada no *Box-Car* DLTS. [Referência 43].

Assim, S será dado por:

$$S = \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{t_2}^{t_2+\Delta t} A_0 e^{-t/\tau} dt - \int_{t_1}^{t_1+\Delta t} A_0 e^{-t/\tau} dt \right] = -\frac{\tau A_0}{\Delta t} \left[e^{-(t_2+\Delta t)/\tau} - e^{-t_2/\tau} - e^{-t_1+\Delta t/\tau} + e^{-t_1/\tau} \right] \quad (3.89)$$

$$\rightarrow S = -\frac{\tau A_0}{\Delta t} \left[1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau}} \right] \left[e^{-\frac{t_1}{\tau}} - e^{-\frac{t_2}{\tau}} \right] \quad (3.90)$$

Expandindo a exponencial em $\Delta t/\tau$ e ficando apenas com termos até primeira ordem (aproximando $\Delta t/\tau \ll 1$), re-obtemos (3.83) com $A_0 = -\Delta C_0$ e $\tau = \tau_n^{-1}$.

Mas esta não é a única função peso que pode ser utilizada. Usualmente também são empregadas funções senoidais ou exponenciais. No primeiro caso, teremos:

$$S = \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} A(t) \text{sen} \left(\frac{2\pi t}{t_0} \right) dt = \frac{A_0}{t_0} \int_0^{t_0} e^{-\frac{t}{\tau}} \text{sen} \left(\frac{2\pi t}{t_0} \right) dt$$

$$\rightarrow S = \frac{2\pi \left(\frac{\tau}{t_0} \right)^2}{4\pi^2 \left(\frac{\tau}{t_0} \right)^2 + 1} A_0 \left[1 - e^{-\frac{t_0}{\tau}} \right] \quad (3.91)$$

Derivando em relação a τ e igualando esta derivada a zero, podemos achar o valor de τ_{ref} :

$$\tau_{ref} \approx 0,424 t_0 \rightarrow e_n(T_{pico}) \approx 2,357 / t_0 \quad (3.92)$$

Usando-se este valor, temos $S_{pico} = 0,126 A_0$, de onde pode-se achar A_0 , necessário ao cálculo de N_t .

A situação correspondente ao segundo caso é um pouco mais complexa. Até agora não consideramos o tempo do pulso t_f nem o tempo de recuperação do aparelho de medida t_d como representados na Figura (3.13).

No caso do Box-Car, a função peso era exatamente zero na região $-t_f < t < t_d$ e, no caso da função peso senoidal, $w(t)$ era bem pequena, de forma que foi possível desprezar o efeito destes tempos (na verdade aproximamos $t_0 \gg t_f, t_d$, mas, mesmo assim, estes tempos podem alterar o valor de S_{pico} como mostrado na referência [43]). Agora, no entanto, pretendemos usar uma função peso do tipo $e^{-\frac{t}{t_c}}$, t_c sendo um parâmetro da medida. Mas esta função tem valores maiores justamente para tempos pequenos, e, como a medida não leva um tempo infinito, seu valor em $-t_f$ pode não ser suficientemente pequeno para

podemos desprezar o pulso (observe-se que, no pulso, os valores de capacitância medidos, por exemplo, são bem maiores que aqueles medidos durante o transiente. Ver Figura (3.13)). Assim, teremos que fazer:

$$w(t) = 0 \quad \text{para } -t_f < t < t_d$$

$$w(t) = A_{wf} e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} \quad \text{para } t_d < t < t_{med}$$

onde t_{med} é o tempo total da medida de um transiente (que começa em t_d).

Além disso, ainda encontraremos o seguinte problema:

$$S = \frac{A_{wf}}{t_m} \int_{t_d}^{t_d+t_{med}} A(t) e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} dt = \frac{A_{wf}}{t_m} \left[A_0 \int_{t_d}^{t_d+t_{med}} e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} dt + B \int_{t_d}^{t_d+t_{med}} e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} dt \right] \quad (3.93)$$

Como mostrado acima, neste caso, o termo envolvendo a linha de base B do transiente não se anula. Para resolver este último pequeno empecilho, subtrai-se o transiente $A(t)$ pelo seu valor em $t_d + t_{med}$:

$$A'(t) \equiv A(t) - A(t_d + t_{med}) = A_0 \left[e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} - e^{-\frac{t_d+t_{med}-t_d}{\tau_c}} \right] + B - B \quad (3.94)$$

Assim,

$$S = \frac{A_{wf}}{t_m} \int_{t_d}^{t_d+t_{med}} A'(t) e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} dt = \frac{A_{wf} A_0}{t_m} \int_{t_d}^{t_d+t_{med}} \left[e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} - e^{-\frac{t_d+t_{med}-t_d}{\tau_c}} \right] e^{-\frac{t-t_d}{\tau_c}} dt$$

$$\rightarrow S = \frac{A_{wf} A_0}{t_m} \tau_c e^{-\frac{t_d}{\tau_c}} \left[\frac{\tau}{\tau + \tau_c} + \frac{\tau_c}{\tau + \tau_c} e^{-\frac{\beta(\tau + \tau_c)}{\tau}} - e^{-\frac{\beta \tau_c}{\tau}} \right] \quad (3.95)$$

onde $\beta \equiv t_{med}/\tau_c$.

Por fim, notando que $t_m = t_{med} + t_f + t_d = \beta\tau_c + t_f + t_d$:

$$S = \frac{A_{wf} A_0}{\frac{t_d + t_f}{\tau_c} + \beta} e^{-\frac{t_d}{\tau}} \left[\frac{\tau}{\tau + \tau_c} + \frac{\tau_c}{\tau + \tau_c} e^{-\frac{\beta(\tau + \tau_c)}{\tau}} - e^{-\frac{\beta\tau_c}{\tau}} \right] \quad (3.96)$$

Essa expressão pode ser simplificada se considerarmos $t_d, t_f \ll \tau_c \approx \tau$:

$$S \approx \frac{A_{wf} A_0}{\beta} \left[\frac{\tau}{\tau + \tau_c} + \frac{\tau_c}{\tau + \tau_c} e^{-\frac{\beta(\tau + \tau_c)}{\tau}} - e^{-\frac{\beta\tau_c}{\tau}} \right] \quad (3.97)$$

Derivando esta expressão em relação a τ e igualando o resultado a zero, podemos obter τ_{ref} que, neste caso, será função de τ_c e β . A Figura (3.8) mostra a relação entre τ_{ref}/τ_c e β . Para termos $\tau_{ref} = \tau_c$, β deverá ser aproximadamente 2,06.

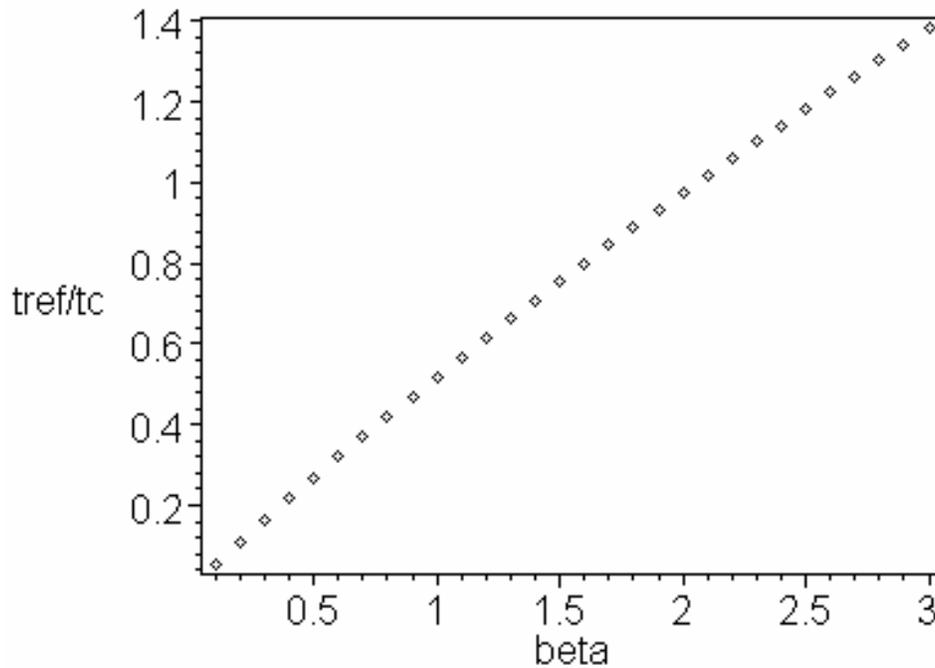


Figura 3.14 Relação entre τ_{ref}/τ_c e β .

Sabendo o valor de τ_{ref} para o β utilizado, podemos voltar a (3.97) e descobrir a relação numérica entre S e A_0 para a determinação de N_t .

Existem ainda outros tipos de DLTS com janelas de taxas de emissão (por exemplo, usando 4 ao invés de 2 deltas como função peso), mas nenhum deles possui melhorias em termos de resolução para uma dada razão sinal / ruído que possam competir com a simplicidade do *Box-Car*, sendo este o tipo de DLTS de janelas de taxas de emissão mais utilizado.

A grande desvantagem dos métodos de janelas de emissão é a largura dos picos observados. Seja a taxa de emissão e_{ref} correspondente ao pico e as taxas e_1 e e_2 referentes aos valores do sinal DLTS em que temos $S = S_{pico}/2$ (para as temperaturas T_1 e T_2 respectivamente):

$$\begin{aligned} e_1 &= \gamma T_1^2 \sigma_{na} e^{-\frac{E_{na}}{kT}} \rightarrow T_1 = E_{na} \left[\ln \left(\frac{\gamma T_1^2 \sigma_{na}}{e_1} \right) \right]^{-1} \\ e_2 &= \gamma T_2^2 \sigma_{na} e^{-\frac{E_{na}}{kT}} \rightarrow T_2 = E_{na} \left[\ln \left(\frac{\gamma T_2^2 \sigma_{na}}{e_2} \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.98)$$

onde os valores σ_{na} e E_{na} são chamados secção de choque aparente e energia aparente, e seus significados ficarão claros após a sub-secção 3.8.

Ou seja:

$$\frac{\Delta T}{T_{pico}} = \frac{T_2 - T_1}{T_{pico}} = \ln \left(\frac{\gamma T_{pico}^2 \sigma_{na}}{e_{ref}} \right) \left[\frac{1}{\ln \left(\frac{\gamma T_2^2 \sigma_{na}}{e_2} \right)} - \frac{1}{\ln \left(\frac{\gamma T_1^2 \sigma_{na}}{e_1} \right)} \right] \quad (3.99)$$

Esta relação nos indica que a largura dos picos neste caso não depende explicitamente da energia $E_c - E_T$, mas sim da secção de choque e das propriedades do material (γ). Também pode-se mostrar ^[47,48] que esta largura depende fracamente da escolha da função peso.

Valores típicos de $\Delta T/T$ estão entre 9% e 15%. Isto corresponde, para um nível a 0,5 eV da banda de condução, por exemplo, a um ΔE de 45 - 75 meV. Existem outros métodos, como o Laplace DLTS, onde temos $\Delta E/E \sim 4\%$, mostrando sua grande vantagem em relação aos métodos de janelas de taxas de emissão.

Todos os métodos de janelas de taxas de emissão foram originalmente desenvolvidos para medidas com processamento analógico do transiente. Usavam-se circuitos geradores de funções, integradores, multiplicadores, etc... para se obter ponto a ponto o espectro DLTS à medida em que se variava a temperatura. Com o passar dos anos, estes procedimentos foram sendo substituídos pelos com processamento digital do transiente. A idéia é digitalizar, para cada temperatura, algumas centenas ou milhares de transientes, gravando o valor médio dos mesmos para posterior análise. Assim, a questão mais importante, será apenas qual algoritmo usar para extrair os valores das taxas de emissão. Diversos algoritmos foram usados neste intuito ^[46], utilizando desde métodos muito simples, como a regressão linear^[49], até métodos refinados e que tomam um considerável tempo computacional como no caso do método dos momentos ou da Transformada de Laplace. Iremos dividi-los, como usual, em três grandes grupos e analisar particularmente um caso para cada grupo: o método da Transformada de Fourier representará o grupo de técnicas para análise de transientes mono-exponenciais, o método dos momentos, o grupo para análise de multi-exponenciais e o método da Transformada de Laplace por regularização de Tikhonov servirá como mais um exemplo do grupo de análise de transientes não-exponenciais.

3.7.2 Método da Transformada de Fourier

O chamado DLTFs (*Deep Level Transient Fourier Spectroscopy*) [47,49-53] emprega a Transformada de Fourier para analisar o sinal medido, supondo-o constituído por uma mono-exponencial. Sua descrição segue abaixo.

Como medimos o transiente somente entre os tempos $t = 0$ e $t = T$, vamos considerar este sinal como sendo periódico para os demais intervalos de tempo. Funções periódicas com período T e de quadrado integrável na região $t=0..T$ podem ser escritas em termo da Série de Fourier como:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{i\frac{2\pi n}{T}t} \quad (3.101)$$

onde os coeficientes complexos A_n são dados por:

$$A_n = \frac{1}{T} \int_0^T f(t) e^{-i\frac{2\pi n}{T}t} dt \quad (3.102)$$

Estes coeficientes podem ser abertos em parte real e parte imaginária:

$$A_n = a_n + ib_n \quad (3.103)$$

Definindo, então, a transformada de Fourier como^[54]:

$$\mathfrak{F}(f(t)) = F(w) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-iwt} dt, \quad (3.104)$$

teremos^[55]:

$$F(w) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{2\pi n}{T}-w\right)t} dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \delta\left(w - \frac{2\pi n}{T}\right) \quad (3.105)$$

Ou seja, esta transformada está diretamente relacionada com os coeficientes A_n da série.

No nosso caso, no entanto, temos apenas valores discretos de $f(t)$ gravados. Vamos chamá-los $f_k = f(k\Delta)$ onde $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$, $\Delta = T/N$ é o intervalo de tempo fixo entre cada dois pontos f_k , e N é o número total de pontos (por facilitar o algoritmo de cálculo desta transformada (Transformada de Fourier Rápida, FFT ^[56]), adota-se $N=2^L$, L um inteiro positivo). Assim, teremos um conjunto discreto também de frequências:

$w_m = \frac{2\pi m}{N\Delta}$, $m = -N/2, \dots, N/2$. A Transformada de Fourier discreta será, então, dada por:

$$F_n = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-\frac{2\pi i n k}{N}} \quad (3.106)$$

Com $n = -N/2, \dots, N/2$, podemos definir: $F_n \Delta \approx F(w_n)$. No entanto, como F_n é periódica ($F_{-n} = F_{N-n}$), costuma-se fazer $n = 0, \dots, N-1$ onde os valores $N/2 < n < N$ correspondem às frequências negativas e o valor $n = N/2$ corresponde às frequências $w_{-N/2}$ e $w_{N/2}$ ($F(w_{-N/2}) = F(w_{N/2})$). Para o nosso caso, no entanto, não precisamos nos preocupar com valores de n maiores de $N/2$ porque a nossa $f(t)$ é real e, conseqüentemente, $F(-w) = F^*(w)$.

Integrando, então, a relação (3.105) entre $2\pi j/T - \delta w/2$ e $2\pi j/T + \delta w/2$, sendo j um inteiro e para δw suficientemente pequeno, teremos:

$$F(w_j) \delta w \approx A_j \quad (3.107)$$

Mas, no nosso caso discreto, $\delta w = 2\pi/N\Delta$ e $F(w_j) = F_j \Delta$. Logo:

$$A_n = 2\pi \frac{F_n}{N} \quad (3.108)$$

O objetivo de todos estes passos ficará claro assim que calcularmos A_n para o nosso transiente em específico. De (3.102) e (3.87), teremos, para n diferente de zero:

$$A_n = \frac{1}{T} \int_0^T \left[A_0^{trans} e^{-\frac{t}{\tau}} + B \right] e^{-i\frac{2\pi n}{T}t} dt = \frac{1}{T} \left[-A_0^{trans} \frac{T\tau}{T + 2\pi i n \tau} e^{-\frac{T+2\pi i n \tau}{\tau}t} \Big|_0^T - B \frac{T}{2\pi i n} e^{-\frac{2\pi i n}{T}t} \Big|_0^T \right]$$

$$\rightarrow A_n = \frac{A_0^{trans}}{T} \frac{T\tau}{T + 2\pi i n \tau} \left(1 - e^{-\frac{T}{\tau}} \right) \quad (3.109)$$

porque $e^{-2i\pi n} = 1$ (O coeficiente A_0 do transiente foi renomeado A_0^{trans} para evitar confusão com A_n em $n=0$).

Ou seja:

$$A_n = \frac{A_0^{trans}}{T} \frac{T\tau}{T^2 + (2\pi n \tau)^2} \left(1 - e^{-\frac{T}{\tau}} \right) [T - i2\pi n \tau] \quad (3.110)$$

Conseqüentemente, se dividirmos a_n por b_n (ver (3.103)), teremos:

$$\frac{a_n}{b_n} = -\frac{T}{2\pi n} \frac{1}{\tau} \quad (3.111)$$

de onde calcula-se τ . Uma vez calculado τ , A_0^{trans} também pode ser facilmente obtido de um a_n :

$$A_0^{trans} = a_n \frac{T^2 + (2\pi n \tau)^2}{T\tau} \frac{1}{1 - e^{-\frac{T}{\tau}}} \quad (3.112)$$

Para acharmos B , no entanto, precisamos de A_0 :

$$A_0 = \frac{1}{T} \int_0^T \left[A_0^{trans} e^{-\frac{t}{\tau}} + B \right] dt = \frac{1}{T} \left[-A_0^{trans} \tau e^{-\frac{t}{\tau}} \Big|_0^T + BT \right]$$

$$\rightarrow A_0 = B - \frac{A_0^{trans}}{T} \tau \left(e^{-\frac{T}{\tau}} - 1 \right) \quad (3.113)$$

Ou seja:

$$B = A_0 - \frac{A_0^{trans} \tau}{T} \left(1 - e^{-\frac{T}{\tau}} \right) \quad (3.114)$$

Alguns cuidados devem ser tomados na obtenção da Transformada Discreta de Fourier do transiente: o valor de Δ escolhido deve ser suficientemente pequeno ($1/\Delta$ deve ser maior que o dobro da maior frequência observada) para se evitar sobreposições espectrais (*aliasing effect* ^[56]); se $f(0) \neq f(T)$, como o é no nosso caso, f_0 deve ser calculado como $f_0 = \frac{f(0) + f(T)}{2}$ para evitar o surgimento de componentes de frequência não físicas no espectro. Feitas estas ressalvas, os valores dos F_n 's são fácil e rapidamente calculados usando-se um algoritmo do tipo FFT (*Fast Fourier Transform*) como descrito em [56].

3.7.3 Método dos Momentos

Outros algoritmos consideram o transiente como sendo dado por uma soma de exponenciais. Entre eles, está o chamado método dos momentos ^[47,51,57,58]. Neste caso, parte-se da resposta observada $F(t)$ dada pela convolução entre a resposta ideal $f(t)$ e uma função excitação $H(t)$:

$$F(t) = \int_0^t H(u) f(t-u) du \quad (3.115)$$

Para $f(t)$, assume-se a forma multi-exponencial com L exponenciais e sem a linha base (B no caso (3.87)): $f(t) = \sum_{i=1}^L D_i e^{-\frac{t}{\tau_i}}$. Por simplicidade, adotaremos uma função

excitação do tipo $H(t) = \delta(t)$ (o caso mais geral está descrito em ^[57]), de forma que $F(t) = f(t)$. Assim, os momentos μ_k desta última função serão dados por:

$$\mu_k = \int_0^{\infty} t^k F(t) dt = \int_0^{\infty} t^k f(t) dt \quad (3.116)$$

Podemos, então, definir os parâmetros G_s como:

$$G_s = \sum_{i=1}^L D_i \tau_i^s \quad (3.117)$$

Mas, substituindo $f(t)$ em (3.116) e fazendo a integral:

$$\mu_k = k! \sum_{i=1}^L D_i \tau_i^{k+1} = k! G_{k+1} \quad (3.118)$$

Ou seja, uma vez calculados numericamente os momentos μ_k , podemos encontrar $2L$ valores de G (k entre 0 e $2L-1$) e calcular os D_i 's e τ_i 's a partir do sistema de equações dado por (3.117). Mostrou-se ^[58] que os τ_i 's podem ser encontrados como as raízes da seguinte relação:

$$\begin{vmatrix} 1 & \tau & \dots & \tau^L \\ G_1 & G_2 & \dots & G_{L+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ G_L & G_{L+1} & \dots & G_{2L} \end{vmatrix} = 0, \quad (3.119)$$

restando, assim, apenas os coeficientes D_i para serem determinados através de (3.117).

Também cabem algumas ressalvas ao emprego deste método:

- (1) como vimos, a $f(t)$ é definida sem a linha base B . Esta linha base pode ser subtraída do sinal medido se conhecermos o seu valor. O jeito mais confiável de fazê-lo é pegar a cauda do transiente multi-exponencial, que pode ser considerada como mono-exponencial, e usar o método da Transformada de Fourier para calcular B (equação (3.114));

- (2) A integral em (3.116) é idealmente realizada entre os tempos zero e infinito. No entanto, a integral numérica é tomada entre 0 e T'. Assim, a diferença entre o μ_k real e o calculado será dada por:

$$\delta\mu_k = \int_{T'}^{\infty} t^k f(t) dt = \sum_{i=1}^L D_i \int_{T'}^{\infty} t^k e^{-\frac{t}{\tau_i}} dt \equiv \sum_{i=1}^L D_i I_{i,k} \quad (3.120)$$

Mas, integrando por partes:

$$I_{i,k} = \int_{T'}^{\infty} t^k e^{-\frac{t}{\tau_i}} dt = T'^k \tau_i e^{-\frac{T'}{\tau_i}} + k \tau_i \int_{T'}^{\infty} t^{k-1} e^{-\frac{t}{\tau_i}} dt = T'^k \tau_i e^{-\frac{T'}{\tau_i}} + k \tau_i I_{i,k-1} \quad (3.121)$$

Ou seja, uma vez encontrado $I_{i,0} = \tau_i e^{-\frac{T'}{\tau_i}}$, facilmente se obtém $I_{i,1}$, $I_{i,2}$, etc... Assim sendo, a idéia é usar inicialmente os valores calculados para μ_k e obter um conjunto inicial de τ_i 's e D_i 's. Usando estes valores, calculam-se os I's e, posteriormente, os $\delta\mu_k$'s. Usando estes $\delta\mu_k$'s, se obtém os μ_k 's e o processo todo se repete até não haver mais variação apreciável nos τ_i 's e D_i 's ou até se chegar a um número máximo de interações;

- (3) para dados muito ruidosos torna-se necessário fazer um “*smoothing*” antes de se aplicar o método;
- (4) o número L de expoentes deve ser determinado. Isto pode ser feito analisando-se o erro associado à diferença entre os pontos experimentais e o a curva obtida (erro este dado pela raiz da média dos quadrados destas diferenças) para diferentes valores de L. No entanto, mostrou-se ^[57] que esta estimativa é menos suscetível ao ruído se avaliarmos o erro associado entre os momentos calculados numericamente com os dados

experimentais e os momentos calculados a partir da curva de ajuste

$$\text{obtida: } rms_L = \sum_{k=0}^{2L} \frac{\left[\frac{\mu_k^{dados} - \mu_k^{curva}}{\mu_k^{dados}} \right]^2}{2L + 1}.$$

Na referência [51], estes dois últimos métodos (da Transformada de Fourier e dos Momentos) são comparados entre si e com o *Box-Car* para diferentes condições de ruído. O método dos momentos se mostrou superior aos demais, e o método da Transformada de Fourier provou-se uma alternativa superior ao *Box-Car* com baixo custo computacional.

3.7.4 Método da Transformada de Laplace

Estes últimos dois métodos, no entanto, são incapazes de extrair informações de transientes não-exponenciais ocasionados por distribuições contínuas das taxas de emissão (em muitos casos, não podemos aproximar em (3.8) $N_t(E)$ por uma delta. Isso pode ocorrer por diversos motivos: concentração muito alta do defeito, grandes variações na configuração dos vizinhos do defeito, efeitos ocasionados pela variação do campo elétrico na zona de depleção, etc... e o resultado prático é que não temos mais apenas valores discretos de e_n , mas sim uma distribuição contínua, ocasionando o aparecimento de transientes não-exponenciais). Para estes casos, existe um terceiro grupo de técnicas utilizadas na obtenção dos parâmetros relevantes destes transientes, entre as quais destacam-se aquelas baseadas na Transformada de Laplace.

Estas últimas possuem uma resolução em energia bem superior aos métodos de janelas de emissão, podendo revelar estruturas finas completamente ocultas nos outros

casos e até mesmo possibilitando a investigação da dependência da energia dos níveis com o campo magnético, *stress* uniaxial ou com a desordem cristalina. Entre os diversos métodos da Transformada de Laplace, introduziremos aqui o mais promissor ^[47] em termos de resolução para uma dada razão sinal / ruído: o que utiliza a regularização de Tikhonov.

Iniciaremos, porém, com algumas considerações matemáticas em relação ao nosso específico caso.

Para uma distribuição contínua de taxas de emissão (ou mesmo para distribuições discretas, substituindo as $g(\lambda)$ por deltas de Dirac), teremos:

$$f(t) = \int_0^{\infty} g(\lambda) e^{-\lambda t} d\lambda \quad (3.122)$$

que é a usual expressão para a Transformada de Laplace de $g(\lambda)$. Em princípio, este problema poderia ser resolvido usando-se a Transformada Inversa de Laplace ou integral de Bromwich:

$$g(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} f(t) e^{-\lambda t} dt \quad (3.123)$$

No entanto, o conhecimento que temos sobre a $f(t)$ se restringe apenas a valores reais de t , impedindo-nos de usar (3.123). Assim, nos resta tentar obter $g(\lambda)$ através de (3.122). Esta relação corresponde a um problema inverso (queremos determinar as causas a partir da observação dos efeitos) e mal-posto ^[59] (por definição, problemas mal-postos são aqueles que ou não têm solução, ou a solução não é única, ou ainda a solução não tem uma dependência contínua com os dados de entrada, o que significa que pequenas variações destes dados podem acarretar mudanças muito grandes na solução). Para verificar isto,

basta fazer uma pequena mudança de variáveis ($t \rightarrow e^y; \lambda \rightarrow e^{-x}; -\infty < x, y < \infty$) e transformar (3.122) em uma relação de convolução:

$$e^y f(e^y) \equiv F(y) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-e^{y-x}} e^{y-x} g(a^{-x}) dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} K(y-x)G(x)dx \quad (3.124)$$

Assim, teremos:

$$\mathfrak{Z}(F(y)) = \mathfrak{Z}(K(y))\mathfrak{Z}(G(y)) \quad (3.125)$$

Mas pode-se mostrar que $\mathfrak{Z}(K(y)) = \int_0^{\infty} t^{-iw} e^{-t} dt = \Gamma(-iw + 1)$. A Figura (3.8)

mostra as partes real e imaginária desta transformada em função de w . Note que $K(y)$ tem uma banda bem limitada, ou seja, $\mathfrak{Z}(K)(w) \rightarrow 0$ para $w \rightarrow \infty$. Em outras palavras, esta K atua como um filtro passa baixa para a $G(y)$. Desta forma, se pudermos definir uma frequência de corte w_0 , pegando uma função qualquer $G^0(y)$ tal que $\mathfrak{Z}(G^0(y))(w < w_0) = 0$, se $G(y)$ for solução de (3.124), então $G(y) + G^0(y)$ também o será. Ou seja, a solução não será única.

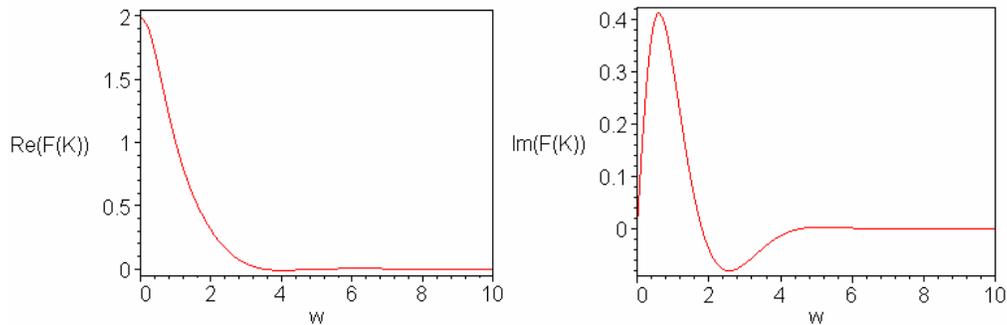


Figura 3.15. Partes real e imaginária de $\Gamma(-iw + 1)$.

Este problema se agrava ainda mais se somarmos um inevitável termo de ruído à $f(t)$. Qualquer pequena incerteza δ em $f(t)$ nos leva a uma quantidade de $g's(\lambda)$ bem

diferentes que serão solução de (3.122). Posto em outras palavras, uma pequena mudança na $f(t)$ pode provocar uma grande mudança nas possíveis $g(\lambda)$.

Partindo, então de (3.122) e introduzindo este termo de ruído ($e(t)$):

$$f(t) = \int_0^{\infty} g(\lambda)e^{-\lambda t} d\lambda + e(t) \quad (3.126)$$

A família dos possíveis $e(t)$ determinará uma grande família de g 's(λ) soluções de (3.126). A idéia, então, é usar propriedades físicas da solução $g(\lambda)$ conhecidas a priori para selecionar entre as possíveis soluções aquela que melhor as satisfaça.

Vamos assumir que $f(t)$ foi medida de $t = 0$ a T' e que $\frac{1}{T'} \int_0^{T'} e^2(t)dt = e_m$ constante.

Podemos, então, definir o seguinte funcional:

$$M_{\alpha}[g(\lambda), f(t)] = \frac{1}{T'} \int_0^{T'} \left(\int_0^{\infty} g(\lambda)e^{-\lambda t} d\lambda - f(t) \right)^2 dt + \alpha \Omega[g(\lambda)] \quad (3.127)$$

onde o primeiro termo corresponderá a e_m para as g 's que satisfaçam (3.126), Ω corresponde ao chamado funcional de regularização e α é o parâmetro de regularização. O funcional de regularização é uma medida da propriedade física a ser satisfeita pela melhor solução, de forma que quanto menor $\Omega[g]$, melhor é esta g . Assim, supondo e_m suficientemente pequeno, $M_{\alpha}[g]$ será uma medida do quão “correta” e física é uma solução g , e α determinará o balanço entre a aceitabilidade de funções quanto a seu caráter físico e sua “precisão” (no sentido de o quão próxima ela está de satisfazer (3.122)). Desta forma, a minimização de $M_{\alpha}[g]$ para um α corretamente escolhido nos fornecerá a melhor $g(\lambda)$.

Para exemplificar, uma propriedade muito comum é a suavidade da solução $g(\lambda)$.

Um dos funcionais regularizadores mais utilizados para este caso é:

$$\Omega[g(\lambda)] = \int_0^{\infty} \left\{ \frac{d^2 g(\lambda)}{d\lambda^2} \right\} d\lambda \quad (3.128)$$

Vale salientar que a correta utilização deste método passa, irrefutavelmente, por uma boa estimativa de α . Se o valor de α for muito pequeno, a função encontrada provavelmente não será física, e, se α for muito grande, a função encontrada poderá não ser uma boa solução para (3.126). Existem alguns métodos para a determinação de α , mas estes já fogem um pouco do objetivo desta secção que era apenas apresentar os principais métodos utilizados no DLTS.

3.8 Interpretação do plot de Arrhenius

O *plot* de Arrhenius foi definido, a partir de (3.82) $e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}$, como o gráfico de $e_n(T)/T^2 \times 1/T$ (ou, como vimos, $\tau T^2 \times 1/T$). Da inclinação da reta apresentada, deveria ser obtido $E_c - E_t$ e, de seu cruzamento com a ordenada, σ_n . No entanto, por uma série de motivos que detalharemos a seguir, não são exatamente estes valores que conseguimos retirar do gráfico. O objetivo desta sub-secção, por conseguinte, é não só expor estes motivos, como também determinar os verdadeiros dados que podem ser

retirados desta curva, sua utilidade e as formas de se obter, a partir deles e com a ajuda de dados auxiliares, todos os parâmetros necessários à caracterização dos níveis profundos.

Para começar esta série de considerações a respeito deste *plot*, precisamos entender o significado de $E_c - E_t$. Esta quantidade é definida como a energia necessária para excitar um elétron do nível em questão para a banda de condução, ou seja, para criar um par elétron livre / defeito ionizado fixo. Acontece que esta energia é dependente da temperatura. Assim, medidas que são feitas a temperaturas constantes, como fotoluminescência ou outras medidas óticas, irão corretamente resultar no valor $(E_c - E_t)(T)$, mas aquelas baseadas em um conjunto de dados obtidos a diferentes temperaturas, como no nosso caso, deverão ser mais cuidadosamente analisadas. Para entender um pouco melhor a dependência desta energia com T , podemos associar a definição acima exposta a quantidades termodinâmicas. Como descrito nas referências [60,61,62], a energia correspondente ao *gap* de um semicondutor é dada pela soma dos potenciais químicos para a formação de um elétron e uma lacuna. Analogamente, $E_c - E_t$ pode ser definido como a soma dos potenciais químicos de formação de um elétron livre e um defeito ionizado fixo. Mas o potencial químico de formação de um elétron livre multiplicado pela variação no número de elétrons livres e somado à multiplicação entre o potencial químico de formação do defeito ionizado e a variação do número destes defeitos ionizados é dado pela variação na energia livre de Gibbs à temperatura e pressão constantes^[63]. Ou seja:

$$\mu_{el} \Delta n + \mu_{def_ion} \Delta(N_t - n_t) = \Delta G|_{T,P} \quad (3.129)$$

Logo, se tivermos a formação de apenas um par elétron livre / defeito ionizado, chegaremos a:

$$\Delta G(T) = \mu_{el} + \mu_{def_ion} \equiv E_c(T) - E_t(T) \quad (3.130)$$

Este será o valor obtido em medidas a T e P constantes. Para o nosso caso, no entanto, teremos:

$$e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{\Delta G(T)}{kT}} \quad (3.131)$$

Lembrando novamente que este ΔG corresponde à criação de um único par.

Mas $\Delta G(T) = \Delta H - T\Delta S$, onde assumimos que a medida tenha sido feita em uma região limitada de temperaturas na qual se possa aproximar ΔH e ΔS independentes de T [43].

Assim, chegaremos a:

$$e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{\Delta H - T\Delta S}{kT}} = \sigma_n \chi_n \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{\Delta H}{kT}} \quad (3.132)$$

onde $\chi_n = e^{\frac{\Delta S}{k}}$.

Quando a relação (3.82), $e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}$, foi deduzida, consideramos $g_0/g_1 \approx 1$. De maneira mais correta, devemos introduzir este fator como um termo da variação de entropia. Ou seja, vamos redefinir ΔS como $\Delta S = \Delta S_{vibracional} + k \ln\left(\frac{g_0}{g_1}\right)$ para incluir o termo que havíamos anteriormente desprezado.

A relação (3.132) nos mostra que o verdadeiro valor retirado da inclinação do *plot* de Arrhenius não é $E_c - E_t$, mas está relacionado com a variação na entalpia do sistema devida à criação de um par elétron livre / defeito ionizado (veremos a seguir que a secção de choque também pode introduzir um termo na exponencial de (3.132)). Mesmo para o caso de uma região de temperaturas em que não se possa fazer ΔH independente de T, desde que se possa assumir ΔS independente de T, a inclinação da reta obtida do *plot* nos

fornecerá uma média de $\Delta H(T)$ dentro desta região de temperaturas (e valores da derivada do *plot* em relação a T^{-1} para cada T nos fornecerão $\Delta H(T)$).

Ou seja, mesmo no caso mais simples (em que a secção de choque não altera a expoente em (3.132)), medidas óticas à temperatura constante indicarão resultados diferentes dos obtidos com DLTS. Para estas primeiras, obteremos $\Delta G(T)$ e, para a última, $\Delta H(T)$. A diferença entre elas será dada por um termo envolvendo ΔS ($-T\Delta S$ mais exatamente), que está associado a mudanças nas configurações vibracionais (mudando a temperatura, varia-se a ocupação efetiva do nível, e esta ocupação influencia o acoplamento do defeito com a rede, causando uma mudança na entropia vibracional desta última) e eletrônicas (relacionadas à mudança nas degenerescências eletrônicas g_1 e g_0 com a variação na ocupação do nível) do defeito.

Outra importante questão que não foi considerada quando introduzimos o *plot* de Arrhenius é a dependência de σ_n com a temperatura. O processo de captura de portadores, que está diretamente relacionado à secção de choque de captura por (3.2), envolve a dissipação da energia correspondente à diferença entre a banda de condução, no nosso caso, e o nível do defeito. Esta dissipação pode ocorrer pela emissão de fótons, fônons ou por processos Auger (onde esta energia é transmitida para outros portadores livres)^[11]. Ou seja, há uma gama de diferentes processos que irão determinar σ_n e sua dependência com T. Por exemplo, no caso da captura por emissão de fônons múltiplos descrita em [11], a secção de choque de captura será da forma $\sigma_n \approx \sigma_\infty e^{-\frac{E_\sigma}{kT}}$; enquanto que, no caso da captura em cascata^[11], teremos $\sigma_n \propto \frac{1}{T^3}$.

Usando como exemplo a emissão de fônons múltiplos, a inclinação do *plot* de Arrhenius não nos dará o valor de ΔH , mas sim $\Delta H + E_{\sigma}$. Ou seja, neste caso, o valor obtido supostamente para $E_c - E_t$ será diferente não só dos valores obtidos por medidas a T constante (ΔG), como também dos valores obtidos através de outras medidas a temperatura variável (como Hall com T variável que nos dá ΔH).

De maneira geral, temos três grupos distintos de defeitos quanto à dependência de σ_n com T: um primeiro grupo corresponde a σ_n praticamente independente de T, o segundo, a uma dependência exponencial da forma $\sigma_n \approx \sigma_{\infty} e^{-\frac{E_{\sigma}}{kT}}$ e o terceiro, a uma dependência na forma de uma lei de potência $\sigma_n = cT^{-n}$. Para abrigar todos estes grupos na mesma relação, reescreve-se (3.132) como:

$$e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_{na} e^{-\frac{E_{na}}{kT}} \quad (3.133)$$

onde σ_{na} é chamado secção de choque aparente e E_{na} , energia aparente. Desta forma, teremos, para o primeiro grupo, $\sigma_{na} = \sigma_n \chi_n$ e $E_{na} = \Delta H$; para o segundo, $\sigma_{na} = \sigma_{\infty} \chi_n$ e $E_{na} = \Delta H + E_{\sigma}$; e, para o terceiro grupo, $\sigma_{na} = \sigma_n \chi_n$ e $E_{na} = \Delta H$.

Note que o *plot* de Arrhenius deve ser modificado para defeitos do terceiro grupo: ao invés de $e_n(T)/T^2 \times 1/T$, deveremos fazer de $e_n(T)/T^{2-n} \times 1/T$.

Resumindo, para podermos obter o verdadeiro valor $\Delta G(T)$, e que, portanto, possa ser comparado entre as diversas medidas, devemos usar outras técnicas que permitam achar $\sigma_n(T)$ (ver apêndice A) e, só então, usando os valores de σ_{na} e E_{na} , calcular ΔH e ΔS . No entanto, os valores de σ_{na} e E_{na} por si só são geralmente utilizados para catalogar os defeitos medidos. Existem várias tabelas com os valores medidos de σ_{na} e E_{na} para os mais diversos

níveis em diferentes semicondutores. A Tabela 2 é um exemplo resumido destas tabelas para o caso específico do GaAs.

Tabela 3.2 – Exemplo de tabela catalogando níveis por suas secção de choque aparente e energia aparente. Referência [22].

Centros de Captura de Elétrons	σ_{na} (10^{14} cm ²)	E_{na} (eV)	Tipo de crescimento das amostras de GaAs em que o centro é observado
EL2	10	0,82	VPE, bulk, MOCVD
EL4	100	0,51	MBE, MOCVD
EL5	20	0,42	VPE, LEC
EL6	150	0,35	bulk, VPE, LEC
EL8	0,8	0,27	VPE, MBE
EL9	0,7	0,22	VPE
EL10	0,7	0,17	MBE, VPE
EL12	500	0,78	MBE, VPE, bulk
EL14	0,05	0,21	Bulk
EL16	0,0004	0,37	VPE
EI1	0,07	0,43	VPE
EI2	1	0,19	VPE
EI3	2	0,18	VPE
EB1	3,5	0,86	LPE
EB7	1,7	0,3	MBE
E	30	0,74	MOCVD

Centros de Captura de Lacunas	σ_{pa} (cm ²)	E_{pa} (eV)	Tipo de crescimento das amostras de GaAs em que o centro é observado
HT1	1×10^{-14}	0,44	VPE
HS1	2×10^{-19}	0,58	LPE
HS2	4×10^{-16}	0,64	LPE, VPE
HS3	5×10^{-18}	0,44	LPE
HB1	5×10^{-16}	0,78	LPE, VPE
HB2	1×10^{-14}	0,71	LPE, VPE
HB3	$3,5 \times 10^{-16}$	0,52	LPE, MBE
HB4	$3,5 \times 10^{-14}$	0,44	LPE, VPE
HB5	2×10^{-13}	0,4	LPE, bulk
HL3	3×10^{-15}	0,59	VPE
HL6	$5,5 \times 10^{-14}$	0,32	VPE
HL7	$6,5 \times 10^{-15}$	0,35	MBE
HL12	$1,3 \times 10^{-14}$	0,27	LPE

Ou seja, o par (σ_{na}, E_{na}) é usado como uma assinatura para cada nível. As assinaturas de diversos níveis estão publicadas na literatura, e, então, o DLTS por si só pode conseguir identificar alguns defeitos.

Há ainda uma última consideração que deve ser feita quanto ao *plot* de Arrhenius.

A relação (3.82), $e_n(T) = \gamma T^2 \sigma_n e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}$, foi deduzida para a condição de equilíbrio usando-se o princípio do balanço detalhado. Mas, na medida, os níveis estão sujeitos a um campo elétrico aplicado. Se este campo for suficientemente pequeno, as taxas de emissão não serão praticamente perturbadas de seu valor no equilíbrio, mas, se o forem, efeitos como o de Frenkel-Poole, emissão por tunelamento e emissão por tunelamento assistido por fônons^[11,43] poderão alterar consideravelmente as taxas de emissão, tornando a interpretação padrão inválida. Imaginando o caso mais simples, estes efeitos podem introduzir um deslocamento na energia aparente medida (para Frenkel-Poole, $e_n(\mathcal{E}) = e_{n0} e^{\frac{\Delta E_t(\mathcal{E})}{kT}}$, $\Delta E_t(\mathcal{E}) \propto \sqrt{\mathcal{E}}$). Mas, notando que o campo elétrico na zona de depleção é uma reta para o caso de concentrações uniformes de dopantes e de níveis profundos, é fácil visualizar que o campo irá alargar a distribuição de e_n ($g(e_n)$ em (3.122)), dando origem a transientes cada vez menos exponenciais. O tunelamento direto é improvável para campos inferiores a 10^7 V cm⁻¹, mas, para os outros dois efeitos, campos pouco maiores que 10^4 V cm⁻¹ podem ser suficientes. Este valor é bem baixo (correspondendo a uma variação linear do potencial de 1V em 1μm, por exemplo), de forma que o que se faz normalmente é usar amostras pouco dopadas e pulsar entre duas tensões reversas não muito diferentes para analisar apenas os defeitos que ficam na região com campos mais baixos. Mesmo assim, é

usual aplicar-se diferentes tensões reversas, para se observar se os espectros obtidos sofrem alguma alteração.

3.9 Medindo centros de captura de minoritários

Até agora usamos, como exemplo base para a derivação de todo o método, um centro de captura de majoritários com $E_t(x \rightarrow \infty) < E_{fe}$ em um semiconductor *tipo-n*. Note que qualquer centro de captura de majoritários pode ser colocado nesta condição aumentando-se suficientemente N_d (lembrando que estamos analisando níveis profundos, ou seja $E_c - E_t > E_c - E_{doadores}$). O caso de centros de captura de majoritários em material *tipo-p* é completamente análogo, bastando trocar-se as grandezas envolvidas de forma coerente (por exemplo, neste caso, os níveis cheios, de lacunas, serão dados por $p_i(t) = N_t - n_i(t)$, o quase-nível de Fermi adequado é E_{fh} , etc...). No entanto, o caso dos centros de captura de minoritários merece especial atenção.

Como anteriormente descrito nas seções 3.3 e 3.4, o caso dos centros de captura de minoritários é um pouco mais complicado. Eles não geram um transiente após um pulso de 0V como no caso dos centros de captura de majoritários porque, desconsiderando a possível região em que $E_t > E_{fh}$, o estado estacionário para estes níveis após restaurar-se a tensão reversa é igual ao estado inicial (ou seja, o estado estacionário obtido a 0V, para

pulsos suficientemente longos), que corresponde a todos estes níveis com o elétron (vazios se pensarmos nas lacunas como o portador padrão para este caso).

Então, para observarmos transientes oriundos de emissão nestes níveis, de alguma forma teremos que enchê-los inicialmente de lacunas. Como já dito anteriormente, há diferentes métodos para fazê-lo, sendo os mais comuns aplicar-se luz com $E_c - E_t < h\nu < E_g$ para que os elétrons destes níveis sejam emitidos opticamente para a banda de condução e rapidamente expulsos da depleção pelo campo elétrico, gerando um estado estacionário onde a ocupação destes níveis será diferente da descrita acima e, conseqüentemente, propiciando a observação de um transiente quando a luz for “apagada”, ou aplicar-se uma tensão direta em uma junção p-n, injetando-se minoritários que poderão ser capturados por estes níveis. Nos ateremos a descrever este último caso em maior detalhe.

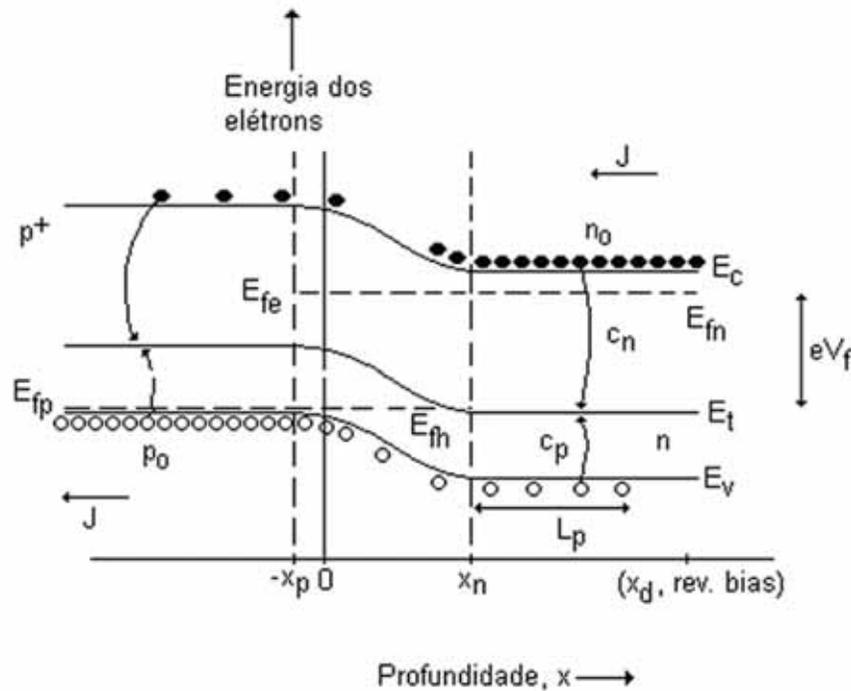


Figura 3.16. Diagrama de bandas para uma junção p⁺-n diretamente polarizada com $0 < V_f < V_{bi}$. $x=0$ é a interface entre o material tipo-n e o tipo-p, x_p é a profundidade da depleção (à tensão direta V_f aplicada) no lado p⁺, x_n é a profundidade da depleção no lado n, E_{fe} e E_{fh} são os quase-níveis de Fermi e J é a densidade de corrente. Referência [43].

Seja um diodo p⁺-n (desconsideraremos a pequena região de depleção no lado *tipo-p*) sobre o qual é aplicada uma pequena tensão direta V_f tal que 0 < V_f < V_{bi}. O diagrama de bandas para este caso está representado na Figura 3.16.

De (3.25) e (3.26):

$$n(x) = n_i e^{\frac{E_{fe} - E_i(x)}{kT}} = N_c e^{\frac{E_c(x) - E_{fe}}{kT}}$$

$$p(x) = n_i e^{\frac{E_i(x) - E_{fh}}{kT}} = N_v e^{\frac{E_v(x) - E_{fh}}{kT}}$$

$$\rightarrow n(x)p(x) = n_i^2 e^{\frac{E_{fe} - E_{fh}}{kT}} = n_i^2 e^{\frac{eV_f}{kT}} \quad \text{para } -x_p < x < x_n \quad (3.134)$$

$$\rightarrow p_n(x_n) = \frac{n_i^2}{n(x_n)} e^{\frac{eV_f}{kT}} = \frac{n_i^2}{n_o} e^{\frac{eV_f}{kT}} = p_{n0} e^{\frac{eV_f}{kT}} \quad (3.135)$$

onde n(x_n) = n₀ é a concentração de equilíbrio de majoritários no lado *tipo-n* e p_{n0} é a concentração de equilíbrio de minoritários deste mesmo lado (n₀ p_{n0} = n_i²).

Pode-se^[64] mostrar que a densidade de portadores minoritários injetados no lado n do diodo cai exponencialmente para valores de x maiores que x_n através de:

$$p_n(x) - p_{n0} = \{p_n(x_n) - p_{n0}\} e^{-\frac{x - x_n}{L_p}} \quad (3.136)$$

onde L_p é chamado comprimento de difusão e é dado por: L_p = √(D_pτ_p), onde D_p = μ_p $\frac{kT}{e}$

e τ_p é o tempo de vida das lacunas (minoritárias no lado *tipo-n*).

Ou seja, podemos dizer que as lacunas são injetadas até profundidades da ordem de alguns comprimentos de difusão L_p mais a profundidade da depleção à tensão direta aplicada, x_n. Assim, L_p será uma grandeza muito importante neste caso. Por exemplo, se L_p > x_d (chamaremos de x_d a profundidade da depleção quando a tensão reversa usada for aplicada), então poderemos preencher níveis em todo x < x_d e observaremos um transiente

devido a todos eles quando voltarmos à situação de tensão reversa aplicada. Agora, se $L_p < x_d$, teremos apenas uma parte da depleção total à tensão reversa aplicada ($0 < x < x_d$) com níveis preenchidos.

Na verdade, esta questão é bem mais complexa, porque, a menos que $L_p \gg x_d$, a relação (3.136) nos mostra que haverá uma variação considerável em $p_n(x)$ na região $0 < x < x_d$. Como c_p é diretamente proporcional a p , poderemos ter um perfil não uniforme de $p_t(x)$ mesmo com $L_p > x_d$. Na verdade, o que determinará se este perfil será ou não

uniforme, desprezando-se e_n e e_p , vai ser a razão entre as secções de choque $\frac{\sigma_p}{\sigma_n}$: se $\sigma_p \gg$

σ_n de forma que $c_n \ll c_p$ em toda esta região mesmo com $n_0 \gg p_n(x)$, teremos todos os níveis preenchidos com lacunas. Mas se σ_p não for suficientemente maior que σ_n teremos uma distribuição não uniforme $p_t(x)$. Para o caso $L_p < x_d$, podemos definir uma nova região

$0 < x < x_n + L_p$ onde ou teremos p_t uniforme (e dado por N_t) para $\frac{\sigma_p}{\sigma_n} \gg 1$, ou teremos,

mesmo nesta região, um perfil não uniforme $p_t(x)$ (caso em que $\frac{\sigma_p}{\sigma_n}$ não consegue ser

suficientemente grande). Para a região $x_n + L_p < x < x_d$, neste caso, aproximamos $p_t = 0$.

De qualquer forma, existindo uma região com p_t uniforme ou não, após voltarmos à situação de tensão reversa aplicada, os centros de captura de minoritários que conseguiram capturar a lacuna e estiverem dentro da zona de depleção irão emití-la termicamente (níveis que capturaram a lacuna no pulso, mas ficam fora da zona de depleção não interferem na medida). Assim, teremos, para uma medida de capacitância a V constante, por exemplo:

$$\Delta C(t) = \Delta C_0 e^{-e_p t} \quad (3.137)$$

E, usando os convencionais métodos de DLTS, poderemos facilmente obter e_p (T) que nos fornecerá a assinatura destes centros de captura de minoritários. O grande problema está, então, na estimativa da concentração N_t a partir de ΔC_0 .

A partir de (3.24), se o tempo correspondente à largura do pulso de tensão direta for suficiente grande, teremos:

$$n_t(t_{fim_do_pulso}) = \frac{c_n + e_p}{c_n + e_p + c_p + e_n} N_t$$

$$\rightarrow p_t(t_{fim_do_pulso}) = N_t - n_t(t_{fim_do_pulso}) = \frac{c_p + e_n}{c_p + e_p + c_n + e_n} N_t \quad (3.138)$$

Para um V_f suficientemente alto para que se possa desprezar e_n e e_p :

$$\rightarrow p_t(x, t_{fim_do_pulso}) = \frac{c_p(x)}{c_p(x) + c_n} N_t \quad (3.139)$$

Ou seja, de uma forma geral, teremos que voltar à relação (3.61) e trocar $n_t(x,t)$ por $N_t - p_t(x,t)$:

$$V(t) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left\{ \int_0^{x_d(t)} xN^+(x)dx + \int_0^{x_1(t)} xN_t(x)dx - \int_{x_2}^{x_1(t)} xn_t(x,t)dx \right\}$$

$$\rightarrow V(t) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left\{ \int_0^{x_d(t)} xN^+(x)dx + \int_0^{x_1(t)} xN_t(x)dx - \int_{x_2}^{x_1(t)} xN_t(x)dx + \int_{x_2}^{x_1(t)} xp_t(x,t)dx \right\} \quad (3.140)$$

onde, neste caso, x_2 será a profundidade em que E_t cruza E_{fh} para a tensão reversa aplicada (normalmente $x_2 = 0$) e $x_1(t)$ será dado ou por $x_d(t) - \lambda'$ (também existe, para o caso de centros de captura de minoritários, uma região dentro da depleção em que a captura de elétrons prevalecerá à emissão das lacunas) ou por $x_n + L_p$ se L_p não for suficientemente grande.

No entanto, se a razão $\frac{\sigma_p}{\sigma_n}$ for suficientemente alta, teremos $p_t = N_t$ (para

$x_2 < x < x_1(0)$, $t = 0$). Nesta situação, ficaremos simplesmente com:

$$\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left(\frac{x_1}{x_d} \right)^2 \frac{N_t}{N_d} \quad (3.141)$$

onde, novamente, x_1 será dado ou por $x_d - \lambda'$ ou por $x_n + L_p$ (se L_p não for suficientemente grande).

Mesmo neste caso ideal, ainda há uma última complicação: λ' não é constante como o era para os centros de captura de majoritários. No entanto, como descrito em [43], pode-se usar um valor efetivo para λ' (que servirá como uma distância característica para separar a contribuição da captura de elétrons do transiente).

3.10 Uma Última Consideração

O último ponto que merece um melhor esclarecimento está na classificação dos níveis aqui adotada. Inicialmente, dividimos os principais comportamentos observados para os níveis profundos em: centros de captura de elétrons ($e_n \gg c_p$, $c_n \gg e_p$), centros de captura de lacunas ($c_p \gg e_n$, $e_p \gg c_n$), centros de recombinação ($c_p \gg e_n$, $c_n \gg e_p$) e centros de geração ($e_n \gg c_p$, $e_p \gg c_n$). Após dividimos todos os níveis entre centros de captura de majoritários ($E_t > E_1$ para materiais *tipo-n* e $E_t < E_1$ para materiais *tipo-p*) e

centros de captura de minoritários ($E_t < E_1$ para materiais *tipo-n* e $E_t > E_1$ para materiais *tipo-p*) devido ao diferente comportamento observado para cada um destes conjuntos de níveis em uma zona de depleção. O uso da expressão “centro de captura” nos casos citados acima ao invés de armadilhas tem um único intuito: reservar a palavra armadilha àqueles defeitos que efetivamente aprisionam portadores livres. Por exemplo, imagine um defeito que foi criado com carga nula e possui dois possíveis estados de carga: nula e -. Digamos também que o nível correspondente à transição $0/-$ se situe suficientemente próximo à banda de valência, de forma que, considerando-se material *tipo-n* com $N_d \gg N_t$, este nível atue como um centro de captura de lacunas no equilíbrio e seja um centro de captura de minoritários. Mas na situação de equilíbrio no *bulk*, o nível de Fermi, para temperatura ambiente, ficará próximo ao nível dos doadores; conseqüentemente, os níveis correspondentes ao defeito estarão praticamente todos no estado de carga “-”. Ou seja, efetivamente, embora se comuniquem quase que exclusivamente com a banda de valência (sendo chamados centros de captura de lacunas) e tenham $E_t < E_1$ (e, portanto, sejam centros de captura de minoritários em materiais *tipo-n*), estes níveis reduzirão o número de elétrons livres na condução, e o defeito será caracterizado como uma armadilha de elétrons.

Estas notações são normalmente motivo de confusão; por isso, desde já é importante deixar muito claro o modo como serão utilizadas as expressões “centro de captura” e “armadilha” ao longo deste texto. Repetindo suas definições: a designação “centro de captura” representa aqueles níveis que, na situação em questão, se comuniquem apenas com uma banda (centros de captura de elétrons ou lacunas para as bandas de condução e valência respectivamente) ou aqueles níveis que têm E_t maior ou menor que E_1 (respectivamente centros de captura de majoritários ou minoritários em materiais *tipo-n* ou o inverso para *tipo-p*); a palavra “armadilha” (de elétrons ou de lacunas), por sua vez, será

destinada àqueles defeitos que, na situação em questão, efetivamente diminuirão o número dos respectivos portadores livres (elétrons ou lacunas). Na literatura, não é incomum encontrar estas definições todas misturadas e mal interpretadas. Mas, assim como é verdade que existem armadilhas de elétrons cujo nível (ou níveis) atua como um centro de captura de elétrons no equilíbrio e é um centro de captura de majoritários em material *tipo-n* (o que tende a nos levar à interpretação errônea de que estes conceitos sejam equivalentes), como vimos no exemplo dado acima, também há casos em que um centro de captura de um dado portador corresponde a uma armadilha do outro portador.

3.11 Conclusões

As principais características da espectroscopia de transientes de níveis profundos (DLTS) e os conceitos envolvidos em sua formulação foram expostos e analisados. O DLTS revela-se uma medida bastante poderosa, mas não auto-suficiente. Embora possa fornecer diretamente uma assinatura do nível observado e sua concentração, é apenas com o apoio de uma medida auxiliar de seções de choque de captura de portadores neste nível que ela poderá obter resultados mais concretos, especificando todos os parâmetros necessários à caracterização do nível (seções de choque, concentração e energia em relação a uma das bandas (obtida a partir de ΔH e ΔS)). Mesmo assim, estes parâmetros sozinhos não são

suficientes para uma associação defeito / nível. Ou seja, para se tentar descobrir os defeitos aos quais correspondem os níveis medidos, é necessária a comparação dos resultados obtidos do DLTS com resultados de diversas outras medidas como EPR, EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine Structure*), aniquilação de pósitrons, etc..., além de associações entre características dos defeitos (como temperaturas de recozimento, taxas de introdução por irradiação, etc ...) e comportamentos dos níveis medidos. De fato, na área do estudo de defeitos profundos em semicondutores, as medidas são em geral complementares, e, dentro deste contexto, o DLTS desempenha um papel fundamental principalmente por sua alta sensibilidade (como já foi dito, esta medida é capaz de detectar pequenas concentrações de níveis profundos) e capacidade de identificar níveis previamente tabelados.

CAPÍTULO 4. ISOLAÇÃO DE GaAs TIPO-P

4.1 Introdução

As aplicações de camadas de GaAs *tipo-p* são diversas, indo desde a confecção de dispositivos de optoeletrônica até a implementação de circuitos integrados. Para este material, a implantação iônica apresenta uma outra importante aplicação além da dopagem do semiconductor: a isolação elétrica. Há algum tempo já se sabe que a implantação de íons neste tipo de semiconductor causa a diminuição de sua condutividade, podendo gerar regiões altamente resistivas ($\sim 10^9 \Omega/\square$ [13]). No entanto, ainda hoje este processo não é completamente entendido, e novas experiências são de grande valia na procura de respostas para o assunto.

Como se constata no capítulo 2, há uma boa quantidade de trabalhos envolvendo a isolação de camadas *tipo-n* de GaAs por implantação. No entanto, o caso da isolação de camadas *tipo-p* deste material ainda não havia ganho o mesmo destaque. Dentre os poucos trabalhos realizados sobre este assunto, merecem maior atenção os dados apresentados por J. P. de Souza, I. Danilov e H. Boudinov^[37]. Eles averiguaram que a mesma dose de prótons de 50 keV ou de He⁺ de 80 keV é necessária para se isolar amostras de GaAs *tipo-n* (dopadas com Si) ou *tipo-p* (dopadas com Mg) com concentrações de folha de portadores semelhantes e associaram esta isolação a defeitos do tipo anti-sítios (Ga_{As} para *tipo-n* e

As_{Ga} para *tipo-p*; assim, como as massas de ambos átomos são semelhantes, o mesmo número de armadilhas de elétrons e lacunas seria criado pela dose de limiar (D_{th})).

No presente trabalho, investigaremos a dependência desta isolação em amostras *tipo-p* com a sub-rede em que é ativado o dopante. Para tanto, utilizaremos como dopantes o C que é um dopante *tipo-p* da rede do As com energia de ionização de $\sim 26,8$ meV^[65] e o Mg que é um dopante *tipo-p* da rede do Ga com energia de ionização de $\sim 28,6$ meV^[65]. Este estudo tem sua relevância não apenas na tentativa de esclarecer os processos de isolação como também em caracterizar a isolação de amostras de GaAs dopadas com C que, embora possua uma ativação pequena^[66,70], se comparada aos demais dopantes *tipo-p* (principalmente os da coluna II: Be, Mg, Zn e Cd) quando de sua introdução via implantação (por epitaxia é possível atingir ativações bem maiores^[67]), apresenta uma difusividade^[67,68] bem menor que a destes últimos, sendo usualmente empregado em aplicações que necessitem de perfis rasos ou abruptos com concentração de dopantes maiores que 1×10^{18} cm⁻³.

4.2 Descrição experimental

Para a realização deste trabalho, utilizamos bolachas semi-isolantes de *Liquid Encapsulated Czochralski* (LEC) GaAs com orientação (100). As amostras foram limpas, usando uma mistura de tricloroetano, acetona e álcool, e divididas em dois grupos (I e II). Nas do grupo I, implantamos ²⁴Mg⁺ até a dose de $2,5 \times 10^{13}$ cm⁻², à temperatura ambiente e à energia de 900 keV. Para as do grupo II, o íon usado foi o ¹²C⁺, e a dose atingida foi de

$5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. A energia usada neste caso também foi de 900 keV, e, novamente, a implantação foi conduzida à temperatura ambiente. Após esta etapa de implantação, ambos os grupos de amostras foram recozidos a 950°C , por 10 s, em um forno de recozimento rápido (RTA – *Rapid Thermal Annealing*) para a ativação dos respectivos dopantes. Durante este recozimento, as superfícies das amostras foram cobertas com outras bolachas de GaAs para evitar a perda de As nestas regiões.

Então, pela aplicação manual de quatro contatos ôhmicos pontuais de In (com subsequente recozimento a 200°C por 2 minutos para assegurar a qualidade destes contatos), fizemos uma amostra do tipo Van der Pauw para cada grupo. Estas amostras foram usadas para medidas Hall, que revelaram uma ativação de 80% para o Mg e 24% para o C. Estes percentuais de ativação foram utilizados para calcularmos, usando o progra-

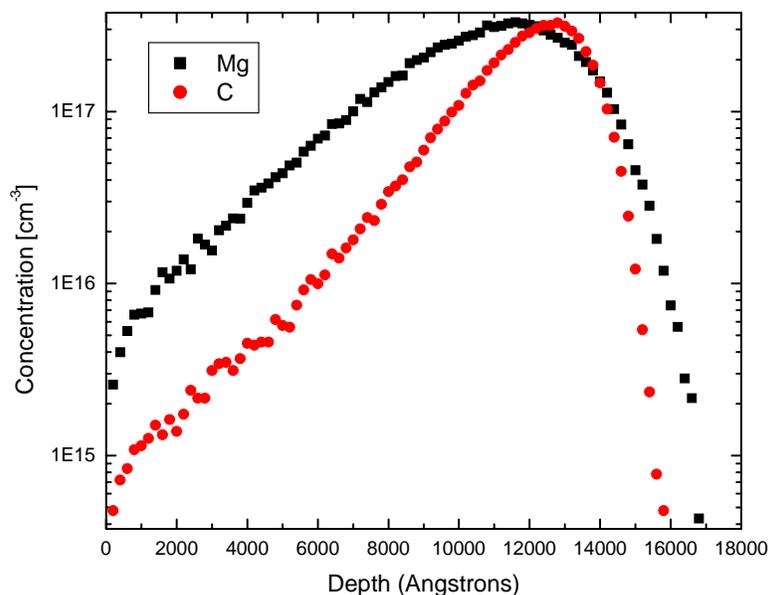


Figura 4.1. Simulação TRIM ^[14,69] dos perfis de dopantes normalizados pelo percentual de ativação.

ma de simulação TRIM^[14,69], os perfis de dopantes. Os valores apresentados acima foram escolhidos para que tivéssemos equivalentes concentrações de portadores (lacunas, no nosso caso) no pico de ambos os perfis. A Figura 4.1 mostra uma simulação dos dois perfis normalizados por estas porcentagens de ativação.

As demais bolachas de ambos os grupos foram quebradas em resistores retangulares (6 mm x 3 mm) como representado na Figura 4.2. Após, formamos os contatos ôhmicos aplicando manualmente duas tiras (com largura aproximada de 0,5 mm e comprimento de 3 mm) de In em cada amostra (uma tira em cada um dos lados menores do retângulo) e recozendo as amostras a 200°C por 2 minutos. Estas tiras de In foram suficientemente espessas para prevenir que as posteriores implantações para isolação danificassem o contato ôhmico (elas serviram como máscaras para estes).

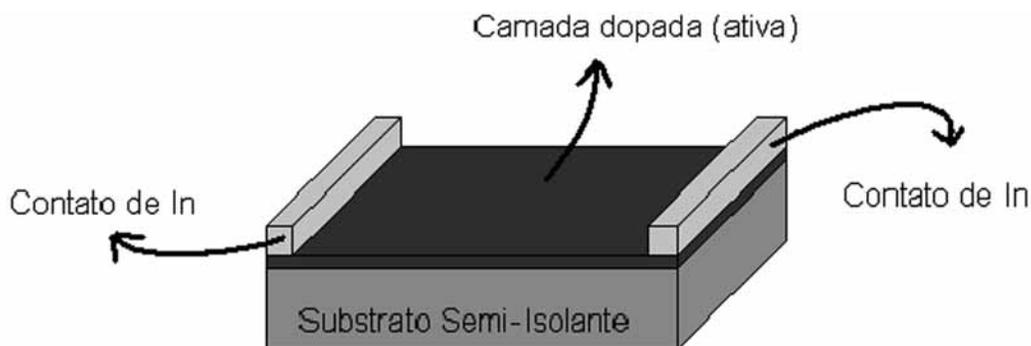


Figura 4.2. Montagem dos resistores utilizados neste trabalho. As dimensões da superfície retangular são 6 mm x 3mm (o desenho não está em escala). Os contatos são feitos pela aplicação manual de In.

Uma vez preparados os resistores, realizamos as implantações para isolação. Foram utilizados íons de $^1\text{H}^+$ à energia de 400 keV e à temperatura ambiente. Esta energia de 400 keV foi escolhida para posicionar o pico do perfil de defeitos gerados nesta implantação suficientemente distante da região ativa, de forma que, ao longo desta última,

observássemos uma distribuição praticamente constante de defeitos (ver Figura 4.4). As doses implantadas ficaram na faixa de $5,0 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a $2,0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, utilizando-se sempre densidades de corrente inferiores a $0,3 \text{ } \mu\text{A/cm}^2$. Para evitar a canalização dos íons incidentes, a amostra foi inclinada de tal forma que a normal à sua superfície ficasse a 7° da direção do feixe.

Para um resistor de cada um dos grupos, os valores de resistência de folha (R_s) foram medidos enquanto a dose de prótons era acumulada. Utilizamos o eletrômetro Keythley 617 para obter os valores de resistência que foram, então, convertidos em R_s usando-se a geometria das amostras, que foi comentada acima. Esta medida foi feita *in situ*. Em cada um dos demais resistores, implantamos uma determinada dose de prótons em um único passo. Após a implantação de isolamento, estas amostras sofreram tratamentos térmicos em um forno de recozimento térmico rápido com lâmpadas halógenas e controle automático da temperatura. Os ciclos de recozimento adotados tiveram duração de 60s, faixa de temperatura de 100 a 700°C e foram realizados em atmosfera de argônio. Ciclos a diferentes temperaturas foram acumulados na mesma amostra.

4.3 Resultados e discussão

As medidas Hall realizadas nas bolachas que não tinham sofrido a implantação de isolamento (apenas a implantação de dopantes) revelaram os dados apresentados na Tabela 4.1. Note-se que as concentrações de folha de lacunas obtidas correspondem a uma ativação de 80% no caso do Magnésio (a dose de implantação foi de $2,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) e apenas 24% no

caso do carbono (dose de implantação de $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$). Íons de elementos da coluna II como Mg, Be, Zn e Cd são geralmente empregados para a obtenção de camadas *tipo-p* altamente dopadas por implantação em GaAs porque possuem uma elevada ativação (podendo-se atingir $\sim 10^{19}$ lacunas por centímetro cúbico ^[70]). O carbono, por sua vez, é um elemento da coluna IV e, como já foi dito, atua como um dopante aceitador quando introduzido substitucionalmente na rede do As. A ativação elétrica dos íons de C introduzidos por implantação é bem menor que a obtida para elementos da coluna II, gerando uma concentração de lacunas tipicamente inferior a $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ^[67] (embora o dopante carbono possa gerar uma concentração de $\sim 5 \times 10^{20}$ lacunas por centímetro cúbico ^[67] se introduzido durante o crescimento do cristal de GaAs). Apesar de um caráter anfótero já ter sido atribuído a este dopante na literatura ^[66], o que poderia explicar sua baixa ativação, um trabalho mais recente ^[67], explorando o comportamento da mobilidade das lacunas em amostras de GaAs implantadas com diferentes doses de C, mostrou que a fração da concentração de C que não é ativada como dopante *tipo-p* permanece eletricamente neutra no material.

Tabela 4.1 Caracterização dos dois grupos de amostras antes da implantação de isolamento.

Amostras	R_s (Ω/\square)	p_s (cm^{-2})	μ_p (cm^2/Vs)
Grupo I (Mg)	1900	$2,0 \times 10^{13}$	165
Grupo II (C)	7500	$1,2 \times 10^{13}$	70

A evolução da resistência de folha R_s nas amostras dopadas com Mg e C com o acúmulo da fluência de prótons está representada na Figura 4.3. O valor de R_s medido para a amostra dopada com carbono, inicialmente (para as menores doses de prótons implantadas), é maior que aquele obtido para a amostra com Magnésio, como era de se esperar tendo em vista os valores apresentados na Tabela 4.1 (as amostras dopadas com carbono têm, antes da implantação de isolamento, resistência de folha maior porque possuem concentração de folha de lacunas e mobilidade de lacunas menores que aquelas observadas no caso da dopagem com Mg). Durante a acumulação da dose até valores da ordem de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, a resistência de folha medida em ambas as amostras cresce devido ao aprisionamento de lacunas livres e à degradação da mobilidade destas lacunas^[37]. Como vimos, ao valor da dose implantada para o qual atinge-se o máximo de R_s ($\sim 2 \times 10^9 \text{ } \Omega/\square$, o que é equivalente à resistência de folha da camada semi-isolante abaixo da região ativa) dá-se o nome de dose de limiar para a isolamento (D_{th}). Note que este valor é semelhante para ambas amostras ($\sim 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) embora o carbono seja um dopante da sub-rede do As e o magnésio da sub-rede do Ga. Como foi frisado anteriormente, a concentração de lacunas no pico das distribuições dos dopantes é praticamente a mesma nos dois casos (a dose da implantação de dopantes foi escolhida para tal). Assim, o fato de termos a mesma dose de limiar (o que corresponde à mesma concentração de defeitos de rede na camada ativa) nos dois casos indica que os principais mecanismos físicos responsáveis pela isolamento (pelo menos até estes valores de dose de implantação) não foram fortemente alterados pela posição dos dopantes (em uma ou outra sub-rede). Para doses maiores que D_{th} , não há praticamente portadores livres na região ativa, e, conseqüentemente, R_s satura, formando um platô na curva R_s x dose de prótons implantada (como o discutido anteriormente, a

resistência de folha da camada ativa, nesta faixa de doses, não mais será inferior àquela do substrato semi-isolante, e, efetivamente, mediremos um valor correspondente a esta última camada). Este comportamento persiste até a dose em que a quantidade de defeitos criados no pico da distribuição for suficientemente grande para que se tenha condução entre os defeitos (condução *hopping*^[8]). Posteriores acúmulos de dose apenas tornarão a condução *hopping* mais forte, diminuindo o valor obtido para R_s .

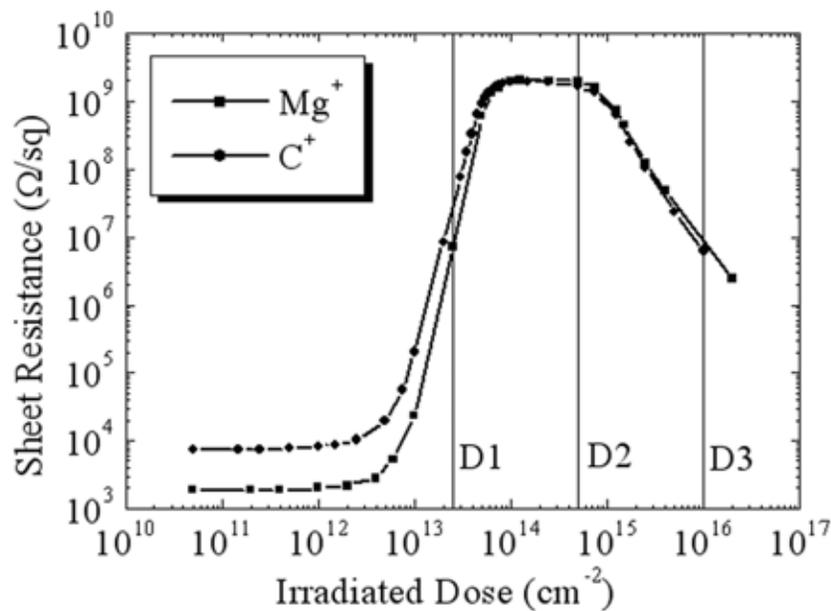


Figura 4.3 Evolução da resistência de folha de resistores de GaAs *tipo-p* dopados com Mg e C durante o acúmulo da dose implantada de H⁺ a 400 keV. As doses D₁, D₂ e D₃ correspondem aos valores utilizados nas medidas de estabilidade térmica.

Trabalhos anteriores^[37,13] haviam sugerido que defeitos de anti-sítio (As_{Ga} e Ga_{As}) desempenhavam um papel crucial na remoção de portadores após a irradiação em GaAs. Acredita-se^[22] que o anti-sítio de As é um duplo doador (possíveis estados de carga 0/+ /++) e que o anti-sítio de Ga é um duplo aceitador (possíveis estados de carga 0/- /--). A Figura

4.4 mostra o perfil da concentração de portadores nas amostras dos grupos I e II simuladas pelo programa TRIM ^[14,69] (normalizando-se os perfis de dopantes com as obtidas ativações, e considerando-as uniformes), comparando-o com a estimada (dividindo-se o perfil da concentração de colisões substitucionais por 4) concentração de anti-sítios de As para a implantação de prótons até a dose de limiar ($1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$). Observe-se que a dose de limiar é aquela suficiente para isolar a região correspondente ao pico da distribuição de portadores livres. Olhando na figura nesta região, a concentração de anti-sítios de As é praticamente a metade da concentração de lacunas, evidenciando que estes defeitos são realmente fortes candidatos a defeitos responsáveis pela isolação (como dito anteriormente, anti-sítios de As são duplos doadores, o que implica que cada defeito pode armadilhar até duas lacunas).

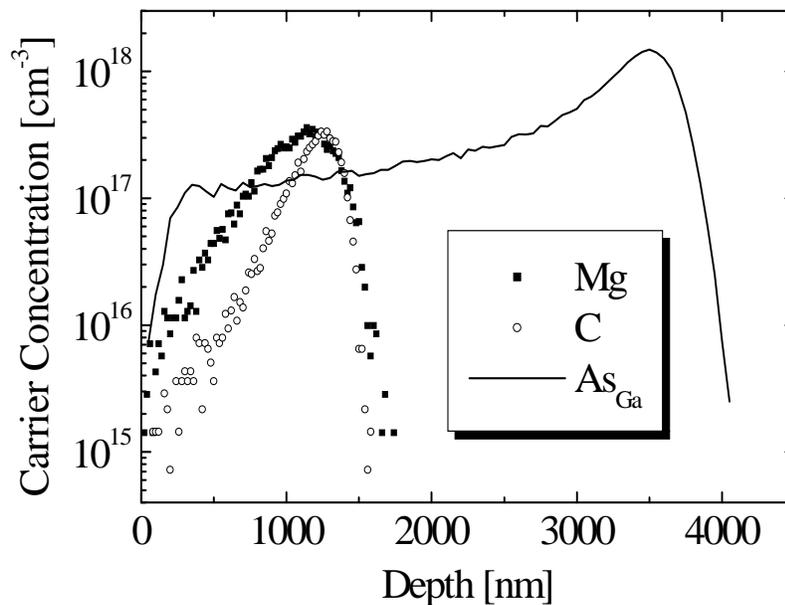


Figura 4.4. Perfis de portadores estimados para amostras de GaAs implantadas com $^{24}\text{Mg}^+$ (dose de $2,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ a 900keV) e com $^{12}\text{C}^+$ (dose de $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ a 900keV) supondo ativação uniforme comparados ao perfil estimado de anti-sítios de As formados pela implantação de H^+ a 400 keV e até a dose de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Todos os perfis foram obtidos com o programa TRIM ^[14,69].

A estabilidade térmica da isolamento foi estudada para amostras dos dois grupos implantadas com três diferentes doses: $D1 = 0,25D_{th}$; $D2 = 5D_{th}$ e $D3 = 100D_{th}$ (estas doses estão representadas pelas linhas verticais na Figura 4.3). A evolução da resistência de folha R_s com o recozimento pós-irradiação para as bolachas dopadas com carbono e implantadas com as doses $D1$, $D2$ e $D3$ de prótons está ilustrada na Figura 4.5 (a). O caso das amostras dopadas com Mg é apresentado na Figura 4.5 (b).

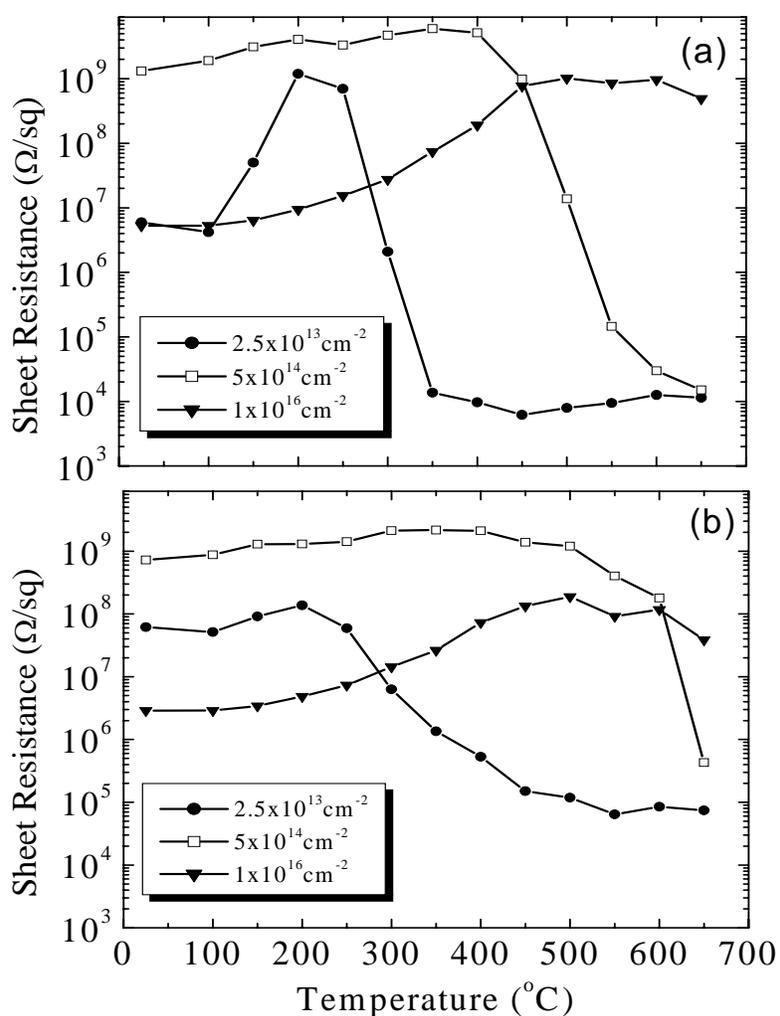


Figura 4.5 Evolução da resistência de folha com a temperatura de recozimento para resistores de GaAs *tipo-p* irradiados com prótons de 400keV e a doses de $D1 = 0,25D_{th}$, $D2 = 5D_{th}$ e $D3 = 100D_{th}$. O caso (a) corresponde a amostras dopadas com Mg e o caso (b), a amostras dopadas com C.

Inicialmente, vamos considerar o caso da dose D1 de prótons. Para a amostra dopada com magnésio, observa-se uma pequena diminuição no valor medido para a resistência de folha após o recozimento inicial a 100°C. Este decréscimo pode ter sido originado por um acréscimo na concentração de lacunas livres ou na mobilidade destas lacunas (o recozimento de algumas armadilhas de lacunas, por exemplo, aumentaria ambas as propriedades). Seguido a este estágio inicial, verifica-se um acréscimo em R_s para as temperaturas de recozimento de 150 e 200°C. Nesta mesma região de recozimento térmico, verificou-se^[17], para GaAs *tipo-n* irradiado com prótons de 50keV, um aumento na concentração de elétrons livres e na mobilidade dos mesmos, resultando, para este caso, em um decréscimo de R_s . Tal comportamento pode ser entendido pelo recozimento de armadilhas de elétrons. Acreditamos que esta também seja a explicação para o comportamento observado aqui em GaAs *tipo-p*. Vamos supor que a estrutura de defeitos criados nos dois casos seja muito parecida. Como o valor de R_s aumentou após este recozimento para o nosso caso, podemos diferenciar basicamente três possibilidades: este acréscimo pode ter sido originado por um decréscimo na mobilidade das lacunas, por um decréscimo simultâneo na concentração de lacunas livres e na sua mobilidade, ou pelo decréscimo da concentração de lacunas livres, mesmo que acompanhado por um pequeno acréscimo na mobilidade. O primeiro caso corresponderia, por exemplo, à formação de dois defeitos carregados (um com o sinal oposto ao outro) a partir do recozimento de um defeito neutro. Pode-se descartá-lo, uma vez que foi observado o aumento da mobilidade de elétrons para o caso *tipo-n* (além do mais, uma diminuição de duas ordens de grandeza na mobilidade das lacunas é bastante improvável nestas condições). O segundo caso corresponderia à formação de armadilhas de lacunas pelo recozimento de outros defeitos, diminuindo a concentração de portadores livres e aumentando a concentração de centros

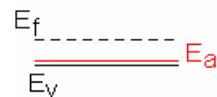
espalhadores. Este também pode ser descartado, pois acarretaria uma diminuição, e não um aumento da mobilidade. Resta-nos, então, a última hipótese que deve corresponder ao recozimento de armadilhas de elétrons. Mas, para esta situação, teremos uma competição entre um acréscimo na mobilidade das lacunas e a redução de sua concentração. Sabe-se^[71], porém, que mudanças de ordens de grandeza na concentração total de centros espalhadores ionizados (que constituem a principal contribuição para a mobilidade no nosso caso) implicam em pequenas mudanças na mobilidade dos portadores^[71]. Vamos exemplificar: imaginemos uma amostra de GaAs *tipo-p* com uma certa concentração uniforme de aceitadores, digamos $N_a = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, e 100% de ativação. Vamos usar os convencionais valores para a concentração efetiva de níveis na banda de condução, N_c , na banda de valência, N_v , para a massa efetiva dos elétrons, m_e^* , e para a das lacunas, m_l^* (veja a referência [71]). Supondo $E_a - E_v = 0,02 \text{ eV}$ e temperatura ambiente, podemos calcular (veja o método no Apêndice B) a posição do nível de Fermi e, conseqüentemente, as concentrações de lacunas, p , e de centros espalhadores ionizados:

$$\underline{E_c}$$

$$E_f - E_v \approx 0,095 \text{ eV}$$

$$p \approx 4,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_{\text{ionizado}} \approx 4,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$



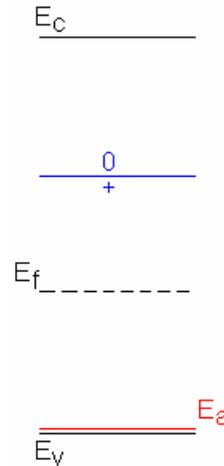
Agora, vamos acrescentar uma concentração de armadilhas de lacunas igual a N_a :

$5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ a $E_c - E_{dl} = 0,5 \text{ eV}$. Assim, encontraremos:

$$E_f - E_v \approx 0,51 \text{ eV}$$

$$p \approx 5,2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_{\text{ionizado}} \approx 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

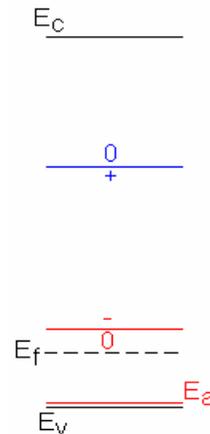


Se acrescentarmos a este último exemplo uma quantidade de $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ de armadilhas de elétrons com $E_{te} - E_v = 0,3 \text{ eV}$, por sua vez, chegaremos a:

$$E_f - E_v \approx 0,21 \text{ eV}$$

$$p \approx 6,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_{\text{ionizado}} \approx 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$



Ou seja, se partirmos desta última situação e voltarmos para a anterior pelo recozimento das armadilhas de elétrons, diminuiremos p em mais de 100000 vezes. Enquanto isso, a mobilidade destas lacunas praticamente não se alterará, ficando em torno

de $\sim 140 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ segundo a referência [71]. Em outras palavras, o recozimento destas armadilhas de elétrons seria, sim, responsável por um acréscimo de ordens de grandeza na R_s medida para esta amostra.

A Figura 4.5 (a) ainda revela, para o caso da dose de implantação de isolamento D1, um considerável decréscimo da resistência de folha medida para valores de temperatura de recozimento entre 250 e 350°C. Este re-estabelecimento da condutividade das amostras deve ter sido causado pelo recozimento das armadilhas de lacunas, aumentando p e μ_p . Após esta última temperatura, não se nota substancial variação em R_s para a amostra dopada com Mg e isolada até D1.

Para a amostra implantada até D2 na Figura 4.5 (a), não se nota considerável variação em R_s (que é sempre $\sim 10^9 \Omega/\square$) para os recozimentos até a temperatura de 500°C. Para as temperaturas de 550°C até 600°C, há um abrupto decréscimo em R_s provavelmente originado pelo recozimento de armadilhas de lacunas. Lembrando a definição de estabilidade térmica da isolamento, que corresponde à temperatura até a qual a resistência de folha medida conserva-se próxima de $10^9 \Omega/\square$, podemos afirmar que amostras dopadas com Mg e implantadas com prótons até a dose D2 têm uma estabilidade térmica de 500 °C.

A amostra dopada com Mg e implantada com prótons até D3, por sua vez, apresenta um comportamento bem diferente. R_s cresce com o aumento da temperatura de recozimento até $\sim 500 \text{ }^\circ\text{C}$. Isto ocorre porque a dose D3 é muito alta, e a condução *hopping* já se torna dominante. Assim, à medida que aumentamos a temperatura de recozimento, alguns defeitos são recozidos, e este tipo de condução vai se tornando mais fraco, aumentando o valor de R_s . Para valores de temperatura entre 500 e 600°C, a resistividade medida do material praticamente não é alterada.

Na Figura 4.5(b), está representado o recozimento das amostras dopadas com C. Para a implantação de isolamento com dose D1 de prótons, a resistência de folha sofre um acréscimo para as temperaturas de 150 e 200°C, a exemplo do que foi visto para o Mg. No entanto, este acréscimo é de apenas algumas vezes e não de duas ordens de grandeza como no referido caso. Também há uma diminuição de R_s para temperaturas de recozimento de 250 – 350°C, mas este decréscimo não é tão abrupto quanto o que foi observado para a mostra dopada com Mg e não termina em 350°C, estendendo-se até temperaturas da ordem de 400°C. Por fim, o valor encontrado para resistência de folha na amostra dopada com C e isolada até D1 após a estabilização, ou seja, entre temperaturas de recozimento de 450 e 650°C, é cerca de dez vezes maior que a obtida para a mostra dopada com Mg.

Para a amostra com carbono e implantada com a dose D2 de prótons, percebe-se que a estabilidade térmica não é mais aquela encontrada no caso anterior (550°C), mas sim algo em torno de 600 – 650°C. O comportamento observado para a mostra dopada com D3 para a Figura 4.5 (b) é semelhante ao obtido em (a), mas a resistência de folha se estabiliza em valores menores para a dopagem com C.

Estas diferenças entre os recozimentos das amostras dopadas com C e com Mg não podem ser meramente justificados por uma diferença na mobilidade dos portadores para cada situação (note na Tabela 4.1 que os valores iniciais de μ_p se diferenciam apenas em duas vezes). Elas revelam que a estrutura dos defeitos criados em ambos os casos deve ser um pouco diferente. Note que a baixa ativação do C cria uma concentração de folha de $\sim 3,8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ de carbonos que podem formar defeitos complexos, introduzir níveis na banda proibida, etc...

De qualquer forma, pode-se afirmar que a estabilidade da isolação aumenta da situação correspondente à implantação a $0,5D_{th}$ para aquela a $5D_{th}$. Esta estabilidade é de, pelo menos, $650^{\circ}C$ para as amostras implantadas a uma dose equivalente a $100D_{th}$.

4.4 Conclusões

Amostras dopadas com Carbono e Magnésio foram utilizadas para se estudar a formação da isolação por implantação de prótons e a estabilidade térmica da mesma em camadas *tipo-p* de GaAs. A dose limiar D_{th} , ou seja, aquela dose de prótons necessária para converter uma camada condutiva em uma altamente resistiva ($R_s \sim 10^9 \Omega/\square$), mostrou-se independente do dopante utilizado, revelando que o processo de isolação deve ser semelhante em ambos os casos e os defeitos responsáveis pelo mesmo não devem ser relacionados às impurezas dopantes. No entanto, diferenças nos comportamentos de recozimento observados para as amostras dopadas com C e com Mg indicam que há uma estrutura diferente de defeitos formada para cada um deles, provavelmente, durante os tratamentos térmicos.

CAPÍTULO 5. CARACTERIZAÇÃO DOS DEFEITOS USANDO A ESPECTROSCOPIA DE TRANSIENTES DE NÍVEIS PROFUNDOS (DLTS).

5.1 Introdução

Embora a isolação por implantação de íons em GaAs já tenha sido comprovada como um método eficaz na transformação de uma camada condutiva em uma altamente resistiva ^[8,10] ($R_s \sim 10^9 \Omega/\square$), a identificação e caracterização dos defeitos responsáveis por este processo e de seus devidos níveis profundos ainda se revela uma questão em aberto e de alta relevância tecnológica, dadas as diversas possíveis aplicações desta isolação tanto na microeletrônica ^[4,72] quanto na optoeletrônica ^[73].

Como vimos no capítulo 2, há uma longa lista de trabalhos que buscaram acrescentar um pouco mais de luz a este ainda obscuro tema: mostrou-se^[13] que a dose limiar (D_{th}) para transformar uma camada condutiva de GaAs *tipo-n* em uma altamente resistiva está intimamente correlacionada ao número estimado de colisões substitucionais (aquelas em que a espécie incidente, que não necessariamente é o íon implantado, colide com um átomo da rede e toma o seu lugar); averiguou-se^[16] que D_{th} é praticamente independente da temperatura de implantação entre 0°C e 220°C para GaAs *tipo-n*; estudou-se a estabilidade térmica da isolação de GaAs *tipo-n*^[16] e *tipo-p*^[37] por implantação iônica; mostrou-se^[37] que, para amostras *tipo-p* ou *tipo-n* com semelhantes concentrações de folha

de portadores, a dose de limiar é a mesma; diversos estudos de DLTS ^[24] foram realizados em amostras irradiadas com elétrons de alta energia, e modelos ^[18,21] foram propostos para vários dos níveis introduzidos por esta irradiação; um estudo^[32] de DLTS em amostras condutivas de GaAs *tipo-n* implantadas com íons revelou que a maioria dos níveis presentes no caso da irradiação com elétrons também foi introduzida com esta implantação e que outros níveis, ausentes para a irradiação com elétrons, também são criados neste caso (níveis estes que foram associados a defeitos mais complexos).

Neste trabalho, as propriedades elétricas dos defeitos induzidos por implantação de prótons em amostras *tipo-p* e *tipo-n* de GaAs crescidas por epitaxia (MOCVD – *Metalorganic Chemical-Vapor Deposition*) são investigadas utilizando-se a Espectroscopia de Transientes de Níveis Profundos (DLTS – *Deep Level Transient Spectroscopy*). O comportamento de recozimento dos diferentes níveis observados com esta técnica para temperaturas entre 100 e 600°C é apresentado numa tentativa de correlação com o comportamento previamente observado ^[16,37] para a estabilidade térmica da isolação por implantação.

Vale salientar que, além de ser uma continuação natural das investigações sobre este assunto encontradas na literatura, visando, assim, possibilitar uma melhor compreensão sobre o tema, este trabalho teve também como objetivo a aquisição de experiência com a medida DLTS. Para tanto, ele foi realizado utilizando-se o sistema DLTS do *Department of Electronic Material Engineering da Research School of Physical Sciences and Engineering, The Australian National University* situada em Canberra.

5.2 Descrição Experimental

Camadas epitaxiais de GaAs *tipo-n* e *tipo-p* foram crescidas sobre bolachas de GaAs <100> dopadas respectivamente com Si (concentração de portadores de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) e com Zn (concentração de portadores livres de $6-8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), utilizando-se o reator MOCVD (*metalorganic chemical-vapor deposition*) da *Australian National University*. As amostras foram inclinadas de 2° em relação à normal na direção (110), e foram empregados $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ como fonte do grupo III e AsH_3 como fonte do grupo IV, sendo H_2 o gás portador. As dopagens foram realizadas utilizando-se SiH_4 diluído e $\text{Zn}(\text{CH}_3)_2$. A espessura final das camadas epitaxiais foi de $6 \mu\text{m}$, e obteve-se uma concentração de portadores de $1,0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ para as amostras *tipo-n* e $1,1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ para as *tipo-p*, formando-se, assim, estruturas n/n^+ e p/p^+ .

As implantações de isolamento foram feitas usando-se o acelerador tandem de 1,7 MV da *Australian National University*. Utilizaram-se, como íons, prótons de uma fonte de TiH e manteve-se as amostras inclinadas em 7° da direção do feixe durante a implantação para minimizar a canalização. A fluência empregada foi de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ com um fluxo constante de $\sim 0,5 \text{ nA/cm}^2$ e energia de 600 keV.

Após terem sido implantadas, as amostras foram submetidas a recozimentos térmicos rápidos (RTA – *Rapid Thermal Annealing*) de um minuto em uma faixa de temperaturas de 100 a 600°C sob uma atmosfera de argônio. Os passos de recozimento foram realizados com as faces implantadas das amostras cobertas por outras bolachas de GaAs para evitar a perda excessiva de As desta superfície.

As amostras foram, então, quimicamente lavadas, incluindo um mergulho em HCl para a remoção de qualquer óxido de superfície. Imediatamente após esta limpeza, elas foram introduzidas em uma câmara de vácuo para a formação dos contatos Schottky por deposição de Au a uma pressão base de $\sim 2 \times 10^{-6}$ Torr. A espessura final do filme de ouro depositado foi de ~ 100 nm. O contato traseiro foi obtido pela aplicação de uma liga de InGa. A Figura 5.1 apresenta a estrutura final das amostras.

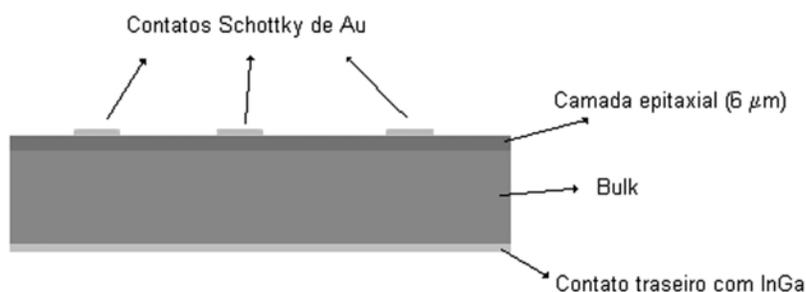


Figura 5.1 Estrutura das amostras preparadas para as medidas DLTS.

O sistema DLTS utilizado é um sistema de janelas de taxas de emissão empregando uma função peso degrau (que vale 1 para metade do tempo de medida e -1 para a outra metade). As medidas de capacitância foram realizadas com uma ponte de capacitância de alta velocidade empregando um sinal AC de 1MHz e um gerador de pulsos. Os transientes obtidos foram, então, digitalizados e passados para um computador que realizou a multiplicação e integração deste sinal usando funções peso degrau com diferentes tempos totais de medida, o que, como veremos, equivale a diferentes tempos de referência τ_{ref} . Os espectros de sinal DLTS versus temperatura para diferentes janelas de taxas de emissão (τ_{ref}) foram gravados em um arquivo.

A obtenção do valor de τ_{ref} como função do tempo de medida total do transiente, t_m , para uma função peso degrau é bastante simples^[43]. No entanto, em alguns casos, não podemos desprezar o tempo de recuperação do sistema de medida, e algumas adaptações devem ser feitas à função peso. Este exemplo está representado na Figura 5.2:

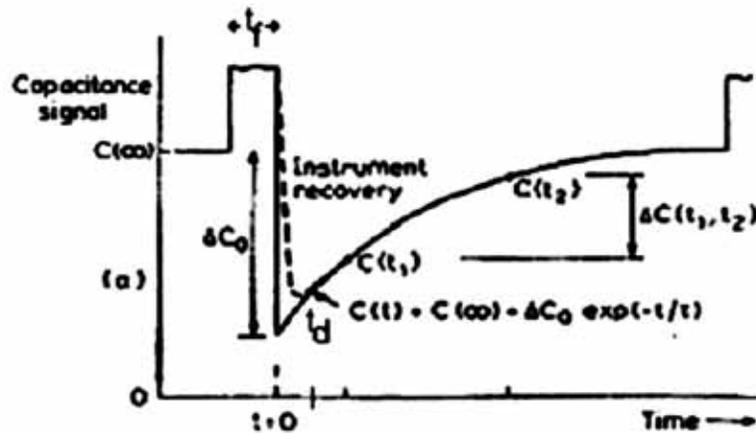


Figura 5.2 Comparação entre um transiente ideal e um medido. Note-se que o tempo de recuperação t_d do instrumento deve ser considerado. Referência [43].

Para levar em consideração o tempo de recuperação t_d do instrumento, utiliza-se uma função peso como a ilustrada na Figura 5.3:

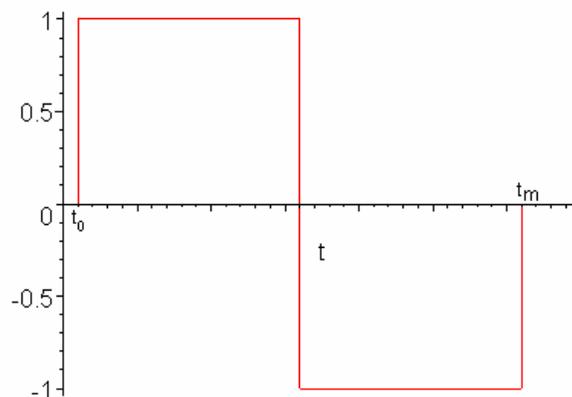


Figura 5.3 Função peso degrau levando em consideração o tempo de recuperação do sistema de medida. $t_0 \geq t_d$.

Assim, para o transiente considerado em (3.2.87), $A(t) = B + A_0 e^{-t/\tau}$, podemos

obter o sinal DLTS, definido em (3.2.88) como $S(\tau) = \frac{1}{t_m} \int_0^{t_m} A(t)w(t)dt$ (sendo $w(t)$ a

função peso e t_m o tempo total da medida):

$$S(\tau) = \frac{1}{t_m} \int_0^{t_m} \left(B + A_0 e^{-t/\tau} \right) \left(H(t - t_0) - 2H\left(t - \frac{t_m + t_0}{2}\right) + H(t - t_m) \right) dt \quad (5.1)$$

onde H é a função Heaviside.

$$\begin{aligned} \rightarrow S(\tau) &= \frac{1}{t_m} \left[B \left(\int_{t_0}^{\frac{t_m+t_0}{2}} dt - \int_{\frac{t_m+t_0}{2}}^{t_m} dt \right) + A_0 \left(\int_{t_0}^{\frac{t_m+t_0}{2}} e^{-t/\tau} dt - \int_{\frac{t_m+t_0}{2}}^{t_m} e^{-t/\tau} dt \right) \right] = \\ &= \frac{\tau}{t_m} A_0 \left(-e^{-\frac{t_m+t_0}{2\tau}} + e^{-\frac{t_0}{\tau}} + e^{-\frac{t_m}{\tau}} - e^{-\frac{t_m+t_0}{2\tau}} \right) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Para encontrar o valor da taxa de emissão de referência τ_{ref} , deve-se derivar S em relação a τ e igualar o resultado a zero (procuramos o valor de τ para o qual ocorrem os máximos do sinal DLTS):

$$\frac{dS}{d\tau} = \frac{A_0}{t_m} \left(-2e^{-\frac{t_m+t_0}{2\tau}} - \frac{t_m + t_0}{\tau} e^{-\frac{t_m+t_0}{2\tau}} + \frac{\tau + t_0}{\tau} e^{-t_0/\tau} + \frac{\tau + t_m}{\tau} e^{-t_m/\tau} \right) \quad (5.3)$$

$$\rightarrow -(t_m + t_0 + 2\tau_{ref}) e^{-\frac{t_m+t_0}{2\tau_{ref}}} + (\tau_{ref} + t_0) e^{-\frac{t_0}{\tau_{ref}}} + (\tau_{ref} + t_m) e^{-\frac{t_m}{\tau_{ref}}} = 0 \quad (5.4)$$

Esta equação pode ser resolvida numericamente (lembrando que $\tau > 0$) para os devidos valores dos parâmetros t_0 e t_m . No entanto, se o tempo de recuperação do instrumento utilizado puder ser desprezado (possibilitando fazer $t_0 = 0$), esta expressão será simplificada, e chega-se a:

$$\tau_{ref} = 0,398t_m \quad (5.5)$$

Neste caso, é verificada a seguinte relação entre o sinal DLTS correspondente ao máximo e o valor A_0 (a partir do qual se tira a concentração dos níveis):

$$S(\tau) = \frac{\tau A_0}{t_m} \left(1 - 2e^{-\frac{t_m}{2\tau}} + e^{-\frac{t_m}{\tau}} \right) \quad (5.6)$$

$$\rightarrow S(\tau_{ref}) = 0,204A_0 \quad (5.7)$$

O sistema utilizado neste trabalho possui um tempo de recuperação praticamente desprezível em comparação com o tempo de conversão A/D, de maneira que as fórmulas válidas são (5.5) e (5.7). Assim, a obtenção das concentrações dos níveis observados nas

amostras *tipo-n* foi realizada empregando a relação (3.2.77), $\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{N_t}{N_d}$,

onde $x_1 = x_0 - \lambda$; $x_2 = x_d - \lambda$; e $\Delta C_0 = A_0 = S(\tau_{ref})/0.204$. O valor de λ foi estimado a partir de (3.2.68):

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e^2 N_d} (E_{fe} - E_t)} = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e^2 N_d} (E_{fe} - E_c + E_c - E_t)}. \quad (5.8)$$

Aproximou-se $E_c - E_t$ por E_{na} e o valor de $E_{fe} - E_c$ foi obtida a partir da usual

relação $n \approx N_d = N_c e^{\frac{E_{fe}-E_c}{kT}} \rightarrow E_{fe} - E_c \approx kT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} \right)$. Os valores de N_d , x_d e x_0 foram

medidos com o método CxV e o valor de N_c retirado da referência [44]. A Tabela 5.1 apresenta estes dados.

Tabela 5.1. Valores utilizados no cálculo das concentrações dos níveis correspondentes a centros de captura de majoritários observados em material *tipo-n*.

Dados das amostras <i>tipo-n</i>	
N_d	$1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
x_0	$0.4 \text{ } \mu\text{m}$
x_d	$0.8 \text{ } \mu\text{m}$
N_c	$4.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

O cálculo para os níveis observados em material *tipo-p* é completamente análogo.

Apenas deve-se trocar N_d por N_a e usar a seguinte relação para o λ :

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0}{e^2 N_a} (E_t - E_v + E_v - E_{fn})} \quad (5.9)$$

Os valores obtidos para auxiliar este cálculo estão expressos na Tabela 5.2.

Tabela 5.2. Valores utilizados no cálculo das concentrações dos níveis correspondentes a centros de captura de majoritários observados em material *tipo-p*.

Dados das amostras <i>tipo-p</i>	
N_a	$1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
x_0	$0.45 \text{ } \mu\text{m}$
x_d	$0.7 \text{ } \mu\text{m}$
N_v	$7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

5.3 Resultados e Discussão

A Figura 5.4 apresenta os espectros DLTS de centros de captura de majoritários obtidos para as amostras implantadas e para diferentes temperaturas de recozimento, tanto em GaAs *tipo-n* (a) quanto em *tipo-p* (b). Nela também estão exibidos os espectros obtidos para amostras que não sofreram a implantação de isolamento (“*as grown*”). Distinguem-se, visivelmente, cinco picos para material *tipo-n* (os quais chamaremos de Pn1, Pn2, Pn3, Pn4 e Pn5, sendo o primeiro, Pn1, aquele observado para temperatura mais alta; veja a Figura 5.5 (a)) e quatro picos para *tipo-p* (Pp1, Pp2, Pp3 e Pp4; Figura 5.5 (b)). Para separar cada um destes picos, usamos uma rotina de *fitting* de um software comercial, simulando os dados obtidos em cada espectro a partir de uma soma de Lorentzianas. O resultado desta

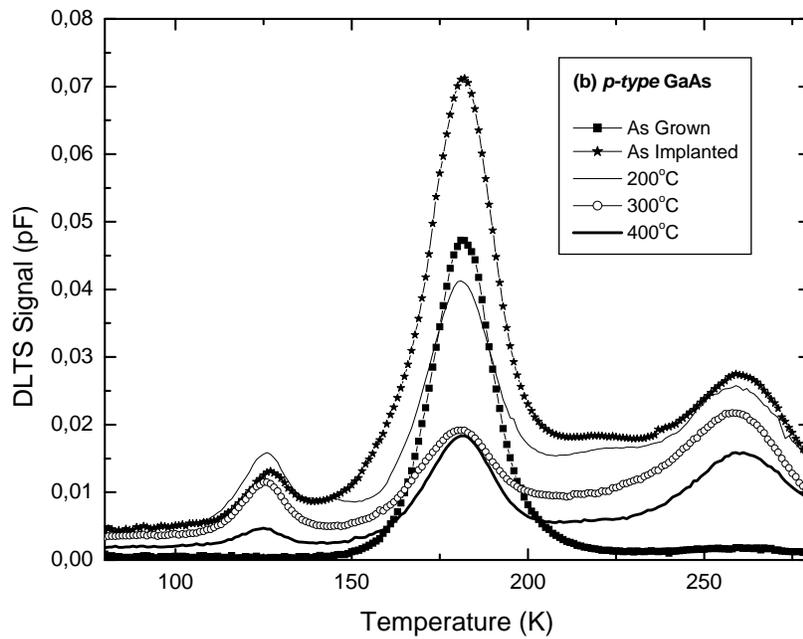
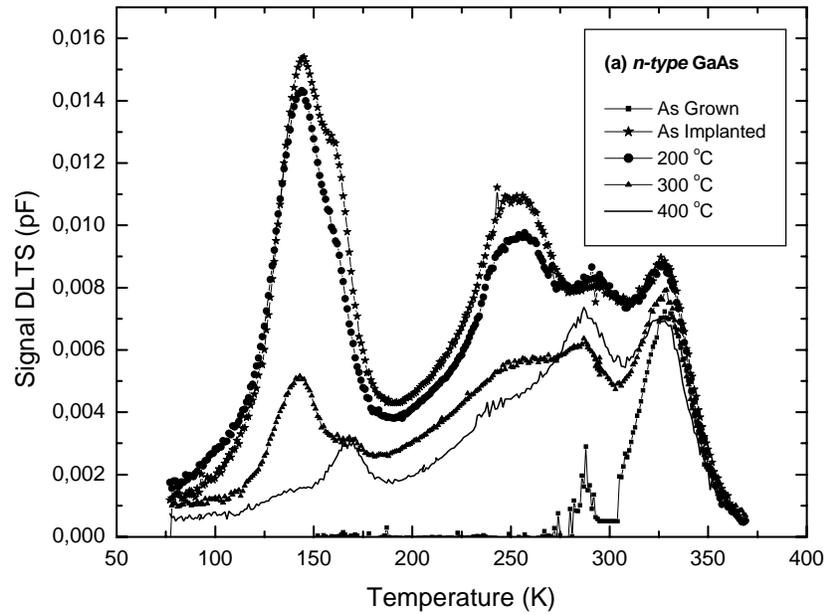


Figura 5.4 Espectros DLTS (obtidos para a janela de taxas de emissão em torno de $0,98 \text{ s}^{-1}$) mostrando a variação dos níveis profundos medidos em GaAs *tipo-n* (a) e *tipo-p* (b). A implantação correspondeu a uma dose de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ de H^+ a 600 keV.

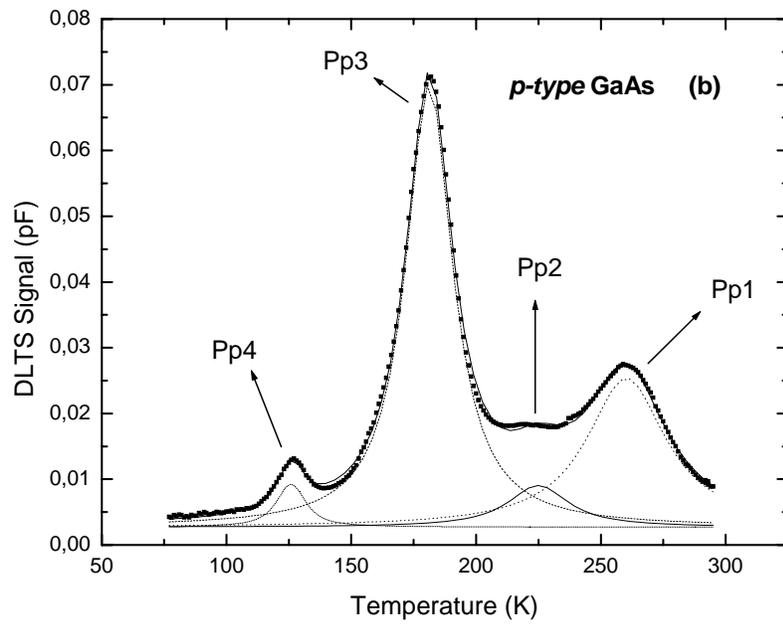
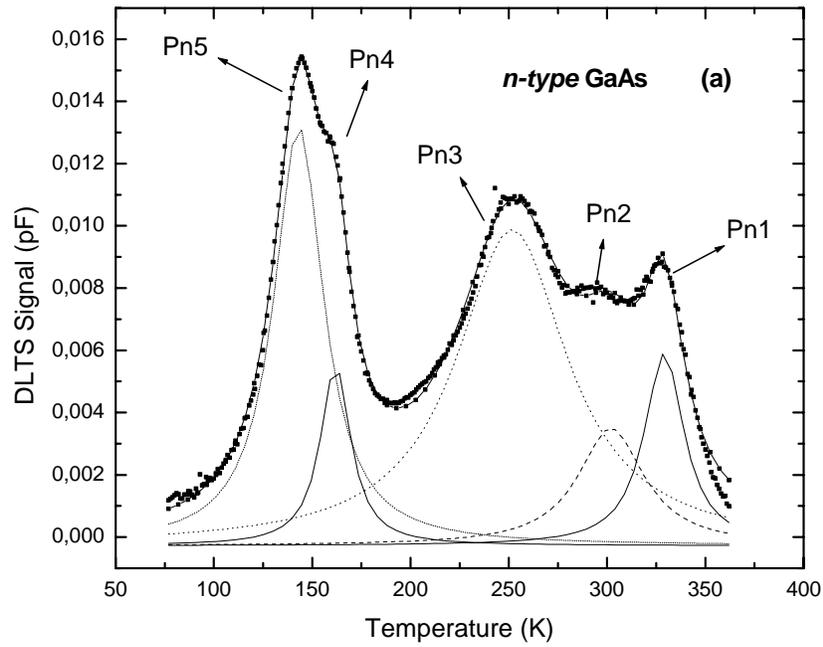


Figura 5.5 *Fitting* do espectro DLTS com uma soma de picos Lorentzianos para as amostras de GaAs *tipo-n* (a) e *tipo-p* (b).

operação está ilustrado na Figura 5.5. Note-se que, usando esta técnica, é possível separar praticamente todos os picos, inclusive o Pn4 que se sobrepõe ao Pn5 para temperaturas de recozimento não muito altas ($< 350^{\circ}\text{C}$). Além disto, ela permite obter valores mais apurados para a temperatura correspondente ao máximo e a altura de cada pico.

O gráfico de Arrhenius utilizado na obtenção das assinaturas (ou seja o par (σ_{na}, E_{na})) de cada nível de majoritários observado nas amostras de GaAs *tipo-n* está representado na Figura 5.6 (símbolos), onde também são mostrados dados de alguns níveis previamente observados na literatura (linhas). As assinaturas propriamente ditas, obtidas para cada um destes picos, estão apresentadas na Tabela 5.3.

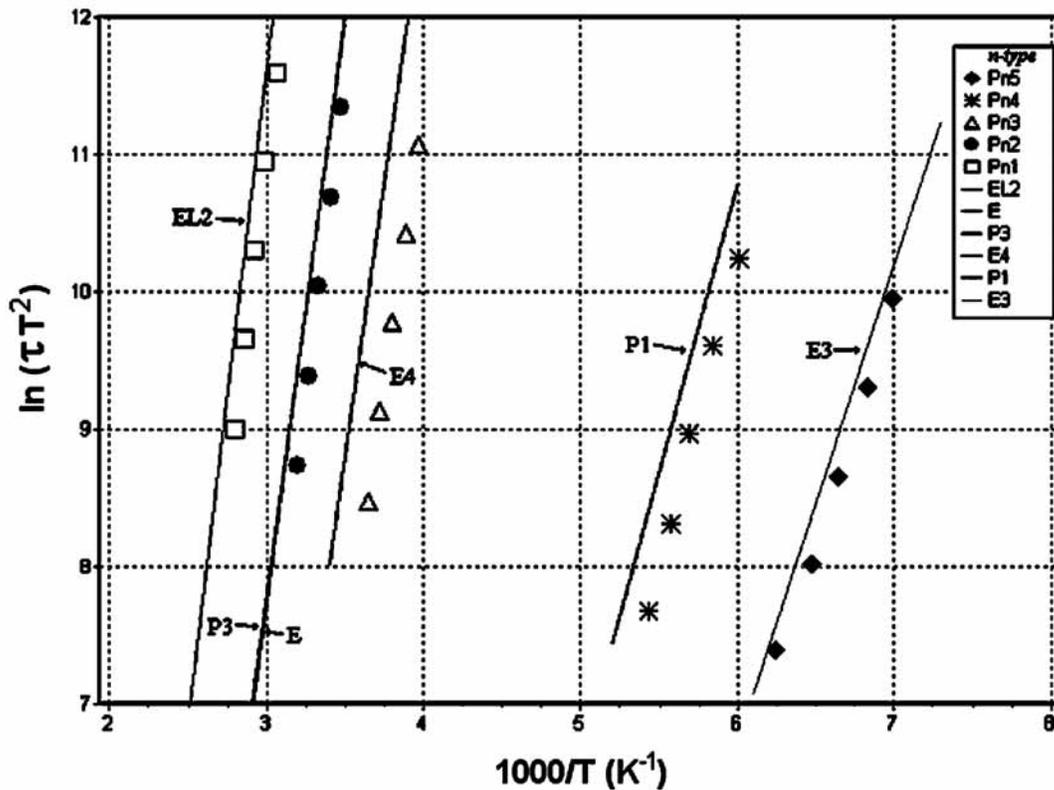


Figura 5.6 *Plot* de arrhenius comparando os dados obtidos para os centros de captura de majoritários em amostras de GaAs *tipo-n*, símbolos, com alguns níveis previamente observados na literatura, linhas.

Tabela 5.3 Assinaturas obtidas para os níveis de majoritários observados nas amostras de GaAs *tipo-n*.

Pico	E_{na} (eV)	σ_{na} (cm ²)	Defeito	Referência
Pn1	0.82	2×10^{-13}	EL2	[22]
Pn2	0.8	6×10^{-12}	P3,E	[24], [22]
Pn3	0.67	2×10^{-12}	E4	[31]
Pn4	0.39	7×10^{-14}	P1	[24]
Pn5	0.3	8×10^{-15}	E3	[21]

Usando as assinaturas expostas na Tabela 5.3 e as concentrações calculadas para cada pico (ver Figura 5.18), pode-se fazer uma simulação do espectro DLTS que seria obtido apenas com estes níveis. Os cálculos necessários para esta simulação e o programa escrito para realizá-la estão apresentados no Apêndice C. A Figura 5.7 mostra os resultados

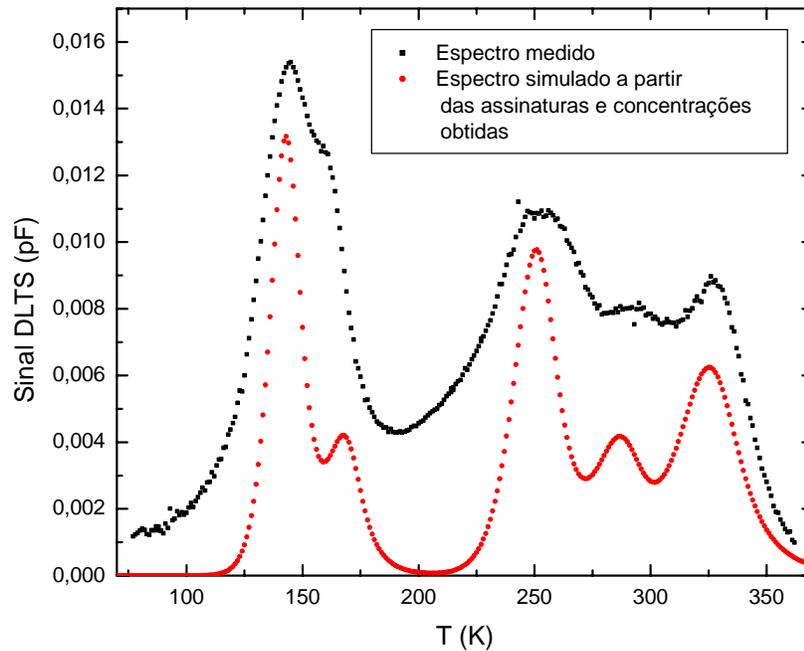


Figura 5.7 Comparação entre os dados experimentais e uma simulação feita a partir das assinaturas obtidas (a janela utilizada foi de 0.98 s^{-1}).

obtidos. Não é difícil notar várias diferenças entre o espectro simulado e o obtido experimentalmente. Isto ocorre porque alguns dos picos observados são, na verdade, devidos a uma série de contribuições distintas. Assim, a assinatura obtida poderá, no máximo, trazer informações sobre a contribuição mais significativa, mas será incapaz de descrever todas as contribuições. Outra possível fonte de erro consiste no fato de que, na simulação, consideramos que todos os níveis têm uma taxa de emissão bem definida, mas, na verdade, eles podem ter uma certa distribuição de taxas de emissão. Para exemplificar melhor estes dois últimos pontos, a Figura 5.8 mostra o espectro obtido para o caso em que há dois níveis hipotéticos próximos, discretos e distintos (a), comparando-o com os espectros calculados para cada nível separadamente. O caso de um defeito que introduza não apenas um estado discreto, mas sim uma dada distribuição de estados, está representado na Figura 5.8 (b). Qualquer uma destas possibilidades (ou até mesmo as duas) pode ser responsável pela diferença entre as larguras dos picos observados e simulados. Apenas um método com maior resolução, como, por exemplo, o Laplace DLTS que utiliza algum tipo de regularização, seria capaz de nos prover uma informação mais completa sobre as contribuições responsáveis pelo espectro que obtivemos experimentalmente. No entanto, o simples método de janelas de taxas de emissão aqui empregado (que foi, afinal, o único método a que se teve acesso), já é suficiente para caracterizar, pelo menos, as principais contribuições observadas.

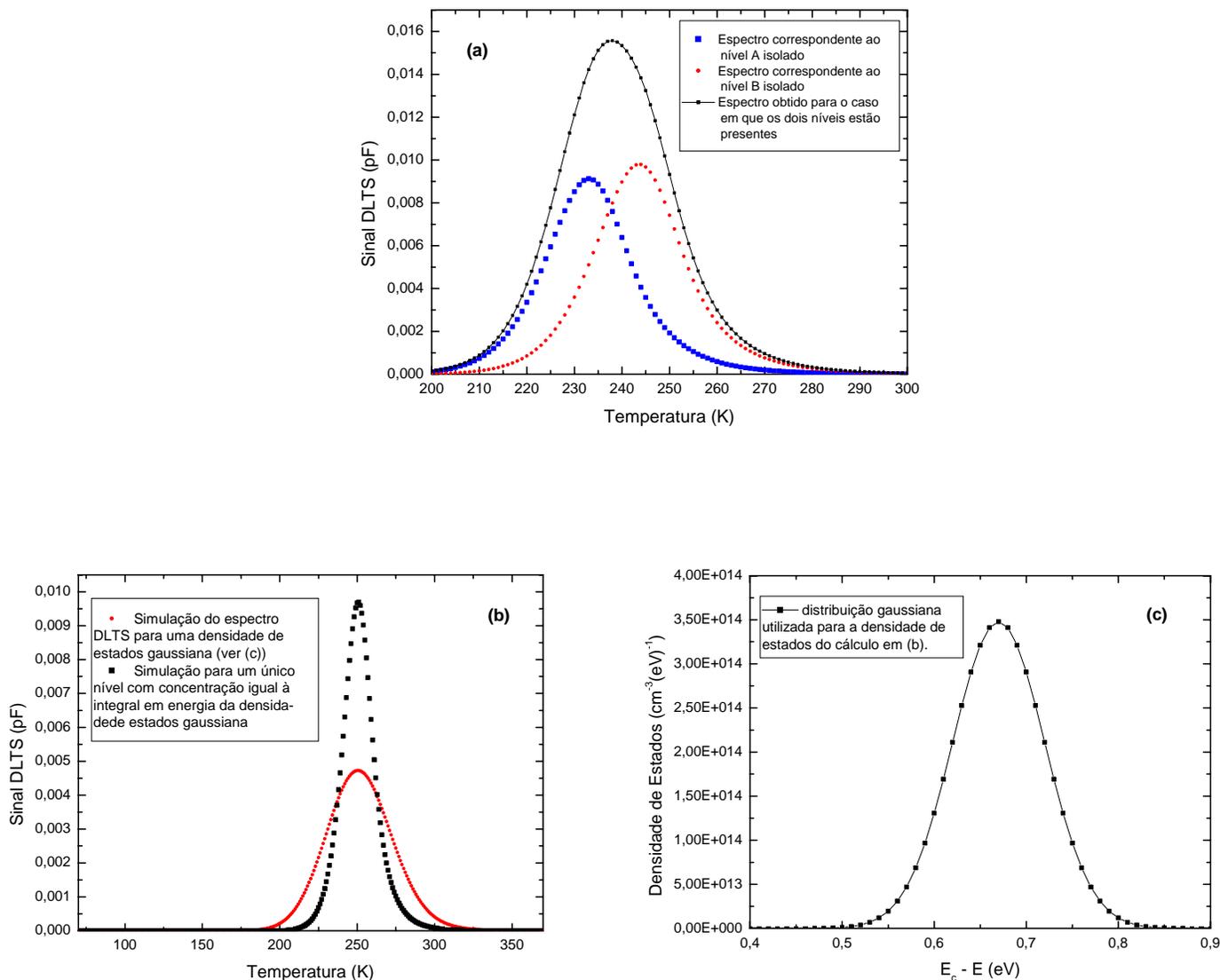


Figura 5.8 Espectros DLTS obtidos para casos hipotéticos. Em (a), está ilustrado o caso da contribuição conjunta de dois níveis discretos com assinaturas parecidas para o mesmo pico. Em (b), o espectro obtido a partir da densidade de estados apresentada em (c) (a secção de choque foi considerada invariante) é comparado com o espectro obtido para um correspondente nível discreto com concentração igual à integral em energia desta densidade.

Vamos, então, analisar cada pico separadamente, iniciando por Pn1. A assinatura de Pn1 é bastante próxima daquela correspondente ao nível EL2. De fato, a comparação entre o espectro simulado para este nível e os dados experimentais sugere que este

realmente seja o defeito EL2. Atualmente, há dois modelos microscópicos sugeridos para este nível: o primeiro relaciona EL2 a um defeito de rede intrínseco e complexo, formado

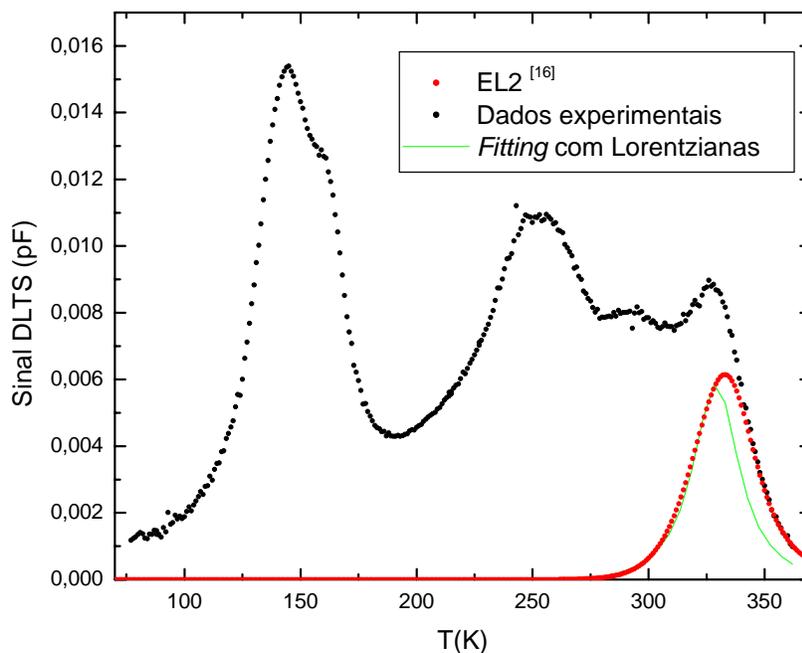


Figura 5.9 Comparação entre Pn1 e EL2^[22].

por um anti-sítio de As no lugar do Ga (As_{Ga}) com um intersticial de As (As_i) mantido como vizinho por interação Coulombiana^[22]; o outro, por sua vez, indica que este nível seja relacionado ou a um anti-sítio As_{Ga} isolado, ou a um par vacância de Ga (V_{Ga}) / intersticial de As (As_i)^[74].

Já para o pico Pn2, há dois níveis com características similares: sua assinatura é bastante semelhante àquelas obtidas tanto para o nível E^[22] quanto para o nível P3^[24]. O chamado nível E é observado em amostras de AsGa crescidas por MOCVD. Olhando a Figura 5.4 (a), nota-se que o pico Pn2 existe antes mesmo da implantação, o que torna

ainda mais provável a participação de E em sua constituição. O outro nível, P3, foi originalmente medido para amostras irradiadas com elétrons de 1 MeV^[24], mas sua presença em amostras implantadas com prótons também já foi constatada^[32]. Note-se, na Figura 5.10, que estes dois defeitos têm temperatura de pico semelhante à de Pn2, e seus espectros praticamente coincidem.

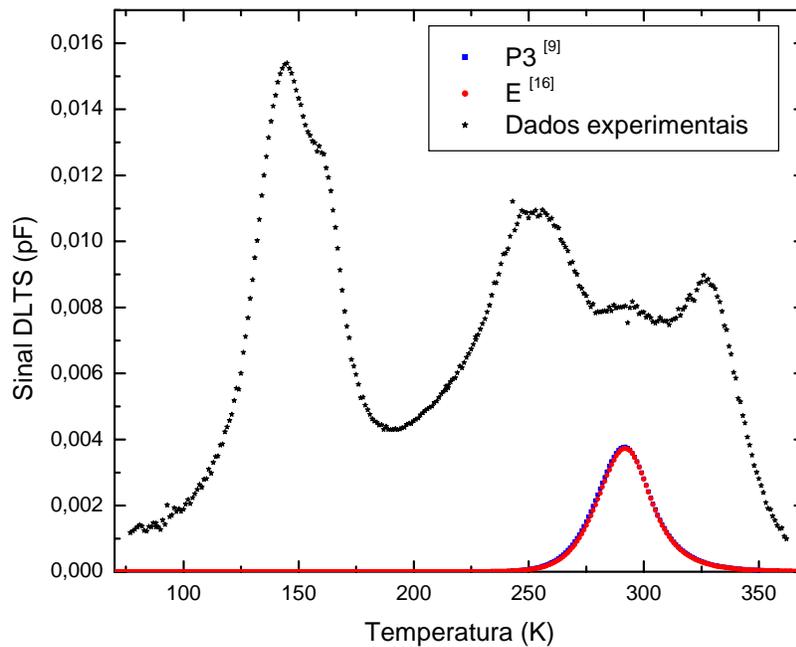


Figura 5.10 Comparação entre Pn2, P3^[24] e E^[22].

A assinatura encontrada na literatura mais parecida com a de Pn3, por sua vez, é a do nível E4^[31], que também foi originalmente encontrado em amostras irradiadas com elétrons. Como foi visto no capítulo 2, este nível é atribuído ao defeito $As_{Ga} + V_{As}$ ^[18]. Há uma grande discrepância entre as assinaturas encontradas para este nível na literatura^[21,31,32], como fica evidente na Figura 5.11. Note-se também que o pico Pn3 é bem mais largo que os picos caracterizados como E4. Isto mostra que Pn3 deve ter outras

contribuições ou não corresponder a um nível discreto. No entanto, como E4 é sempre visto em amostras implantadas com prótons^[31,32], acredita-se que esta realmente seja uma das principais (se não a principal) contribuições para Pn3.

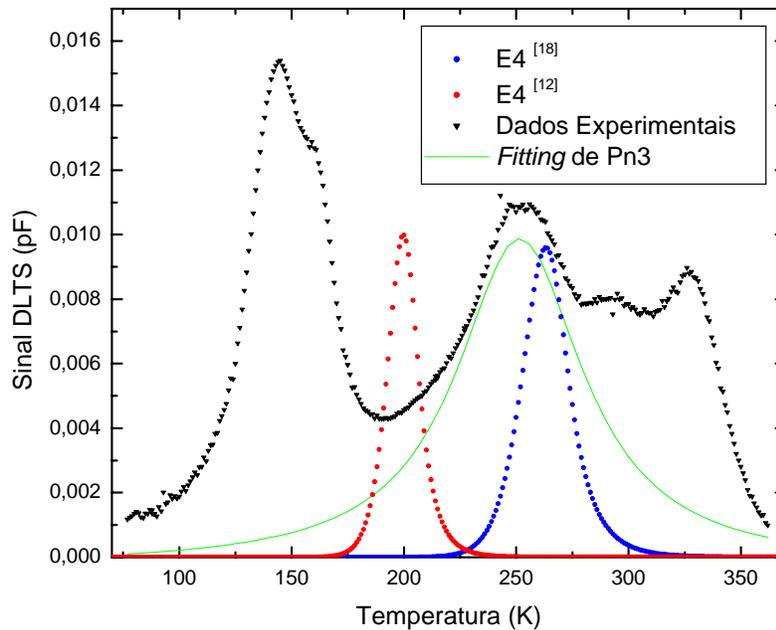


Figura 5.11 Comparação entre Pn3 e os níveis E4 previamente observados^[32,31] em amostras implantadas com prótons.

O pequeno pico Pn4, que aparece para temperaturas em torno de 170K, apresenta uma assinatura semelhante à do nível P1^[24], observado para amostras irradiadas com elétrons (ver Figura 5.12), e deve corresponder a um defeito complexo, uma vez que sua concentração aumenta com o recozimento dos demais picos.

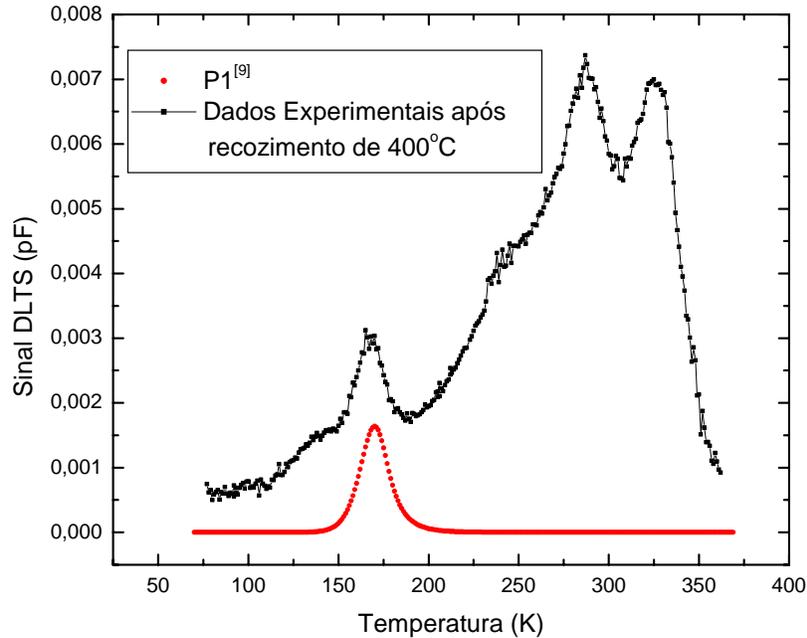


Figura 5.12 Comparação entre Pn4 após recozimento de 400°C e P1^[24].

Quanto ao pico de centros de captura de majoritários observado nas amostras *tipo-n* que aparece na temperatura mais baixa, Pn5, verifica-se que sua assinatura corresponde àquela obtida para o nível E3^[22], originalmente encontrado em amostras de GaAs irradiadas com elétrons e atribuído a um defeito simples: um par de Frenkel de As ($V_{As} + As_i$). No entanto, este pico também foi previamente observado em amostras implantadas com íons^[32], e averiguou-se que havia duas contribuições distintas para o mesmo (ou seja, ele era formado por dois picos sobrepostos): a primeira correspondia, realmente, a E3, mas a segunda, que pôde ser separada da primeira por variações no campo elétrico (afinal, como foi visto, o campo elétrico da região de depleção, se não for suficientemente pequeno, pode mudar o valor da taxa de emissão de um nível, e diferentes níveis podem ter diferentes variações em suas taxas para a mesma mudança no campo), foi atribuída a um defeito

complexo. Note-se, na Figura 5.13, que o pico correspondente a E3 é realmente bem menos largo que Pn5, indicando a presença de outras contribuições.

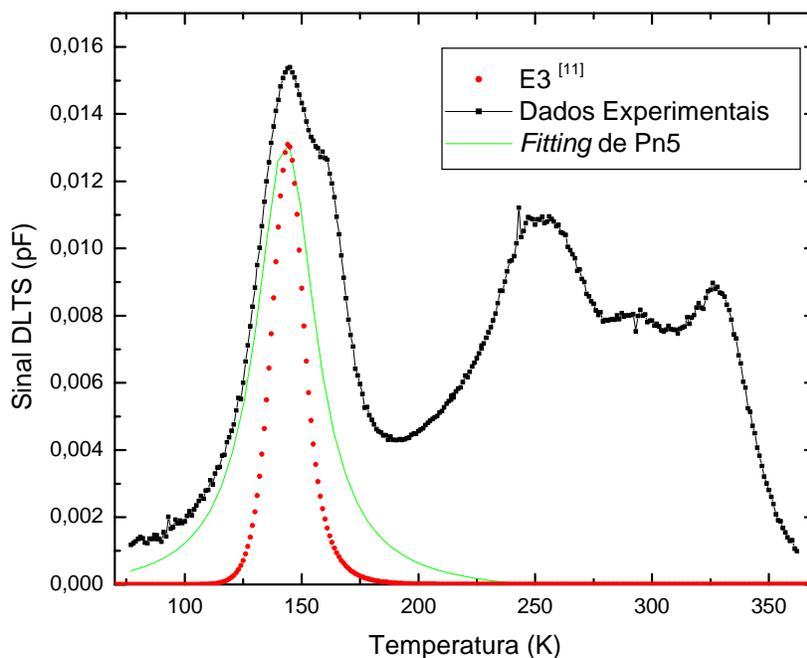


Figura 5.13 Comparação entre Pn5 e E3^[21].

Vale ressaltar que a faixa de temperaturas utilizada neste experimento, limitada a valores superiores a 77K, é insuficiente para mostrar os níveis E1 e E2. Estes defeitos foram observados tanto em amostras de GaAs irradiadas com elétrons ^[22] como em amostras implantadas com íons ^[32]e, acredita-se, correspondem também a pares de Frenkel de As. Novamente, é importante frisar que, em relação ao caso da irradiação com elétrons, a implantação com prótons pode gerar uma diversidade bem maior de defeitos. Defeitos mais complexos, cuja introdução não era significativa no caso da irradiação com elétrons, têm probabilidade maior de serem formados neste caso. Por isso, como já foi dito, é

bastante provável que alguns dos picos observados sejam formados por mais de uma contribuição (isto é, sejam, na verdade, vários picos superpostos que simplesmente não podem ser separados usando técnicas como o DLTS de janelas de taxas de emissão) ou tenham uma densidade de estados com largura não desprezível.

A partir dos espectros de centros de captura de majoritários medidos para as amostras *tipo-p* (Figura 5.1 (b)), obtivemos os *plots* de Arrhenius representados na Figura 5.14. Vale salientar que, ao menos do que é de nosso conhecimento, estes foram os primeiros espectros DLTS de GaAs *tipo-p* implantado com prótons a serem publicados ^[75]. Usando os dados desta última figura, calcula-se as assinaturas dos picos observados. Estes dados estão representados na Tabela 5.4.

Uma vez obtidas as assinaturas para cada pico, a exemplo do que foi feito no caso das amostras *tipo-n*, obteve-se o espectro DLTS simulado a partir destes valores. A Figura 5.15 ilustra este resultado. Note-se que o pico Pp2 não aparece na simulação. Isso ocorre porque sua assinatura é muito difícil de ser obtida (as medidas de seu máximo são muito imprecisas). Mesmo usando o método de *fitting* descrito acima, não conseguimos obter valores confiáveis para sua assinatura e resolvemos desprezar este pico (ao menos no que diz respeito à caracterização via determinação da assinatura). Também é fácil perceber que os picos Pp3 e Pp1 simulados são bem menos largos que os obtidos experimentalmente. Como já foi discutido acima, isto é um indicativo de que estes picos possam ter mais de uma contribuição ou sejam devidos a uma distribuição de taxas de emissão, ao invés de um valor definido.

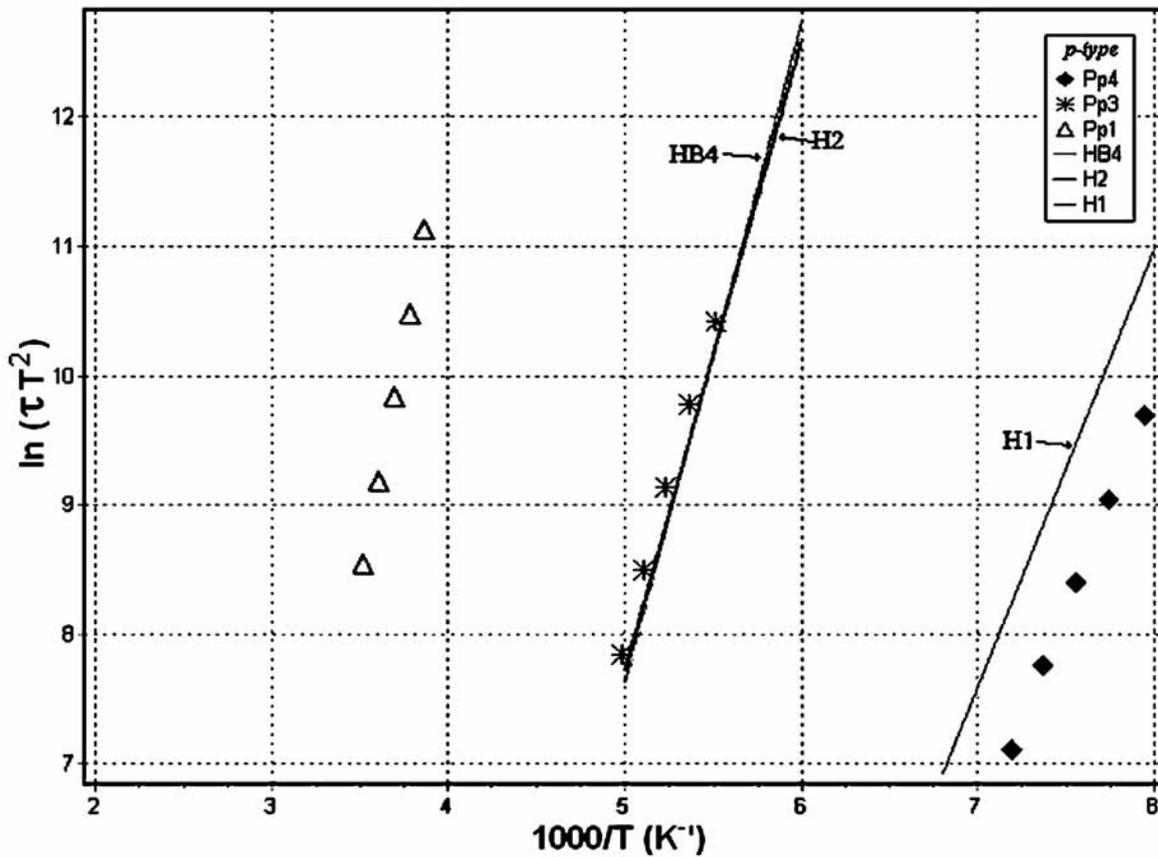


Figura 5.14 *Plot* de Arrhenius comparando os dados obtidos para os centros de captura de majoritários em amostras de GaAs *tipo-p*, símbolos, com alguns níveis previamente observados na literatura, linhas.

Tabela 5.4 Assinaturas obtidas para os níveis de majoritários observados nas amostras de GaAs *tipo-p*.

Pico	E_{pa} (eV)	σ_{pa} (cm ²)	Defeito	Referência
Pp1	0.64	3×10^{-14}	?	-
Pp3	0.42	1×10^{-14}	HB4,H2	[22],[38]
Pp4	0.29	2×10^{-14}	H1	[21]

A assinatura do pico Pp1 não se assemelha a nenhuma das assinaturas de níveis (centros de captura de majoritários em amostras de GaAs *tipo-p*) que encontramos na literatura. Acreditamos que esta seja a primeira vez que este nível foi observado. Sua

energia aparente foi estimada em 0,64 eV (a partir da banda de valência), e sua secção de choque aparente em $3 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$.

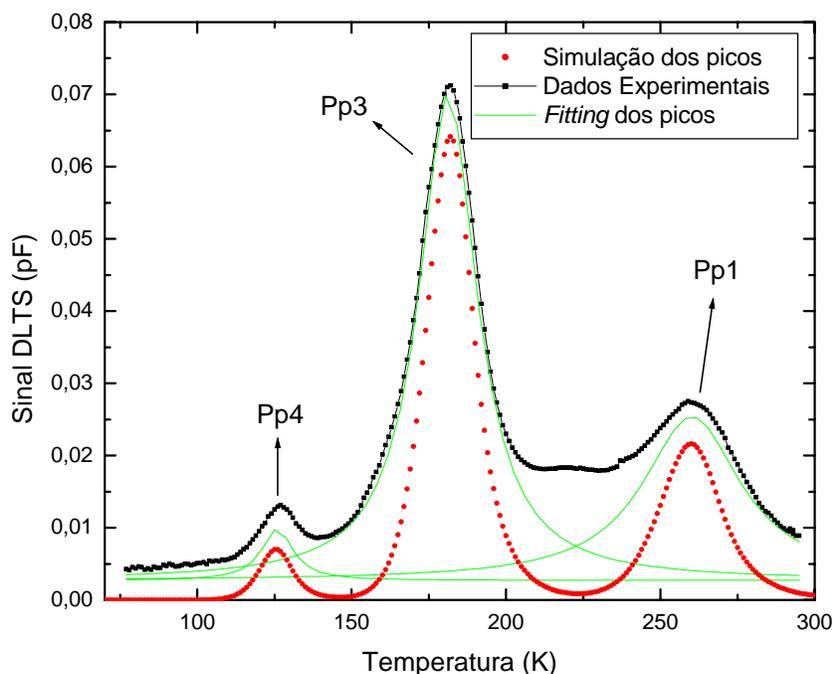


Figura 5.15 Simulação do espectro DLTS para a janela de taxas de emissão em torno de 0.98 s^{-1} obtido a partir das assinaturas calculadas para a amostra “*as implanted*”.

O pico Pp3 tem assinatura comparável às assinaturas de dois níveis distintos, observados previamente na literatura: HB4, que é observado em camadas epitaxiais ^[22] (note que Pp3 já era observado antes da implantação), e H2, medido em amostras irradiadas com elétrons ^[38] (acredita-se que este nível corresponda a um defeito complexo). Estes defeitos estão representados na Figura 5.16.

O nível previamente observado cuja assinatura mais se assemelha à obtida para Pp4 é o H1 (Figura 5.17). Este defeito foi originalmente medido ^[21] em amostras irradiadas com elétrons, e acredita-se ^[21] que ele esteja relacionado a um par de Frenkel de As.

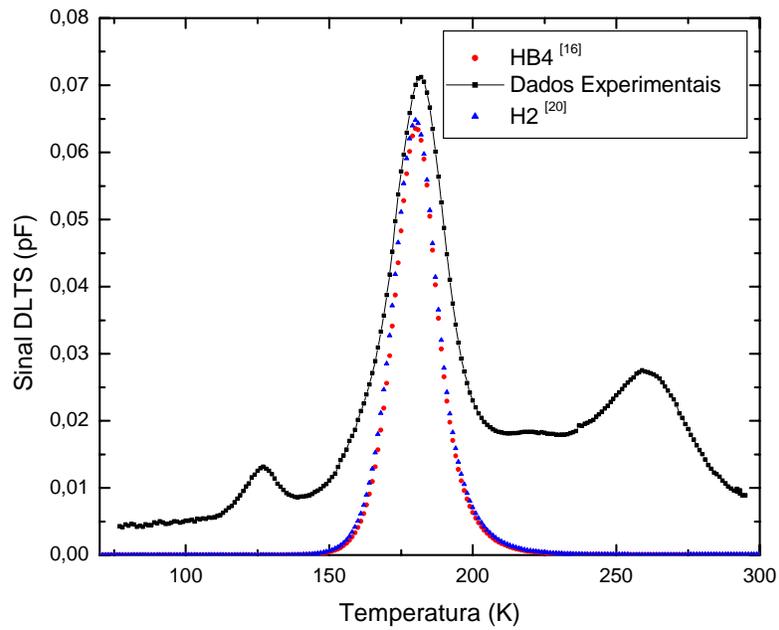


Figura 5.16 Comparação entre Pp3, HB4^[22] e H2^[38].

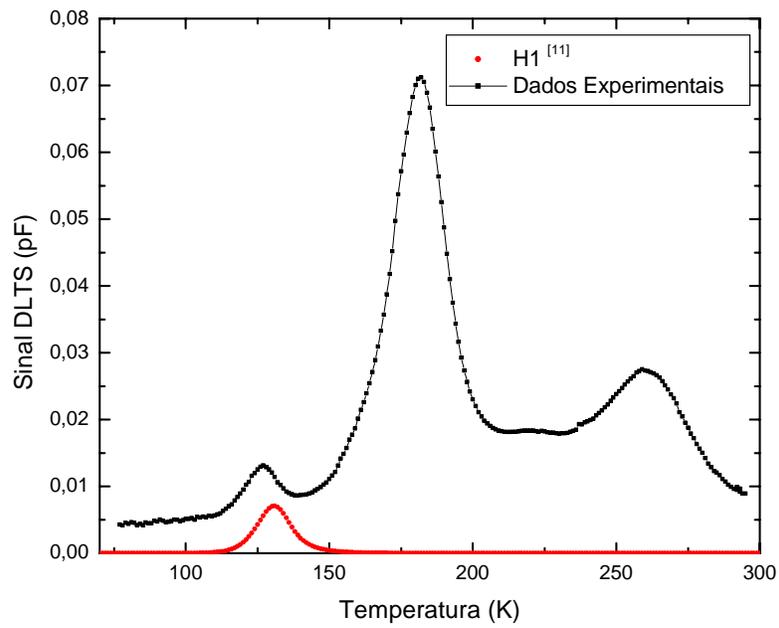


Figura 5.17 Comparação entre Pp5 e H1^[21].

Assim como não se conseguiu observar os picos E1 e E2 no caso das amostras *tipo-n*, também não se teve como saber se $H0^{[21]}$, originalmente observado para amostras irradiadas com elétrons, estava ou não presente em nossas amostras devido à limitação em temperatura do experimento.

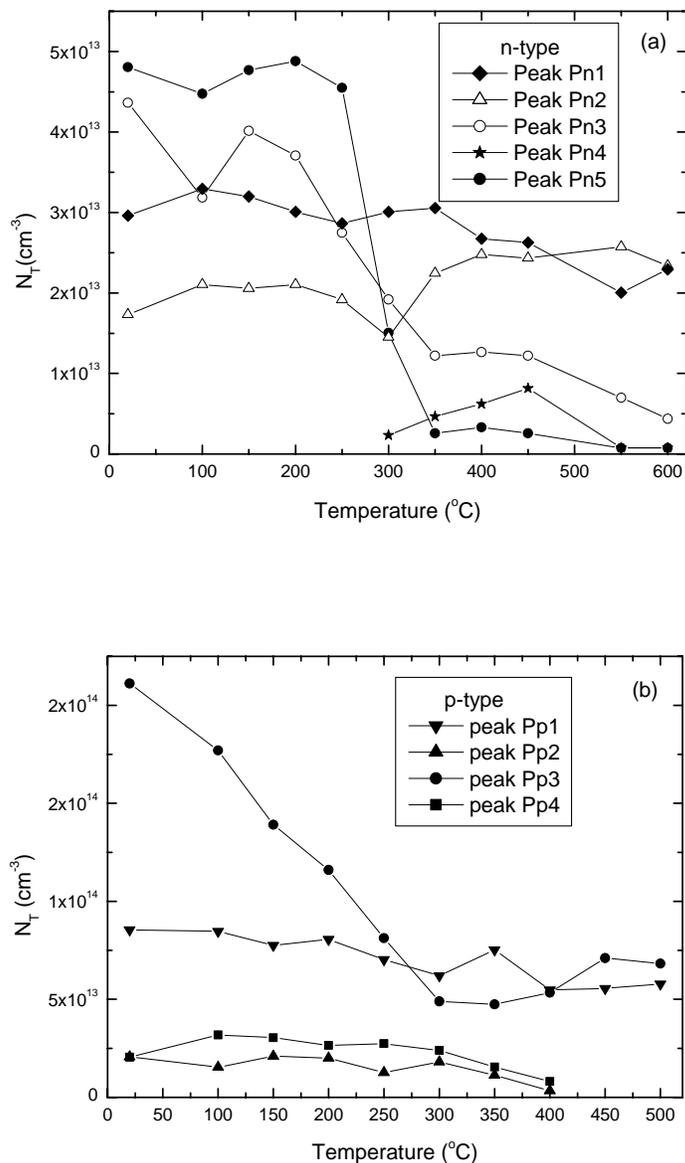


Figura 5.18 Estabilidade térmica dos centros de captura de majoritários medidos em GaAs *tipo-n* (a) e *tipo-p* (b). Cada ciclo de recozimento em RTA teve 1 min de duração e foi realizado sob uma atmosfera de Ar.

A Figura 5.18 mostra a variação da concentração dos picos obtidos para as amostras *tipo-n* (a) e *tipo-p* (b) com a temperatura de recozimento.

O primeiro fato notável representado nesta figura é a similaridade entre os comportamentos de recozimentos dos picos Pn3 e Pn5. Sabe-se^[21] que os níveis E3 e E4 recozem de maneira semelhante (no chamado estágio III: 200-250°C). Mas esta semelhança quase que ponto a ponto em 5.18 sugere que o outro defeito constituinte de Pn5 (vamos chamá-lo de E3') tenha a mesma estrutura de E4. De fato, o trabalho [30], que atribuiu o defeito $As_{Ga} + V_{As}$ a E4, também prevê um segundo estado de carga para este defeito (E4 corresponderia à transição +/++) com energia de ionização menor ou igual à de E3 (nível este que corresponderia à transição 0/+).

Vamos analisar com um pouco mais de detalhe a suposição feita acima. Se E3' realmente corresponder ao estado de carga 0/+ do defeito $As_{Ga} + V_{As}$, sua concentração deve ser a mesma de E4. Mais do que isso, os processos de emissão destes dois níveis deverão estar relacionados. Supondo que, logo após o pulso, todos os níveis estarão cheios (ou seja, com o elétron) na região de interesse (a região de depleção entre $x_0 - \lambda$ e $x_d - \lambda$), teremos o defeito no estado de carga 0. Mas o nível E4 corresponde à transição +/++. Assim, vamos considerar que somente aqueles defeitos que estiverem no estado de carga + poderão apresentar a emissão associada a este último nível. No entanto, para estar no estado de carga +, estes defeitos têm que passar pela transição correspondente a E3' (0/+). Isto mostra que a concentração n_{tE4} de centros E4 cheios irá variar no tempo de maneira dependente da concentração $n_{tE3'}$ de níveis E3' cheios. Colocando de forma matemática:

$$\frac{dn_{tE3'}}{dt} = -e_{nE3'} n_{tE3'} \rightarrow n_{tE3'} = N_t e^{-e_{nE3'} t} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dn_{tE4}}{dt} &= -e_{nE4}(N_t - n_{tE3'} - (N_t - n_{tE4})) = -e_{nE4}(n_{tE4} - n_{tE3'}) = \\
&= -e_{nE4}(n_{tE4} - N_t e^{-e_{nE3'}t}) \\
\rightarrow n_{tE4} &= \frac{e_{nE3'}}{e_{nE3'} - e_{nE4}} N_t e^{-e_{nE4}t} + \frac{e_{nE4}}{e_{nE4} - e_{nE3'}} N_t e^{-e_{nE3'}t}
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Isto mostra que o espectro DLTS observado quando dois níveis correspondem a transições de estados de carga do mesmo defeito pode diferir daquele que se obteria se os níveis fossem independentes. No entanto, para o caso de E3' e E4, as temperaturas em que estes picos são observados são suficientemente diferentes, de forma que, na “região” onde E4 aparece, $e_{nE3'}$ é muito grande, e a expressão (5.11) simplesmente retoma o resultado que seria obtido para níveis independentes: $n_{tE4} = N_t e^{-e_{nE4}t}$. Para demonstrar a relação entre a altura dos correspondentes picos, a Figura 5.19 apresenta uma simulação de E4 e E3' empregando para E3' a mesma assinatura de E3 e considerando que N_t corresponda à concentração estimada para o pico Pn3. A diferença entre estas alturas se deve exclusivamente à variação de λ de um caso para o outro.

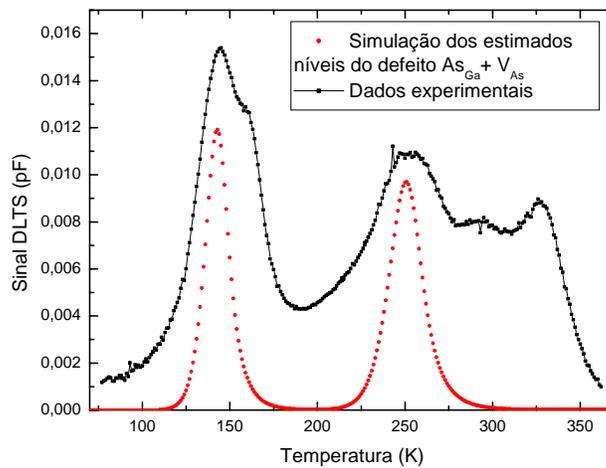


Figura 5.19 Simulação de E3' e E4 para comparar a altura de seus respectivos picos. A assinatura de E3' foi considerada igual à de E3, e o valor de N_t adotado foi a concentração estimada para Pn3.

Outro comportamento que chama a atenção é o observado para Pn2 e Pn4 (com assinaturas parecidas com as de P3 / E e P1 respectivamente). A concentração destes dois picos aumenta com recozimentos de 300 a 400-450°C. Isto está de acordo com os resultados apresentados por Pons, Mircea e Bourgoïn^[24] para P1, mas não para P3. De qualquer forma, é provável que Pn2 possua mais de uma contribuição. Como vimos, sua assinatura é semelhante tanto à de P3 quanto à de E. Além disso, esta assinatura varia consideravelmente com a temperatura de recozimento como representado na Figura 5.20. O aumento da concentração deste pico com a temperatura de recozimento revela que sua principal contribuição a estas temperaturas deve corresponder a um defeito complexo e diferente de P3.

A concentração de Pn1 (EL2) é praticamente inalterada para as temperaturas de recozimento adotadas.

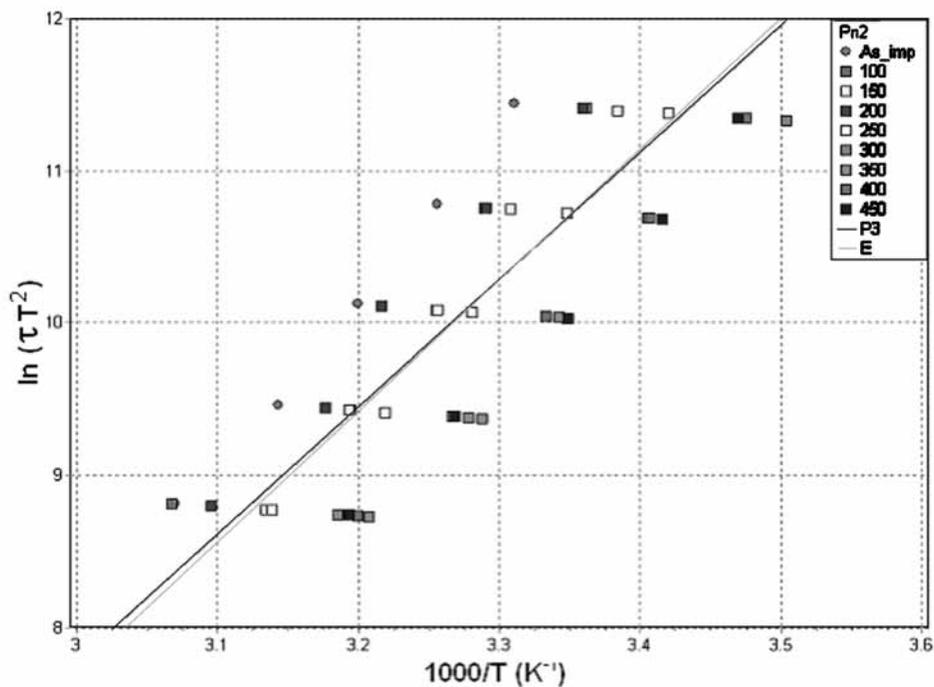


Figura 5.20 Comparação das assinaturas obtidas para Pn2 após diferentes temperaturas de recozimento.

Para os picos obtidos nas amostras *tipo-p*, a única variação considerável é observada para Pp3 (H2 + HB4) que tem sua concentração reduzida em praticamente quatro vezes após o recozimento a 300°C. O comportamento observado para o pico Pp4 indica que ele não é formado exclusivamente por H1, uma vez que este último apresenta forte recozimento para temperaturas em torno de 220-250°C [21].

A Figura 5.21 apresenta a variação da concentração total de centros de captura de majoritários tanto para as amostras *tipo-n* quanto para as *tipo-p*. Vale notar que, especialmente para o que é observado no caso *tipo-n*, a principal região de recozimento corresponde a temperaturas entre 200 e 300°C (o chamado estágio III). Esta região de temperaturas coincide com a estabilidade térmica da isolação por implantação tanto de amostras de GaAs *tipo-n* [17] quanto *tipo-p* (ver Figura 4.5 e o capítulo 2) para doses abaixo

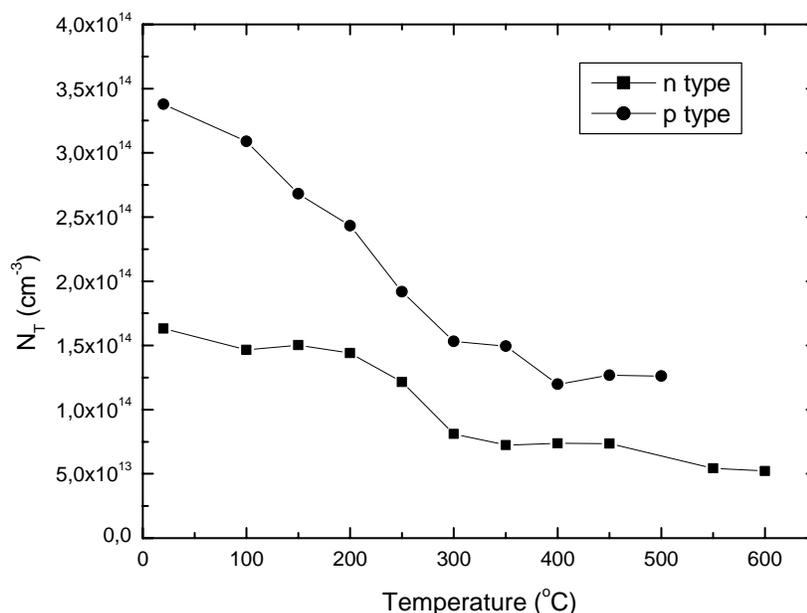


Figura 5.21 Soma das concentrações de todos os centros de captura de majoritários observados em GaAs *tipo-p* ou *tipo-n* implantado com prótons e sua variação com as etapas de recozimento.

da dose de limiar D_{th} . Isto é um indicativo de que pelo menos alguns dos níveis que observamos possam ser os responsáveis pela isolação. É importante salientar que o sistema DLTS, ao qual se teve acesso, mantinha a tensão reversa constante, e não a capacitância. Como vimos no capítulo 3, isto implica uma maior sensibilidade, mas também obriga a se ter $N_t \ll N_{dop}$. Por isso, a dose de implantação utilizada, $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, teve que ser bem menor que a dose de limiar, e, conseqüentemente, apenas pode-se observar o começo da formação dos picos que realmente serão os responsáveis pela isolação neste caso.

5.4 Conclusão

Medidas DLTS de centros de captura de majoritários foram realizadas em amostras de GaAs *tipo-n* e *tipo-p* implantadas com prótons de 600keV. Os resultados mostraram que grande parte dos defeitos observados em GaAs irradiado com elétrons também é observada neste caso. Além destes últimos, defeitos mais complexos também foram medidos (pelo menos quatro dos picos observados no caso do material *tipo-n* e três para *tipo-p* não correspondem a defeitos simples). Uma parte significativa dos picos observados em GaAs *tipo-n* está relacionada a anti-sítios isolados ou a complexos que os envolvem. Em material *tipo-p*, observamos um nível novo com energia $\sim 0,64 \text{ eV}$. O comportamento de recozimento dos picos observados para diferentes temperaturas foi apresentado, e a comparação deste comportamento com a estabilidade térmica da isolação por implantação medida anteriormente sugere que um defeito, o qual, acredita-se, esteja relacionado a um anti-sítio de As no lugar do Ga, possa desempenhar um papel significativo neste processo.

CAPÍTULO 6. DISCUSSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta secção, iremos recapitular os principais resultados apresentados nos capítulos anteriores, correlacionando-os com dados obtidos anteriormente por terceiros, numa tentativa de averiguar até que ponto estes resultados podem nos ajudar a descrever o processo de isolação por irradiação em GaAs de uma maneira mais geral, não limitada às condições específicas em que nossos experimentos foram realizados.

Para começar, no entanto, é necessário salientar mais uma vez a discussão apresentada no capítulo 3: centros de captura *versus* armadilhas. O uso da expressão centro de captura foi aqui reservado para descrever o comportamento dinâmico de um nível. Por exemplo, um centro de captura de majoritários em GaAs *tipo-n* significa um nível que, por ter sua energia (em relação à banda de condução, por exemplo) menor que a energia de Fermi e maior que E_1 (onde E_1 foi definido no capítulo 3 como

$E_1 = E_i + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{\langle v_p \rangle \sigma_p g_1}{\langle v_n \rangle \sigma_n g_0}\right)$), comunica-se quase que exclusivamente com a banda de

condução. Da mesma forma, um centro de captura de majoritários em material *tipo-p* se comunica predominantemente com a banda de valência. Já uma armadilha significa um defeito que efetivamente aprisione um tipo de portador para uma certa configuração de níveis no interior da banda proibida e uma dada temperatura. Por exemplo, em um semiconductor *tipo-n* onde a distribuição dos defeitos é tal que o nível de Fermi situa-se próximo da banda de condução, um nível que corresponda a uma transição do tipo 0/- e tenha uma energia suficientemente menor que E_f irá efetivamente aprisionar um portador livre (pode-se pensar que ele “puxará” o nível de Fermi um pouco para baixo, diminuindo a

concentração n de elétrons livres). Note-se que há casos em que um centro de captura de majoritários em material *tipo-n* (que também é chamado centro de captura de elétrons) atua como uma armadilha de elétrons. Mas também há situações em que isto não é verdade; inclusive, este nível pode até portar-se como uma armadilha de lacunas dependendo da distribuição dos demais defeitos. Esta idéia precisa ser um pouco melhor ilustrada: vamos pegar, como exemplo, o nível correspondente ao pico Pn5 (como vimos, é bem possível que este pico tenha mais de uma contribuição, mas, neste exemplo, vamos imaginar que ele se deva a apenas um nível discreto) com energia, medida a partir da banda de condução, igual à energia aparente calculada no capítulo anterior, 0.3 eV. Imaginemos dois casos hipotéticos para a transição de estado de carga à qual este nível corresponde: 0/+ e -/0. Seja, então, uma amostra de GaAs *tipo-n* dopada com uma concentração $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ de doadores cujos níveis localizam-se a 0.05eV da banda de condução: não acrescentando Pn5, teremos $n \approx 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; se introduzirmos uma concentração $N_t = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ deste nível para a transição -/0, teremos $n \approx 2,9 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, mostrando que, neste caso, ele realmente será uma armadilha de elétrons. Agora, se mudarmos a transição para 0/+, a concentração de elétrons praticamente não é alterada do valor inicial ($n \approx 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$).

Já na situação de GaAs *tipo-p* ($N_a = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, com energia de 0.05 eV a partir da banda de valência), teremos: para $N_t = 0$, $p \approx 9,7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; para $N_t (0/+) = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p \approx 4,83 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (mostrando que o nível agora se comporta como uma armadilha de lacunas); e para $N_t (-/0) = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p \approx 9,7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Este exemplo está representado na Figura 6.1.

Vale mencionar que, em todos os casos apresentados acima, o nível Pn5 mantém sua característica dinâmica, atuando como um centro de captura de elétrons (se comunica basicamente apenas com a banda de condução).

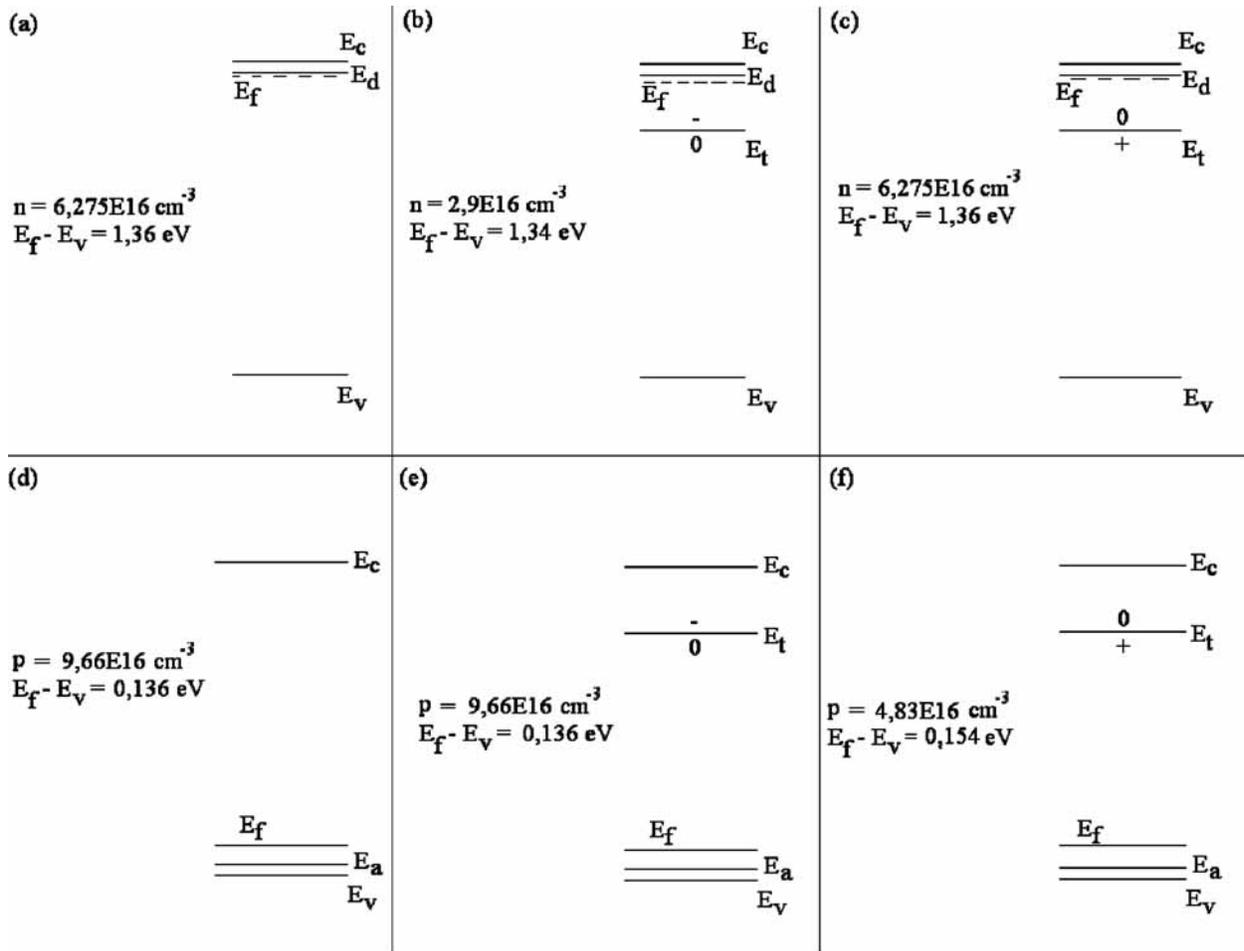


Figura 6.1 Exemplificação da diferença aqui adotada entre os termos centro de captura e armadilha.

Em (b),(c),(e) e (f), o nível com energia E_t é um centro de captura de elétrons. Para as condições representadas em (b), este nível é também uma armadilha de elétrons e, para as condições em (f), uma armadilha de lacunas.

Esta notação (centros de captura / armadilhas) foi adotada para este texto, mas não há uma notação clara definida na literatura. De fato, às vezes no mesmo trabalho, encontramos o uso da palavra “armadilha” (ou, em inglês, *trap*) para ambos os sentidos (alguns textos, por isso, chegam, às vezes, a parecer contraditórios). Assim sendo, esclarecer bem a diferença entre estas duas definições é de grande relevância.

Feito este primeiro breve comentário, podemos, então, começar a analisar as características do processo de isolação por implantação em GaAs, numa tentativa de unir os dados obtidos aqui com outros dados experimentais e obter uma descrição um pouco mais realística deste processo. Antes de mais nada, no entanto, vale salientar que o principal método direto de identificação de defeitos em semicondutores, o EPR (“*Electron Paramagnetic Resonance*”)^[11], não é tão sensível em GaAs^[22] como o é em outros semicondutores (o Si, por exemplo). Assim, a maioria dos dados experimentais obtidos para este primeiro semicondutor é fornecida por medidas que não identificam diretamente os defeitos (como o DLTS). Este fato faz com que boa parte dos modelos encontrados para os defeitos neste material ainda necessite de mais comprovações, tanto teóricas quanto experimentais. Assim, o que há de fato é uma coleção de evidências experimentais que permitem algumas especulações quanto à estrutura dos defeitos e quanto à sua associação com fenômenos tais como a isolação por implantação.

Tendo isto em vista (que, no que diz respeito à estrutura de alguns dos defeitos observados experimentalmente, não poderemos fazer uma associação direta), vamos partir da estrutura de níveis atualmente aceita^[22,15] para os anti-sítios (como o representado na Figura 6.2 e na tabela 6.1).

Tabela 6.1 . Descrição dos níveis atribuídos a anti-sítios.

Defeito	Nível	Referência
$AS_{Ga} + V_{As} (+ / 0)$	$> E_c - 0,35$	[30]
$AS_{Ga} + V_{As} (++ / +)$	$E_c - 0,74$	[30]
EL2	$E_c - 0,82$	[22]
$Ga_{As} (- / - -)$	$E_v + 0,23$	[33,34]
$Ga_{As} (0 / -)$	$E_v + 0,077$	[33,34]

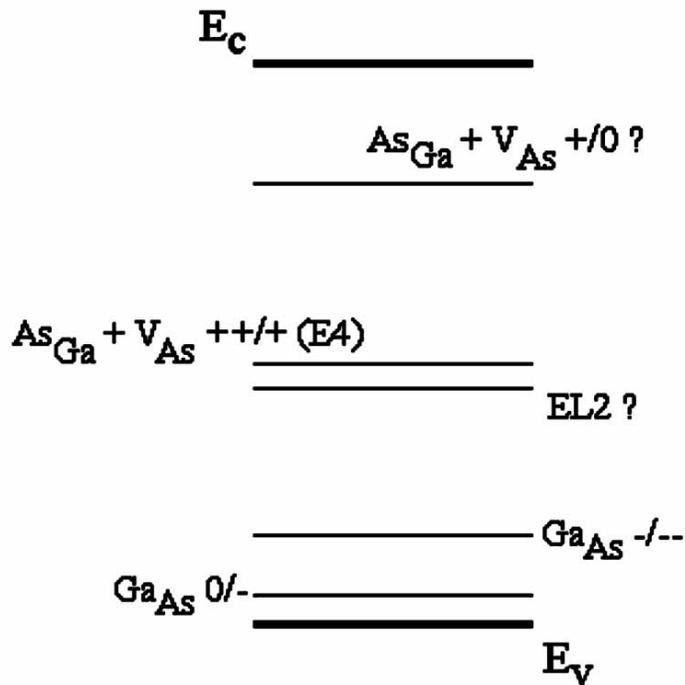


Figura 6.2 Níveis que, acredita-se^[22,15], estão associados a anti-sítios. Há dois modelos propostos para EL2: $As_{Ga} + As_i$ ^[22] e As_{Ga} isolado ou $V_{Ga} + As_i$ ^[74]. O nível da transição $+/0$ do defeito $As_{Ga} + V_{As}$ é estimado como $E_c - E_t \leq 0,35$ eV. Como vimos, há evidências de que este nível esteja bem próximo de E3 (a 0,3 eV a partir da banda de condução).

Estes defeitos são considerados os principais responsáveis pela isolação na referência [37] pela invariância da dose de limiar para implantações a temperatura ambiente e a 100°C. Para averiguar esta suposição, vamos simular o comportamento das curvas R_s x Dose para estes níveis (exceto o EL2) supondo uma taxa de introdução linear de 1000 cm^{-1} para ambos os anti-sítios. O esquema da simulação está descrito no apêndice B, e os resultados estão apresentados na Figura 6.3.

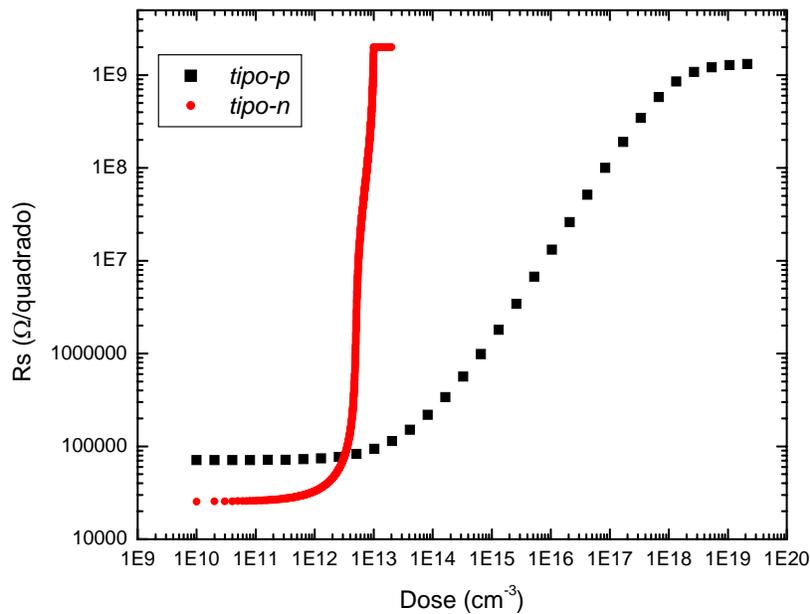


Figura 6.3 Simulação da curva R_s versus dose de implantação supondo uma taxa de introdução linear de 1000 cm^{-1} para os níveis descritos na tabela 6.1 (exceto EL2). A dopagem utilizada tanto para o caso *tipo-p* quanto *tipo-n* foi de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Note-se que este comportamento é bastante diferente do observado experimentalmente (mesmo considerando o fato que utilizamos uma taxa de introdução arbitrária, a diferença entre os comportamentos observados para *tipo-p* e *tipo-n* indica uma discrepância com relação ao que foi observado experimentalmente^[37]).

Isto mostra que, se a distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac puder ser usada, se houver conservação local de carga e o panorama adotado para os níveis dos anti-sítios estiver correto, a interpretação adotada anteriormente^[37] de que os responsáveis pela isolação seriam os anti-sítios estava um pouco equivocada. Através dos espectros DLTS apresentados no capítulo 5, pode-se inferir que o anti-sítio As_{Ga} deva participar sim do processo de isolação. Da mesma forma, o nível H0 (que não observamos pela restrição em

temperatura, mas que provavelmente apareça também em amostras implantadas com prótons, lembrando que ele foi inicialmente medido em amostras irradiadas com elétrons) já foi atribuído na literatura^[35] ao Ga_{As}, mostrando que este último anti-sítio também pode desempenhar um papel na isolação. No entanto, outros níveis também foram observados (isso sem contar com E1 e E2 que não foram observados aqui pela restrição em temperatura, mas já foram identificados em amostras implantadas com prótons^[15]) e devem contribuir para este processo.

Antes de prosseguirmos, um pequeno comentário quanto às condições do experimento apresentado no capítulo 5 deve ser feito. Empregamos a medida DLTS com transientes de capacitância, o que nos deu maior sensibilidade, mas limitou a dose de implantação adotada. Se usássemos transientes de tensão à capacitância constante, a dose poderia ser um pouco mais elevada, mas, de qualquer forma, não muito. Isto acontece porque, à medida que a concentração de defeitos vai se aproximando da concentração de dopantes, o nível de Fermi vai mudando também. Como, pensando no caso de centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-n*, medimos apenas aqueles níveis com $E_f > E_t > E_1$, para doses comparáveis com a dose de limiar, mesmo adotando transientes de tensão, não seríamos capazes de observar boa parte dos defeitos formados.

Um outro aspecto também merece ser salientado aqui: embora a dose adotada tenha sido bem menor que a dose de limiar para o nosso caso (usando a fórmula empírica descrita em [37] juntamente com dados obtidos através de uma simulação [14] para implantação de H⁺ a 600keV, estima-se uma dose de limiar em torno de $4-9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ para as amostras *tipo-n* e $2-6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ para *tipo-p*), para uma concentração menor de dopantes, esta primeira dose pode corresponder à dose de limiar. Sabe-se^[15] que a concentração de dopantes altera a taxa de introdução dos defeitos formados pela implantação com prótons

em GaAs. No entanto, de forma qualitativa, é de se esperar que a mesma estrutura de defeitos seja formada para uma implantação semelhante em amostras com diferentes concentrações de dopantes. Isso indica que os defeitos observados no capítulo 5 devem ser os responsáveis pela isolação ao menos de amostras mais fracamente dopadas. Vamos, então, fazer algumas suposições que nos permitam utilizar os dados obtidos e simular os comportamentos das curvas R_s versus dose: usaremos taxas de introdução fixas e em acordo com as concentrações medidas; usaremos transições encontradas na literatura^[22] para os picos Pn1 (+/0), Pn3 (++/+) e Pn5 (+/0); quanto aos níveis cujas transições não são conhecidas, adotaremos as transições +/0 para Pn2 e Pn4 e 0/- para Pp1, Pp3 e Pp4. A Figura 6.4 mostra esta simulação utilizando apenas os picos medidos no capítulo 5 (com exceção de Pn2 cuja energia não foi determinada).

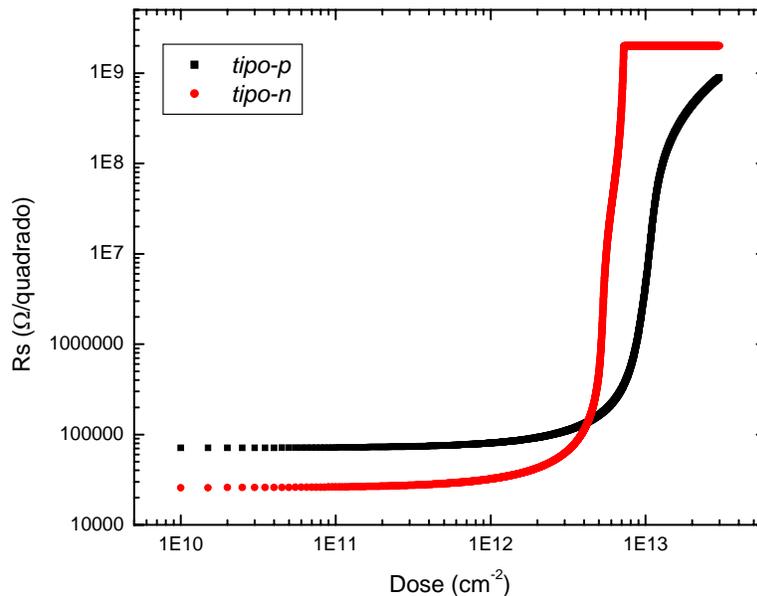


Figura 6.4 Simulação da evolução da resistência de folha com a dose de implantação de prótons de 600keV considerando os picos observados no capítulo 5 (a concentração de dopantes utilizada foi $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$).

Estes dados ainda não são suficientes para descrever o comportamento observado em [37], o qual indicava a mesma dose de limiar para amostras *tipo-p* e *tipo-n* com semelhantes concentrações de portadores. Note-se que a dose de limiar nestes dois casos (com concentração de dopantes de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e implantação de prótons de 600keV) é estimada em $2-6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Ou seja, a descrição que adotamos (usando apenas os picos observados, atribuindo a eles as transições relatadas acima e assumindo que a distribuição de Fermi-Dirac de equilíbrio pode ser usada e há conservação local de carga) deve ser de alguma forma modificada para reproduzir, ao menos qualitativamente, o comportamento medido. Trabalhos anteriores^[32,15], medindo DLTS em amostras de GaAs *tipo-n* implantada com prótons, apontaram a presença dos níveis E1 e E2 (eles não foram vistos no nosso experimento devido à limitação em temperatura do mesmo). Estes níveis são atribuídos a V_{As} ^[22], suas energias aparentes (em relação à banda de condução) são 0.045eV (E1) e 0.14eV (E2), e medidas de aniquilação de pósitrons^[35] revelaram que eles correspondem às transições 0/- (E1) e +/-0 (E2). A concentração destes níveis pode ser estimada, pelos dados apresentados na referência [15], em duas vezes a concentração de Pn5. Outro nível que provavelmente apareça para baixas temperaturas (desta vez, porém, no espectro de centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-p* implantado com prótons) é o chamado H0, um nível medido em amostras irradiadas com elétrons. Este nível já foi tentativamente associado ao anti-sítio Ga_{As} ^[35] (transição 0/-) e sua energia aparente, a partir da banda de valência, é 0.06 eV. Para estimar sua concentração, vamos supor que este modelo de anti-sítio esteja correto e que a mesma concentração de Ga_{As} e As_{Ga} seja formada. Se cada As_{Ga} introduzir o nível E4 ou o nível EL2, então poderemos assumir que a taxa de introdução de H0 seja a soma das taxas de introdução destes dois outros níveis. Acrescentando estes três

novos níveis ao modelo sugerido acima, obtemos a curva R_s x Dose representada na Figura 6.5.

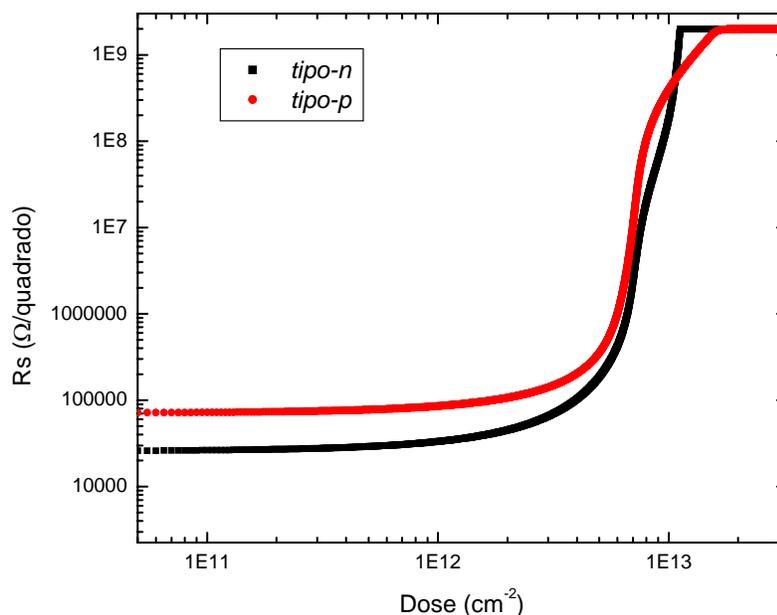


Figura 6.5. Simulação da variação da resistência de folha medida com a dose de implantação de prótons de 600 keV incluindo H0, E1 e E2 aos níveis medidos no capítulo 5.

Este comportamento já é qualitativamente mais parecido com o medido experimentalmente, indicando que a estrutura de defeitos adotada para obtê-lo é mais completa que a simples descrição usando anti-sítios.

É importante deixar claro que, para se chegar a esta figura, uma quantidade bem grande de informações teve que ser estimada (assumimos que vários modelos apresentados na literatura estivessem certos, atribuímos transições convencionais aos níveis cujas transições não foram estimadas em nenhum modelo, aproximamos as taxas de introdução dos níveis como independentes da dose de implantação ou da concentração de dopantes, etc...). Mesmo assim conseguimos obter resultados qualitativamente parecidos com o que é

observado experimentalmente. Isto nos permite especular que os níveis descritos aqui desempenhem um papel importante na isolação.

No entanto, a quantidade atual de dados sobre este processo não é suficiente para se obter algo além de especulação. Uma série sistemática de medidas DLTS para diferentes doses de implantação de H^+ e diferentes concentrações de dopantes é necessária para obtermos informações mais confiáveis sobre estes defeitos e suas taxas de introdução. Outros tipos mais sensíveis de DLTS devem ser adotados para separar contribuições próximas e estimar mais precisamente a distribuição dos níveis na banda proibida. Os valores obtidos para as energias aparentes devem ser corrigidos, utilizando-se medidas de secções de choque para portadores livres. Outras medidas devem ser feitas em paralelo para observar a distribuição dos níveis quando a concentração dos mesmos se torna comparável à concentração de dopantes (fotoluminescência, por exemplo) e para obter as transições correspondentes a cada nível (Hall com temperatura variável pode ajudar, mas algum outro tipo de medida ainda será necessário). Ou seja, uma quantidade grande de trabalho experimental e teórico ainda é requerida para que se possa chegar a uma descrição mais precisa deste processo, a qual possa ser usada na otimização de todas as suas aplicações.

CAPÍTULO 7. CONCLUSÕES

A isolação por implantação em GaAs ainda não é um tema completamente compreendido, e o acúmulo de resultados experimentais sobre o assunto é de vital importância para possibilitar o desenvolvimento de modelos que possam descrevê-la de maneira mais satisfatória.

A redução da condutividade de camadas *tipo-p* deste semiconductor através do referido processo foi estudada. Comparou-se a utilização de dois distintos dopantes: o C (que, acredita-se, é ativado quando ocupa, de forma substitutiva, uma posição na sub-rede do As) e o Mg (que é ativado na sub-rede do Ga). Em ambos os casos, a mesma dose de limiar para a isolação foi observada, revelando que o processo de isolação por implantação, para este tipo de material, independe da sub-rede associada ao dopante. Diferentes comportamentos de recozimento pós-irradiação, no entanto, foram constatados entre as amostras com C e aquelas com Mg. Estas diferenças são um indicativo da formação, provavelmente durante o recozimento, de distintas estruturas de defeitos em cada situação.

Medidas DLTS foram realizadas para identificar os níveis introduzidos pela implantação de prótons de 600 keV em GaAs *tipo-n* e *tipo-p*. Uma parte considerável dos defeitos previamente observados para a irradiação com elétrons de 1MeV também foi identificada neste caso. Além destes, outros defeitos mais complexos foram observados. Um nível desconhecido na literatura, com energia de $\sim 0,64$ eV a partir da banda de valência, foi medido no espectro de centros de captura de majoritários em material *tipo-p*. O comportamento de recozimento dos picos introduzidos pela implantação revelou um

estágio de recuperação de defeitos para temperaturas entre 250-300°C. O mais eminente dos picos observados nos espectros de centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-p* implantado com prótons, ao qual designamos a sigla Pp3, apresenta forte recozimento para temperaturas na faixa de 100 a 300°C. Este nível pode estar associado ao recozimento inverso medido a 150 e 200°C para a resistência de folha de amostras de GaAs *tipo-p* implantadas até doses próximas, mas inferiores à de limiar (note-se que o fato de ser um centro de captura de lacunas não impede este defeito de atuar como uma armadilha de elétrons).

Simulações mostraram que uma descrição atualmente aceita dos níveis relacionados a anti-sítios, por si só, é incapaz de reproduzir, mesmo que de modo qualitativo, a variação, medida experimentalmente, da resistência de folha, R_s , de camadas dopadas de GaAs com o acréscimo da dose de prótons implantada.

Uma grande quantidade de trabalho experimental e teórico é ainda requerida para a construção de um modelo que possa, de maneira adequada, descrever os principais aspectos da isolação por implantação em GaAs.

REFERÊNCIAS

- 1 – Canadian Microelectronics Corporation. Disponível em: < <http://www.cmc.ca/about/corporation/plan/Module5/mod5.1.html> >. Acesso em: 3 ago. 2003.
- 2 – TUYL, R. L. van et al. A manufacturing process for analog and digital gallium arsenide integrated circuits. *IEEE Transactions on Electron Devices*, New York, v. 29, n. 7, p. 1031-1037, July 1982.
- 3 – CLAUWAERT, F. et al. Characterization of device isolation in GaAs-MESFET circuits by boron implantation. *Journal of the Electrochemical Society*, Pennington, v. 134, n. 3, p. 711-714, Mar. 1987.
- 4 – REN, F. et al. Implant isolation of GaAs-AlGaAs heterojunction bipolar-transistor structures. *Applied Physics Letters*, Woodbury, v. 56, n. 9, p. 860-862, Feb. 1990.
- 5 – MORKOÇ, H.; SOLOMON, P. M. The HEMT: a super-fast transistor. *IEEE Spectrum*, New York, v. 21, n. 2, p. 28-35, Feb. 1984.
- 6 – WILMSEN, C. W.; TENKIN, H.; COLDREN, L. A. *Vertical-Cavity Surface-Emitting Laser: design, fabrication, and applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- 7 – SOUZA, J. P. de; DANILOV, I.; BOUDINOV, H. Thermal stability of the electrical isolation in n-type GaAs: effects of damage and carrier concentrations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Amsterdam, v. 122, n. 1, p. 51-54, Jan. 1997.
- 8 – PEARTON, S. J. Ion implantation for isolation of III-V semiconductors. *Materials Science Reports*, Amsterdam, v. 4, p. 313-367, May 1990.
- 9 – PEARTON, S. J. Ion-implantation doping and isolation of III-V semiconductors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Amsterdam, v. 59, n. 2, p. 970-977, July 1991.
- 10 – PEARTON, S. J. Ion implantation in III-V semiconductor technology. *International Journal of Modern Physics B*, Singapore, v. 7, p. 4687-4761, Dec. 1993.
- 11 – BOURGOIN, J.; LANNON, M. *Point defects in semiconductors II: experimental aspects*. Berlin: Springer-Verlag, 1983.

- 12 – KATO, Y. et al. Electrical-conductivity of disordered layers in GaAs crystal produced by ion-implantation. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 45, n. 3, p. 1044-1049, 1974.
- 13 – SOUZA, J. P. de; DANILOV, I.; BOUDINOV, H. Electrical isolation in GaAs by light ion irradiation: the role of antisite defects. *Applied Physics Letters*, Woodbury, v. 68, n. 4, p. 535-537, Jan. 1996.
- 14 – ZIEGLER, J. F.; BIERSACK, J. P.; LITTMARK, U. *The stopping and range of ions in solids*. Oxford: Pergamon, 1985. v 1.
- 15 – KOZLOV, V. A.; KOZLOVSKI, V. V. Doping of semiconductors using radiation defects produced by irradiation with protons and alpha particles. *Semiconductors*, Melville, v. 35, n. 7, p. 735-761, July 2001.
- 16 – SOUZA, J. P. de; DANILOV, I.; BOUDINOV, H. Electrical isolation of n-type GaAs layers by proton bombardment: effects of the irradiation temperature. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 84, n. 9, p. 4757-4760, Nov. 1998.
- 17 – SOUZA, J. P. de; DANILOV I.; BOUDINOV H. Thermal stability of the electrical isolation in n-type gallium arsenide layers irradiated with H, He, and B ions. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 81, n. 2, p. 650-655, Jan. 1997.
- 18 – STIEVENARD, D. et al. Behavior of electron-irradiation-induced defects in GaAs. *Physical Review B*, Woodbury, v. 41, n. 8, p. 5271-5279, Mar. 1990.
- 19 – WORNER, R.; KAUFMAN, U.; SCHNEIDER, J. Electron-spin resonance of AsGa antisite defects in fast neutron-irradiated GaAs. *Applied Physics Letters*, New York, v. 40, n. 2, p. 141-143, Jan. 1982.
- 20 – AHMED, S.; TOO, P.; SEALY, B. J. Electrical isolation of n-type GaAs and InP using helium ion irradiation at variable target temperatures. *Applied Physics Letters*, Melville, v. 79, n. 21, p. 3533-3535, Nov. 2001.
- 21 – PONS, D.; BOURGOIN, J. C. Irradiation-induced defects in GaAs. *Journal of Physics C*, Bristol, v. 18, n. 20, p. 3839-3871, July 1985.
- 22 – BOURGOIN, J. C.; BARDELEBEN, H. J. von; STIEVENARD D. Native defects in gallium arsenide. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 64, n. 9, p. R65-R91, Nov. 1988.
- 23 – THOMMEN, K. Recovery of low temperature electron irradiation-induced damage in n-type GaAs. *Radiation Effects*, v. 2, n. 3, p. 201-210, Feb. 1970.
- 24 – PONS, D.; MIRCEA, A.; BOURGOIN J. C. An annealing study of electron irradiation-induced defects in GaAs. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 51, n. 8, p. 4150-4157, Aug. 1980.

- 25 – LIM, H.; BARDELEBEN H. J. von; BOURGOIN J. C. Experimental-determination of the energy stored by a vacancy-interstitial pair in GaAs. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 58, n. 22, p. 2315-2317, June 1987.
- 26 – BARAFF, G. A.; SCHLUTER, M. Electronic-structure, total energies, and abundances of the elementary point-defects in GaAs. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 55, n. 12, p. 1327-1330, Sept. 1985.
- 27 – LOUALICHE, S. et al. Electron-irradiation effects in p-type GaAs. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 53, n. 12, p. 8691-8696, Dec. 1982.
- 28 – STIEVENARD, D.; BOURGOIN, J. C. Defect-enhanced annealing by carrier recombination in GaAs. *Physical Review B*, Woodbury, v. 33, n. 12, p. 8410-8415, Jun. 1986.
- 29 – BARDELEBEN, H. J. von; MIRET, A.; LIM, H.; BOURGOIN, J. C. Arsenic antisite formation by electron-irradiation of n-type GaAs. *Journal of Physics C*, Bristol, v. 20, n. 9, p. 1353-1357, Mar. 1987.
- 30 – BARDELEBEN, H. J. von; BOURGOIN, J. C.; MIRET, A. Identification of the arsenic-antisite-arsenic-vacancy complex in electron-irradiated GaAs. *Physical Review B*, Woodbury, v. 34, n. 2, p. 1360-1362, July 1986.
- 31 – TAN, H. H.; WILLIAMS, J. S.; JAGADISH, C. Characterization of deep levels and carrier compensation created by proton irradiation in undoped GaAs. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 78, n. 3, p. 1481-1487, Aug. 1995.
- 32 – EISEN, F.H. et al. Ion irradiation damage in n-type GaAs in comparison with its electron-irradiation damage. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 72, n. 12, p. 5593-5601, Dec. 1992.
- 33 – YU, P. W. et al. Evidence of intrinsic double acceptor in GaAs. *Applied Physics Letters*, New York, v. 41, n. 6, p. 532-534, Sept. 1982.
- 34 – ELLIOTT, K. R. et al. Infrared-absorption of the 78-meV acceptor in GaAs. *Applied Physics Letters*, New York, v. 40, n. 10, p. 898-901, May 1982.
- 35 – SAARINEN, K. et al. Introduction and recovery of point-defects in electron-irradiated Te-doped and Si-doped GaAs studied by positron lifetime spectroscopy. *Physical Review B*, Woodbury, v. 52, n. 15, p. 10932-10946, Oct. 1995.
- 36 – ITOH, Y. et al. Defect study of proton-irradiated liquid-encapsulated Czochralski GaAs using the positron-annihilation technique. *Applied Physics A*, Berlin, v. 60, n. 1, p. 57-60, Jan. 1995.

- 37 – SOUZA, J. P. de; DANILOV, I.; BOUDINOV, H. Electrical isolation of GaAs by light ion irradiation damage. *Radiation Effects and Defects in Solids*, Reading, v. 147, n. 1/2, p. 109-120, 1998.
- 38 – STIEVENARD, D.; BODDAERT, X.; BOURGOIN, J. C. Irradiation-induced defects in p-type GaAs. *Physical Review B*, Woodbury, v. 34, n. 6, p. 4048-4058, Sept. 1986.
- 39 – LANG, D.V. Deep-Level Transient Spectroscopy: new method to characterize traps in semiconductors. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 45, n. 7, p. 3023-3032, July 1974.
- 40 – PEAKER, A.R. et al. High-resolution Laplace Deep Level Transient Spectroscopy a new tool to study implant damage in silicon. In: ELECTROCHEMICAL SOCIETY MEETING (200. : 2001 : San Francisco). Proceedings. Pennington : Electrochemical Society, 2002. 13 p. (Proceedings; v.2001-25). Disponível em: < <http://www.mcc.ac.uk/cem/laplace/publications/index.html> >. Acesso em: 1 out. 2003.
- 41 – INTERNATIONAL CONFERENCE ON DEFECTS IN SEMICONDUCTORS, 22., 2003, Aarhus. Disponível em: < <http://www.phys.au.dk/icds22/> >. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 42 – European community COPERNICUS contract. Disponível em: < <http://www.mcc.ac.uk/cem/laplace/copernicus/index.html> >. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 43 – BLOOD, P.; ORTON, J. W. *The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states*. London: Academic Press, 1997.
- 44 – SZE, S. M. *Physics of semiconductor devices*. 2. ed. New York: John Wiley, 1981.
- 45 – BRENNAN K. F. *The physics of semiconductors with applications to optoelectronic devices*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- 46 – SCHRODER, D. K. *Semiconductor material and device characterization*. New York: John Wiley, 1998.
- 47 – ISTRATOV, A. A.; VYVENKO, O. F. Exponential analysis in physical phenomena. *Review of Scientific Instruments*, Melville, v. 70, n. 2, p. 1233-1257, Feb. 1999.
- 48 – NOLTE, D. D.; HALLER, E. E. Optimization of the energy resolution of deep level transient spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 62, n. 3, p. 900-906, Aug. 1987.
- 49 – HENINI, M.; TUCK, B.; PAULL, C. J. A microcomputer-based deep level transient spectroscopy (DLTS) system. *Journal of Physics E*, Bristol, v. 18, n. 11, p. 926-929, Nov. 1985.

- 50 – IKEDA, K.; TAKAOKA, H. Deep Level Fourier Spectroscopy for determination of deep level parameters. *Japanese Journal of Applied Physics*, Tokyo, v. 21, n. 3, p. 462-466, Mar. 1982.
- 51 – KIRCHNER, P. D. et al. The analysis of exponential and non-exponential transients in deep-level transient spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 52, n. 11, p. 6462-6470, 1981.
- 52 – WEISS, S.; KASSING, R. Deep Level Transient Fourier Spectroscopy (DLTFS): a technique for the analysis of deep level properties. *Solid-State Electronics*, Oxford, v. 31, n. 12, p. 1733-1742, Dec. 1988.
- 53 – OKUYAMA, M.; TAKAKURA, H.; HAMAKAWA, Y. Fourier-transformation analysis of deep level transient signals in semiconductors. *Solid-State Electronics*, Oxford, v. 26, n. 7, p. 689-694, July 1983.
- 54 – WEISSTEIN, E. World of mathematics. Disponível em: <
<http://mathworld.wolfram.com/FourierTransform.html>>. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 55 – Fourier transforms for aperiodic, periodic and truncated periodic functions. Disponível em: <
<http://www.cooper.edu/engineering/projects/gateway/ee/solidmat/modlec1/node2.html>>. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 56 – PRESS, W. H. et al. *Numerical recipes in C: the art of scientific computing*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
- 57 – IKOSSIANASTASIOU, K.; ROENKER, K. P. Refinements in the method of moments for analysis of multiexponential capacitance transients in deep-level transient spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 61, n. 1, p. 182-190, Jan. 1987.
- 58 – ISENBERG, I.; DYSON, R. D. Analysis of fluorescence decay by a method of moments. *Biophysical Journal*, New York, v. 9, n. 11, p. 1337-1350, Nov. 1969.
- 59 – FRAGA, H. *Problemas inversos: conceitos básicos e aplicações*. Disponível em: <
<http://www.lac.inpe.br/~haroldo/CursoPI/CursoPI.pdf>>. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 60 – VANVECHTEN, J. A.; THURMOND, C. D. Entropy of ionization and temperature-variation of ionization levels of defects in semiconductors. *Physical Review B*, New York, v. 14, n. 8, p. 3539-3550, Oct. 1976.
- 61 – LANNOO, M.; BOURGOIN, J. *Point defects in semiconductors I: theoretical aspects*. Berlin: Springer-Verlag, 1981.

- 62 – THURMOND, C. D. Standard thermodynamic functions for formation of electrons and holes in Ge, Si, GaAs, and GaP. *Journal of the Electrochemical Society*, Hooksett, v. 122, n. 8, p. 1133-1141, Aug. 1975.
- 63 – CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an introduction to thermostatitics*. 2. ed. New York: John Wiley, 1985.
- 64 – BLOOD P.; ORTON, J. W. *The electrical characterization of semiconductors: majority carriers and electron states*. London: Academic Press, 1997. cap. 10, p. 560-564.
- 65 – KIRKMAN, R. F.; STRADLING, R. A.; LINCHUNG, P. J. Infrared study of shallow acceptor states in GaAs. *Journal of Physics C*, Bristol, v. 11, n. 2, p. 419-433, Jan. 1978.
- 66 – VANBERLO, W. H. Carbon implanted into gallium-arsenide. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 73, n. 6, p. 2765-2769, Mar. 1993.
- 67 – DANILOV, I. et al. Electrical activation of carbon in GaAs: implantation temperature effects. *Applied Physics Letters*, Melville, v. 78, n. 12, p. 1700-1702, Mar. 2001.
- 68 – HADDARA, Y. M. Modeling diffusion in gallium-arsenide: recent work. *MRS Bulletin*, Pittsburgh, v. 20, n. 4, p. 41-50, Apr. 1995.
- 69 – Programa de simulação de interações de íons com a matéria. Disponível em: <<http://www.srim.org/index.htm#SRIMMENU>>. Acesso em: 6 ago. 2003.
- 70 – SOUZA, J. P. de; SADANA, D. K. Ion implantation of silicon and gallium arsenide. In: MAHAJAN, S. (Ed.). *Handbook on semiconductors: materials, properties and preparation*. Amsterdam: North-Holland, 1994. v. 3b, p. 2033-2126.
- 71 – BLAKEMORE, J. S. Semiconducting and other major properties of gallium-arsenide. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 53, n. 10, p. R123-R181, Oct. 1982.
- 72 – MORGAN, D. V.; EISEN, F. H. *Gallium arsenide materials, devices, and circuits*. New York: John Wiley, 1985.
- 73 – HUANG, T. C. et al. Field-induced wave-guides and their application to modulators. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, New York, v. 29, n. 4, p. 1131-1143, Apr. 1993.
- 74 – KAMINSKA, M.; SKOWRONSKI, M.; KUSZKO, W. Identification of the 0.82-eV electron trap, EL2 in GaAs, as an isolated antisite arsenic defect. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 55, n. 20, p. 2204-2207, Nov. 1985.

75 – BOUDINOV, H. et al. Characterization of deep level traps responsible for isolation of proton implanted GaAs. *Journal of Applied Physics*, Melville, v. 93, n. 6, p. 3234-3238, Mar. 2003.

APÊNDICE A: MEDIDA DE SECÇÃO DE CHOQUE DE MAJORITÁRIOS PARA CENTROS DE CAPTURA DE MAJORITÁRIOS

Como vimos no capítulo 3, a medida DLTS por si só não é capaz de nos prover valores adequados de $E_c - E_t$ (ou $E_t - E_v$) que possam ser comparados com os obtidos por outras técnicas. Isto não se deve simplesmente ao fato de que, por ser uma medida a temperatura variável, o valor extraído do *plot* de Arrhenius não corresponda diretamente a $E_c - E_t \equiv \Delta G|_{T,P}$, mas sim a ΔH (como foi mostrado no capítulo 3). Pode haver também uma contribuição ao valor medido devida à variação da secção de choque do defeito para o devido portador com a temperatura. Como vimos, há diferentes possíveis comportamentos de $\sigma_{n,p}(T)$, e uma medida paralela de secção de choque de portadores é necessária para a adequada obtenção do valor $E_c - E_t$ (ou $E_t - E_v$). O objetivo desta secção é ilustrar, mesmo que de forma superficial, a obtenção de $\sigma_{n,p}$ para um dado valor de temperatura, para o caso específico da captura de majoritários por *centros de captura* de majoritários e utilizando um aparato experimental completamente similar ao da medida DLTS.

Uma vez entendida a essência do DLTS, o método utilizado na medida de secção de choque de portadores que será descrita é bastante simples. A idéia consiste basicamente em se estabilizar a temperatura em um valor correspondente a um pico medido no espectro DLTS (para medidas de janelas de taxas de emissão), aplicar tensão reversa e esperar suficiente tempo para que todos os *centros de captura* de majoritários dentro da zona de depleção consigam emitir seus portadores majoritários. Após este tempo, teremos estes níveis vazios dentro da zona de depleção. Então, o que se faz é aplicar um pulso (de tensão 0, por exemplo) com uma “largura” t_{pulso} bem definida. Após este pulso, mede-se normalmente o transiente de capacitância a tensão reversa constante aplicada. Desta forma, a amplitude do transiente medido nos proverá informação sobre a concentração destes níveis que conseguiu capturar o portador no tempo t_{pulso} , ou seja, informação sobre a taxa de captura para este portador no dado nível. Desta informação, poderemos extrair o valor da secção de choque.

Vamos, então, rever este panorama com um pouco mais de detalhe. Inicialmente, estabilizamos a temperatura no valor de um pico correspondente a um dado nível presente no espectro DLTS de janelas de taxas de emissão. O fato de mantermos a temperatura neste valor nos permite assumir que o transiente de emissão que será posteriormente observado se deverá basicamente à emissão daquele nível (ou seja, podemos separar a contribuição dos diferentes níveis pegando a temperatura correspondente a cada pico para uma dada janela). Após, tensão reversa é aplicada, e espera-se tempo suficiente para que o nível em questão emita os portadores. Então, aplica-se o pulso com tempo total t_{pulso} . Durante este pulso, alguns dos níveis capturarão portadores majoritários, e a concentração de níveis cheios $n_i(t_{\text{pulso}})$ poderá ser calculada, levando em conta que este nível comporta-se como um *centro de captura* de majoritários, a partir da equação diferencial 3.4 (adotaremos como exemplo o caso de material *tipo-n*):

$$\frac{dn_t}{dt} = (c_n + e_p)(N_t - n_t) - (e_n + c_p)n_t \quad (3.4)$$

$$\rightarrow \frac{dn_t}{dt} = c_n(N_t - n_t) - e_n n_t \quad (A.1)$$

$$n_t(t_{pulso}) = N_t \frac{c_n}{e_n + c_n} \left(1 - e^{-(e_n + c_n)t_{pulso}}\right) \quad (A.2)$$

onde consideramos que, logo antes do pulso ($t=0$), $n_t(0)=0$.

Agora, podemos considerar a fração $F(t_{pulso})$ dos níveis que não foram preenchidos no pulso (em relação à concentração total de níveis preenchidos na situação de equilíbrio):

$$F(t_{pulso}) \equiv \frac{n_t(\infty) - n_t(t_{pulso})}{n_t(\infty)} = 1 - \frac{n_t(t_{pulso})}{n_t(\infty)} = e^{-(e_n + c_n)t} \quad (A.3)$$

$$\text{onde } n_t(\infty) = N_t \frac{c_n}{c_n + e_n}.$$

Como vimos no capítulo 3, o sinal DLTS máximo obtido para um dado pico e para uma certa configuração de parâmetros em um sistema de janelas de taxas de emissão é diretamente proporcional (dentro da usual aproximação de que cada pico corresponda a um único nível discreto) ao ΔC medido no transiente (a variação entre $C(0)$ e $C(\infty)$). Vamos chamar a constante de proporcionalidade (que dependerá, é claro da função peso e dos demais parâmetros adotados) de R_{pico} , de forma que $S_{pico} = R_{pico} \Delta C$. Assim como, de 3.77,

temos $\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{N_t}{N_d}$ para o caso em que todos os níveis estão cheios no começo

do transiente de emissão, para o caso em que nem todos eles estejam (apenas $n_t(t_{pulso})$ estarão), pode-se chegar a:

$$\frac{\Delta C_0}{C(\infty)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_d^2} \right\} \frac{n_t(t_{pulso})}{N_d} \quad (A.4)$$

Usando esta última relação e a relação linear obtida para S_{pico} , é fácil mostrar que:

$$F(t_{pulso}) = 1 - \frac{S_{pico}(t_{pulso})}{S_{pico}(\infty)} \quad (A.5)$$

onde $S_{pico}(t)$ representa o valor do sinal DLTS obtido para a temperatura do pico em questão quando o pulso de preenchimento dos níveis tem tempo total “t”.

Assim, como o valor da taxa de emissão para o nível em questão corresponde à janela utilizada, medindo-se $F(t_{pulso})$ para diferentes t_{pulso} podemos extrair o valor de c_n .

Uma vez estimado este valor, a secção de choque para captura de elétrons deste nível para esta temperatura pode ser facilmente calculada através da relação 3.2 ($c_n = \sigma_n n \langle v_n \rangle$).

Diversas aproximações foram feitas na descrição acima: $N_t \ll n$ (para que possamos considerar n constante em 3.4), consideramos a aproximação de depleção (desconsideramos efeitos, por exemplo, da cauda na distribuição de elétrons próxima a x_0 quando o pulso é aplicado), apenas o caso de captura de majoritários por *centros de captura* de majoritários foi levado em conta, etc... Enfim, o objetivo deste apêndice é meramente passar ao leitor uma noção de como funciona uma medida de secção de choque de portadores. Uma discussão bem mais ampla pode ser encontrada na referência [43].

Para a correta obtenção dos valores de $E_c - E_t$ em um sistema de janelas de taxas de emissão, precisamos calcular a secção de choque de captura de elétrons para cada pico em uma dada janela de taxas de emissão. Com os pares ($e_n = 1/\tau_{ref}$, σ_n) obtidos para cada pico (e à temperatura correspondente a cada pico), basta usar a relação abaixo para achar o adequado valor de $\Delta G(T)$:

$$e_n(T) = \sigma_n(T) \gamma_n T^2 e^{-\frac{\Delta G(T)}{kT}} \quad (A.6)$$

APÊNDICE B. CÁLCULO DO NÍVEL DE FERMI E ESTIMATIVA DA RESISTÊNCIA DE FOLHA DE AMOSTRAS DE GAAS COM NÍVEIS PROFUNDOS

O objetivo deste apêndice é apresentar de forma concisa os cálculos empregados nos capítulos 4 e 6 para obter parâmetros como a concentração de portadores livres, a concentração de defeitos ionizados e a resistência de folha de amostras de GaAs (evidentemente, um cálculo completamente análogo pode ser feito para outros semicondutores) com diversos níveis introduzidos em sua banda proibida.

Para iniciar este cálculo, vamos considerar inicialmente a determinação da concentração de portadores livres (ilustraremos apenas o caso com elétrons, mas o caso com lacunas é completamente análogo) de um semiconductor:

$$n = 2 \int_{E_c}^{\infty} D(E') f(E', E_f) dE' \quad (\text{B.1})$$

Onde usaremos para $f(E, E_f)$ a distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac. Supondo que a banda de condução seja parabólica e isotrópica, teremos [C.1]:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}; \quad E > E_c \quad (\text{B.2})$$

Imaginando o caso não degenerado ($E_f < E_c$), poderemos aproximar $f(E, E_f)$ por $e^{-\frac{E-E_f}{kT}}$. Assim, chega-se a:

$$n = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E' - E_c} e^{-\frac{E' - E_f}{kT}} dE' = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{E''} e^{-\frac{E''}{kT}} dE'' \quad (\text{B.3})$$

O valor desta última integral é $\frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2}$, de forma que:

$$n = 4 \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} \equiv 2N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{kT}} \quad (\text{B.4})$$

onde N_c é chamado a densidade efetiva de estados na banda de condução.

No caso do GaAs, no entanto, há um problema: a banda de condução com vale mais “próximo” da valência (Γ_6) não é parabólica. Assim, para poder-se continuar usando a relação (B.4), utiliza-se um valor ajustado para N_c [C.2]:

$$N_c' = N_c (1 + 1,73 \times 10^4 T + 3,8 \times 10^{-8} T^2 + 4,36 \times 10^{-11} T^3) \quad (\text{B.5})$$

[C.1] KITTEL, C. *Introduction to solid state physics*. 7 ed. New York: John Wiley, 1996.

[C.2] BLAKEMORE, J. S. Semiconducting and other major properties of gallium-arsenide. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 53, n. 10, p. R123-R181, Oct. 1982.

À temperatura ambiente e usando $m^* = 0,063 m_e$ ^[C.3], chega-se a $N_c' = 4,19 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Da mesma forma:

$$p = 2N_v e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}}; N_v = 2 \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (\text{B.6})$$

Uma vez estimada as concentrações de portadores livres, precisamos agora avaliar o estado de carga em que os defeitos presentes no material (que introduzem os níveis referidos acima) vão se encontrar. Para fazê-lo, vamos considerar níveis discretos e imaginar um caso geral para um nível com energia E_t e concentração N_t que corresponda à transição do estado de carga A (mais positivo) para o estado de carga B (mais negativo) de um dado defeito: a concentração destes defeitos que estarão no estado de carga B será dada por

$$[B] = \int_{E_v}^{E_c} D(E') f(E', E_f) dE' = N_t \int_{E_v}^{E_c} \delta(E' - E_t) f(E', E_f) dE' = N_t f(E_t, E_f). \quad (\text{B.7})$$

Aqui vale a pena fazer um pequeno comentário. Para se obter de forma mais precisa [B], é necessário usar a expressão mais completa para a distribuição de Fermi-Dirac (considerando as degenerescências dos dois estados de carga do defeito g_A e g_B)

$$f(E, E_f) = \frac{1}{1 + \frac{g_A}{g_B} e^{\frac{E - E_f}{kT}}}. \text{ Como, no entanto, não temos os valores de } g_A \text{ e } g_B, \text{ adotaremos}$$

a aproximação mais simples:

$$[B] = \frac{N_t}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{kT}}}. \quad (\text{B.8})$$

Desta forma, teremos:

$$[A] = N_t - [B] = N_t \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{kT}}} \right). \quad (\text{B.9})$$

Da forma análoga, para um defeito que introduza dois níveis na banda proibida (com três possíveis estados de carga: A (o mais positivo), B e C (o mais negativo)) com energias E_{t1} (A/B) e E_{t2} (B/C), teremos:

$$[C] = N_t \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{E_{t1} - E_f}{kT}}} \right) \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{E_{t2} - E_f}{kT}}} \right) \quad (\text{B.10})$$

$$[B] = N_t \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{E_{t1} - E_f}{kT}}} \right) - [C] \quad (\text{B.11})$$

[C.3] Propriedades básicas do GaAs. Disponível em: <

<http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/basic.html> >. Acesso em: 6 ago. 2003.

$$[A] = N_v - [B] - [C] \quad (\text{B.12})$$

O cálculo em si, então, baseia-se na consideração de neutralidade de carga. Estimando a carga total correspondente aos portadores livres e aos estados profundos e igualando-a a zero, teremos uma relação para determinar a posição do nível de Fermi correspondente à dada configuração. Esta relação pode facilmente ser resolvida numericamente, e, uma vez determinada a posição do nível de Fermi, as relações acima nos proverão a concentração de portadores livres e de centros ionizados.

O programa abaixo realiza este cálculo para o caso particular de uma amostra com dopantes *tipo-p* e *tipo-n* (transições 0/- e +/-) e com dois defeitos que introduzem um nível profundo (um deles introduz um nível para a transição 0/-, e o outro, para a transição +/-).

```
// Programa nivel_Fermi.cpp
// calcula o nivel de Fermi, as concentrações de lacunas,
// elétrons e centros ionizados.
// Artur Vicente Pfeifer Coelho

// Algumas constantes
#define k 1.380658E-23
#define elt 1.602177E-19
#define E0 8.854187817E-12
#define eps 12.9
#define Pi 3.141592654
#define meffl .5738915700e-31
#define mefflc .4776223544e-30
#define Temp 300
#define hpl .6626073751E-33
#define Ev 0

// usaremos o io do C++
#include <math.h>
#include <fstream.h>
#include <iostream.h>

//Variáveis globais e ctes que precisam ser calculadas
const long double p0 = 4*powl(2*Pi*mefflc*k*Temp/powl(hpl,2),(double)3/2);
const long double n0 = 4*powl(2*Pi*meffl*k*Temp/powl(hpl,2),(double)3/2);
const long double kT = k*Temp;
const long double Ec = 1.424*elt;
const long double Ea = 0.05*elt;
const long double Ed = (1.424 - 0.05)*elt;
const long double Et_el = (1.424 - 0.3)*elt;
const long double Et_lc = (1.424 - 0.3)*elt;

long double glob_Na,glob_Nd,glob_Nt_el,glob_Nt_lc,glob_Ei,glob_xi,glob_xi1,
glob_rohi,glob_ni;

// Funções para cálculo de concentrações
long double c_p (long double Ef)
{
return p0*(1-1/(1 + exp((double)(Ev-Ef)/kT)));
```

```

}

long double c_n (long double Ef)
{
return n0/(1+exp((double)(Ec-Ef)/kT));
}

long double Naneg(long double Ef, long double Nax)
{
return Nax/(1+exp((double)(Ea-Ef)/kT));
}

long double Ndpos(long double Ef, long double Ndx)
{
return Ndx*(1 - 1/(1+exp((double)(Ed-Ef)/kT)));
}

long double Armd_el(long double Ef, long double N_ar_el)
{
return N_ar_el/(1+exp((double)(Et_el - Ef)/kT));
}

long double Armd_lc(long double Ef, long double N_ar_lc)
{
return N_ar_lc*(1-1/(1+exp((double)(Et_lc - Ef)/kT)));
}

// Implementação do método de Newton:
// O intervalo entre min_Val e max_Val (dominio) deve ter apenas uma
// solução para a função passada como ponteiro.
// min_val deve ser diferente de 0!!!!
long double Newton_Method (long double (*funcao)(long double),long double max_val,long
double min_val, long double* precisao)
{
long double blabla,potenc,bla2;
char sinal, sinal2, casa;
blabla = funcao(min_val);
if (blabla>0) sinal = 1;
if (blabla<0) sinal = -1;
if (blabla==0) return min_val;
potenc = 10;
for (casa=0;casa< *precisao+2;casa++)
{
sinal2=sinal;
bla2 = min_val;
while (sinal2 == sinal)
{
min_val=bla2;
bla2 = min_val + min_val/ potenc;
blabla = funcao(bla2);
if (blabla>0) sinal2 = 1;
if (blabla<0) sinal2 = -1;
if (blabla==0) return min_val;
if (min_val >= max_val) sinal2 =2;
}
potenc=potenc*10;
}
}

```

```

    }
    if (min_val >= max_val) *precisao=0;
    return min_val;
}

// A função que devolve o total de cargas calculado
// para um dado valor de Ef
long double chute(long double Fermi)
{
    return - c_n(Fermi) + c_p(Fermi) - Naneg(Fermi, glob_Na) +
    Ndpos(Fermi, glob_Nd) + Armd_lc(Fermi, glob_Nt_lc) -
    Armd_el(Fermi, glob_Nt_el);
}

//corpo principal
int main()
{
    long double nivel_fermi, p, testando;

    glob_Nd = 0;
    glob_Na = 1e22;
    glob_Nt_el = 0;
    glob_Nt_lc = 0;

    testando = 10;
    nivel_fermi = Newton_Method(chute, Ec, 0.01*elt, &testando);
    p = c_p(nivel_fermi);
    cout << "p = " << p << "\n" << "Ef - Ev = " << nivel_fermi/elt << "\n";
    cout << "N ion = " << Naneg(nivel_fermi, glob_Na) +
    Armd_lc(nivel_fermi, glob_Nt_lc) + Armd_el(nivel_fermi, glob_Nt_el)
    + Ndpos(nivel_fermi, glob_Nd);
    cout << "\n" << "n = " << c_n(nivel_fermi);
    return 1;
}

```

O próximo passo é estimar a resistência de folha das amostras. Para tanto, porém, um breve comentário sobre a mobilidade dos portadores deve ser feito.

Definida como o termo de fricção na equação de movimento dos portadores de carga livres submetidos a um campo elétrico \mathbf{E} ($\mathbf{v} = \mu\mathbf{E}$ para o caso isotrópico), a mobilidade é um dos parâmetros de crucial importância na caracterização de um semiconductor. Seu valor pode ser calculado a partir das possíveis formas de espalhamento às quais os portadores estão sujeitos no dado material (por fônons, defeitos pontuais da rede, deslocções, etc ...). Cada uma destas contribuições possui um tempo de relaxação $\tau(\mathbf{k})$ (intervalo de tempo entre colisões para um portador com vetor de onda \mathbf{k})

característico, onde o tempo total de relaxação $\tau_{total}(\mathbf{k})$ é dado por ^[C.4] $\frac{1}{\tau_{total}(\bar{k})} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(\bar{k})}$,

sendo a mobilidade μ é calculada como $\mu = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*}$ e $\langle \tau \rangle = \frac{\int \tau E^{3/2} f(E) dE}{\int E^{3/2} f(E) dE}$.

Este panorama é especialmente importante aqui porque a condutividade de um semiconductor é dada por $\sigma = en\mu_n + ep\mu_p$, e, conseqüentemente, $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{en\mu_n + ep\mu_p}$.

Como pretendemos estimar a resistência de folha (dada por ρ/l , l sendo a espessura da camada) de amostras de GaAs para diversas doses da implantação de isolamento, teremos que, de alguma forma, calcular μ_p e μ_n para cada caso. Desta forma, estamos especialmente interessados na contribuição do espalhamento por centros de carga carregados. Esta contribuição foi previamente calculada ^[C.4], e o seu tempo de relaxação específico é dado

por $\frac{1}{\tau(E)} = \frac{\pi N_{ion} Z^2 e^4}{\varepsilon^2 (2m^*)^{1/2} E^{3/2}} \ln \left[1 + \frac{\varepsilon^2 E^2}{Z^2 e^4} \left(\frac{1}{N_{ion}} \right)^{2/3} \right]$, onde N_{ion} é a concentração de centros

carregados e Z é a carga destes centros. Assim, desprezando o termo no logaritmo, a mobilidade dependerá do inverso de $N_{ion} Z^2$.

Para levar em conta também as demais contribuições, utilizaremos fórmulas empíricas retiradas da referência ^[C.5]:

$$\mu_n = 92 \left(\frac{T}{300} \right)^{-0.57} + \frac{1268 \left(\frac{T}{300} \right)^{-2.33}}{1 + \left(\frac{N_{ion}}{1.3 \times 10^{17} \left(\frac{T}{300} \right)^{2.4}} \right)^{0.91 \left(\frac{T}{300} \right)^{-0.146}}} \quad (B.13)$$

$$\mu_p = 54.3 \left(\frac{T}{300} \right)^{-0.57} + \frac{406.9 \left(\frac{T}{300} \right)^{-2.23}}{1 + \left(\frac{N_{ion}}{2.35 \times 10^{17} \left(\frac{T}{300} \right)^{2.4}} \right)^{0.91 \left(\frac{T}{300} \right)^{-0.146}}} \quad (B.14)$$

[C.4] BOURGOIN, J.; LANNON, M. *Point defects in semiconductors II: experimental aspects*. Berlin: Springer-Verlag, 1983.

[C.5] SCHRODER, D. K. *Semiconductor material and device characterization*. New York: John Wiley, 1998.

Estas relações foram obtidas considerando-se que a carga dos centros espalhadores é ± 1 . Assim, para considerar os demais centros e tendo em vista a discussão acima, usaremos $N_{ion} \rightarrow Z^2 N_{ion}$ nestas fórmulas.

Feito este primeiro comentário, podemos passar a analisar as aproximações que utilizaremos no desenvolvimento do cálculo que segue. Como estaremos apenas interessados na parte da curva R_s x dose anterior (para doses menores) à verificação do efeito *hopping*, vamos considerar o caso simples de dois resistores em paralelo como mostrado na Figura B.1.

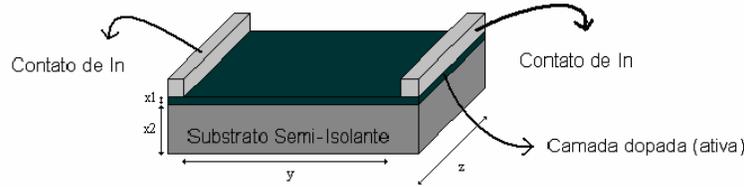


Figura B.1 Descrição geométrica adotada.

O primeiro resistor terá $R_1 = \frac{\rho_1 y}{z x_1}$, e o segundo, $R_2 = \frac{\rho_2 y}{z x_2}$. Assim:

$$R_{total} = \frac{\rho_{total} y}{z x_{total}} = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} = \frac{y}{z} \frac{\rho_1 \rho_2}{x_1 x_2 \left(\frac{\rho_1}{x_1} + \frac{\rho_2}{x_2} \right)} \quad (B.15)$$

$$\rightarrow R_{s,total} \equiv \frac{\rho_{total}}{x_{total}} = \frac{R_{s,1} R_{s,2}}{R_{s,1} + R_{s,2}}$$

A resistência de folha de amostras de GaAs semi-isolante é estimada em torno de $R_{s,2} \approx 2 \times 10^9 \Omega/\square$. Já $R_{s,1}$ é estimada usando a relação $R_{s,1} \equiv \frac{\rho_1}{x_1} = \frac{1}{x_1} \frac{1}{ne\mu_n + pe\mu_p}$. O

programa que segue abaixo considera os dados iniciais passados por um arquivo de entrada e calcula a curva R_s x dose, gravando os resultados em um arquivo de saída. O formato do arquivo de entrada é o seguinte: a primeira linha deve conter apenas o número de diferentes níveis presentes na amostra; a segunda linha indica a profundidade da camada ativa (em cm); a terceira linha indica a dose inicial, a dose final e a variação em dose que serão utilizados (todos estes valores expressos em cm^{-2} e separados por espaços ou tabulação); todas as demais linhas descreverão os níveis propriamente ditos. Cada uma delas trará informação sobre um único nível e será dividida em cinco colunas: $E_t - E_v$ (eV), concentração inicial (antes das implantações) do nível (cm^{-3}), taxa de introdução (cm^{-1}), estado de carga correspondente ao nível sem o elétron (mais positivo) e um número que

indicará se este nível pertence a um mesmo defeito que um nível anterior ou não. Note que a mesma taxa de introdução será utilizada para todas as doses. Quanto ao último parâmetro, o que diz se o nível corresponde ao mesmo defeito que outro nível, se o defeito em consideração possuir apenas um nível, o valor 0 deve ser adotado. Se não (o programa em questão suporta apenas 2 níveis por defeito porque não precisávamos mais do que isto; porém pequenas modificações podem ser feitas no mesmo para eliminar esta limitação), o nível que corresponda ao estado de carga mais positivo quando vazio deve ser inserido primeiro no arquivo e o valor 0 deve ser adotado como quinto parâmetro. Exatamente na próxima linha, deve ser descrito o outro nível, e deve-se adotar o valor 1 para seu quinto parâmetro. Um exemplo de arquivo de entrada é mostrado logo após o programa.

```
//-----
//Programa Sim_Rs.cpp
//Simula a curva Rs x dose para os parametros passados
//como entrada.
//Forma de execução:
//Sim_rs arquivo_de_entrada arquivo_de_saída
//-----

// Definições e includes
#define k 1.380658E-23
#define elt 1.602177E-19
#define E0 8.854187817E-12
#define eps 12.9
#define Pi 3.141592654
#define meffcl .5738915700e-31
#define mefflc .4776223544e-30
#define Temp 300
#define hpl .6626073751E-33
#define Ev 0

#include <math.h>
#include <fstream.h>
#include <iostream.h>

// Constantes
const long double p0 = 4*powl(2*Pi*mefflc*k*Temp/powl(hpl,2),(double)3/2);
const long double n0 = 4*powl(2*Pi*meffcl*k*Temp/powl(hpl,2),(double)3/2);
const long double kT = k*Temp;
const long double Ec = 1.424*elt;

//Variáveis globais
//Alocação dinâmica deveria ser utilizada.
//No entanto, devido a limitações no compilador utilizado
//por mim, fui forçado a adotar a alocação estática.
int multiplo[100],numero;
long double Energias[100],carga_vazio[100],Nt[100];

//Funções para cálculo das concentrações de portadores
//livres.
long double c_p (long double Ef)
```

```

{
return p0*(1-1/(1 + exp((double)(Ev-Ef)/kT)));
}

long double c_n (long double Ef)
{
return n0/(1+exp((double)(Ec-Ef)/kT));
}

// Implementação do método de Newton:
// O intervalo entre min_Val e max_Val (dominio) deve ter apenas uma
// solução para a função passada como ponteiro.
// min_val deve ser diferente de 0!!!!
double min_Val, long double (*funcao)(long double),long double max_val,long
double min_val, long double* precisao)
{
long double blabla,potenc,bla2;
char sinal, sinal2, casa;
blabla = funcao(min_val);
if (blabla>0) sinal = 1;
if (blabla<0) sinal = -1;
if (blabla==0) return min_val;
potenc = 10;
for (casa=0;casa< *precisao+2;casa++)
{
sinal2=sinal;
bla2 = min_val;
while (sinal2 == sinal)
{
min_val=bla2;
bla2 = min_val + min_val/ potenc;
blabla = funcao(bla2);
if (blabla>0) sinal2 = 1;
if (blabla<0) sinal2 = -1;
if (blabla==0) return min_val;
if (min_val >= max_val) sinal2 =2;
}
potenc=potenc*10;
}
if (min_val>= max_val) *precisao=0;
return min_val;
}

//Função que calcula a carga total para um dado valor do
//nível de Fermi.
long double chute(long double Fermi)
{
long double cargas=0, distrib;
int ii;
for (ii=0;ii<numero;ii++)
{
distrib = 1 /(1+exp((long double)(Energias[ii] - Fermi)/kT));

//Eh um segundo nível de um mesmo defeito?

```

```

if (multiplo[ii])
//-sim
{
//note que este cálculo vale apenas para o segundo
//nível do mesmo defeito.
//Para considerarmos mais níveis, o valor de distrib em
//ii-1 deveria ter sido guardado e teríamos:
//distrib = distrib_guardado/(1+exp...)
distrib = distrib / (1+exp((long double)(Energias[ii-1] - Fermi)/kT));
//note que o primeiro nível deste defeito já teve
//suas cargas, qdo vazio e qdo cheio, consideradas.
//Assim, basta subtrair a concentração deste novo nível
//que está cheia.
cargas += -Nt[ii]*distrib;
}
//-não
else
{
cargas += Nt[ii]*(carga_vazio[ii]*(1-distrib) + (carga_vazio[ii]-1)*distrib);
}
}

return cargas - c_n (Fermi) + c_p(Fermi);
}

//Cálculo das mobilidades
long double mobilidade_p(long double Fermi)
{
long double ionizados = 0,distrib;
long double T_mu_min = powl((long double)Temp/300,-0.57);
long double T_mu_0_p = powl((long double)Temp/300,-2.23);
long double T_Nref = powl((long double)Temp/300,2.4);
long double T_alpha = powl((long double)Temp/300,-0.146);
int ii;
for (ii=numero-1;ii>-1;ii--)
{
distrib = 1 / (1+exp((double)(Energias[ii] - Fermi)/kT));
if (multiplo[ii])
{
//novamente soh vamos considerar 2 níveis por defeito
distrib = distrib*1 / (1+exp((double)(Energias[ii-1] - Fermi)/kT));
//Tb soh são considerados estados de carga até +/-2
//Pequenas modificações devem ser feitas para se
//considerar mais estados de carga.
ionizados += Nt[ii]*distrib* ((carga_vazio[ii]-1)*(carga_vazio[ii]-1)- (carga_vazio[ii-1]*carga_vazio[ii-1]>3));
}
else
{
ionizados += Nt[ii]*(carga_vazio[ii]*carga_vazio[ii]-
(carga_vazio[ii]*carga_vazio[ii]>3))*(1-distrib);
ionizados += Nt[ii]*distrib* ((carga_vazio[ii]-1)*(carga_vazio[ii]-1)- (carga_vazio[ii-1]*carga_vazio[ii-1]>3));
}
}
}

```

```

    }
    return 54.3*T_mu_min +
406.9*T_mu_0_p/(1+powl(ionizados/(2.35e23*T_Nref),0.91*T_alpha));

}

long double mobilidade_n(long double Fermi)
{
    long double ionizados=0,distrib;
    long double T_mu_min = powl((long double)Temp/300,-0.57);
    long double T_mu_0_n = powl((long double)Temp/300,-2.33);
    long double T_Nref = powl((long double)Temp/300,2.4);
    long double T_alpha = powl((long double)Temp/300,-0.146);
    int ii;
    for (ii=numero-1;ii>-1;ii--)
    {
        distrib = 1/(1+exp((double)(Energias[ii] - Fermi)/kT));
        if (multiplo[ii])
        {
            distrib = distrib*1/(1+exp((double)(Energias[ii-1] - Fermi)/kT));
            ionizados += Nt[ii]*distrib* ((carga_vazio[ii]-1)*(carga_vazio[ii]-1)- (carga_vazio[ii-1]*carga_vazio[ii-1]>3));
        }
        else
        {
            ionizados += Nt[ii]*(carga_vazio[ii]*carga_vazio[ii]- (carga_vazio[ii]*carga_vazio[ii]>3))*(1-distrib);
            ionizados += Nt[ii]*distrib* ((carga_vazio[ii]-1)*(carga_vazio[ii]-1)- (carga_vazio[ii-1]*carga_vazio[ii-1]>3));
        }
    }

    return 92*T_mu_min + 1268*T_mu_0_n/(1+powl(ionizados/(1.3e23*T_Nref),0.91*T_alpha));
}

```

```

// corpo principal
void main (int argc, char * argv[])
{
    long double nivel_fermi, Rs, testando,prof_camada,ttt,Nt0[100],taxa_int[100];
    long double Dose_inicial, Dose_final, Dose_passo;
    int bla;
    fstream arquivo;
    if (argc!=3)
    {
        cout << "sim_rs_dos arquivo_entrada arquivo_saida";
    }
    else
    {
        for (bla=0;bla<100;bla++)
        {
            Nt0[bla] = 0;
            taxa_int[bla]=0;
        }
    }
}

```

```

Nt[bla]=0;
Energias[bla]=0;
carga_vazio[bla]=0;
}
arquivo.open(argv[1],ios::in);
arquivo >> numero;
arquivo >> prof_camada;
arquivo >> Dose_inicial;
arquivo >> Dose_final;
arquivo >> Dose_passo;
bla = 0;
while (arquivo.eof() == 0)
{
arquivo >> Energias[bla];
Energias [bla]*=elt;
arquivo >> Nt0[bla];
Nt0[bla]*=(long double)1e6;
arquivo >> taxa_int[bla];
arquivo >> carga_vazio[bla];
arquivo >> multiplo[bla];
bla++;
}
arquivo.close();

arquivo.open(argv[2],ios::out|ios::trunc);
arquivo << "Dose" << " " << "Nivel_Fermi" << " " << "cn" << " " << "cp" << " " <<
"Rs" << "\n";
for (ttt=Dose_inicial;ttt<=Dose_final;ttt+=Dose_passo)
{

for (bla=0;bla<numero;bla++)
{
Nt[bla] = Nt0[bla] + taxa_int[bla]*ttt*1e6;
}
testando = 13;
nivel_fermi =Newton_Method(chute,Ec,0.01*elt,&testando);
if (testando!=13) cout <<"Erro";
Rs = 1/((c_n (nivel_fermi)/1e6)*elt*mobilidade_n(nivel_fermi) +
(c_p(nivel_fermi)/1e6)*elt*mobilidade_p(nivel_fermi));
Rs = (Rs/prof_camada)*2e9/(Rs/prof_camada +2e9);
arquivo << ttt << " " << nivel_fermi/elt << " " << c_n(nivel_fermi)/1e6
<< " " << c_p(nivel_fermi)/1e6 << " " << Rs;
arquivo << "\n";
}

arquivo.close();
}
}

```

Arquivo de entrada exemplo:

12				
2e-4				
1e10	3e13	5e9		
4.418	1e16	0	1	0
1.284	0	962	1	0
1.379	0	962	0	1
0.604	2.5e13	46	1	0
0.624	0	173	1	0
0.754	0	436	2	0
1.124	0	481	1	1
1.034	0	24	1	0
0.64	0	855	0	0
0.42	1.35e14	761	0	0
0.29	0	204	0	0
0.06	0	482	0	0

Para concluir, é necessário salientar que estes cálculos utilizam distribuições de equilíbrio de Fermi-Dirac, conservação de carga, taxas de introdução que não variam com a dose implantada ou com a concentração de portadores livres, consideram no máximo dois níveis por defeito (o que pode ser facilmente alterado), estados de carga na região -2 até 2 previamente estimados e níveis discretos. Conseqüentemente, se estes requisitos não forem atendidos, o cálculo levará a resultados errôneos.

APÊNDICE C: SIMULAÇÃO DOS ESPECTROS DLTS

Nesta secção, serão apresentados os cálculos necessários para a simulação de espectros DLTS de janelas de taxa de emissão (cálculos bastante semelhantes podem ser utilizados em simulações de outros tipos de DLTS) e os programas usados para obter os resultados apresentados nesta dissertação. Iremos considerar, no texto que segue, o caso de centros de captura de majoritários em amostras *tipo-n*.

Vamos partir das expressões (3.4) e (3.33) obtidas no capítulo 3:

$$\frac{dn_t}{dt} = (c_n + e_p)(N_t - n_t) - (e_n + c_p)n_t \quad (3.4)$$

$$|V_{bi}| + |V_{rev}| = V = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \int_0^{x_d} x\rho(x)dx \quad (3.33)$$

Para profundidades menores que x_d (dentro da zona de depleção), podemos aproximar $n, p \approx 0 \rightarrow c_n, c_p \approx 0$ e, como estamos medindo centros de captura de majoritários em *tipo-n*, $e_n \gg e_p$, de forma que teremos, a partir de (3.4):

$$\frac{dn_t}{dt} = -e_n n_t \rightarrow n_t(t) = n_t(0)e^{-e_n t} \quad (C.1)$$

Usaremos esta relação mais adiante. Agora, empregando a relação 3.33 e tendo a descrição ilustrada na Figura 3.9 em mente, vamos chegar à relação que será usada para determinar x_d :

$$V = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left[N^+ \int_0^{x_d} xdx + \sum_i \left\{ N_t^i \int_0^{x_0 - \lambda^i} xdx + (N_t^i - n_t^i(t)) \int_{x_0 - \lambda^i}^{x_d - \lambda^i} xdx \right\} \right] =$$

$$= \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \left[N^+ \frac{x_d^2}{2} + \sum_i \left\{ N_t^i \left(\frac{x_0^2 - 2x_0\lambda^i + (\lambda^i)^2}{2} \right) + (N_t^i - n_t^i(t)) \left(\frac{x_d^2 - 2\lambda^i x_d + (\lambda^i)^2 - x_0^2 + 2\lambda^i x_0 - (\lambda^i)^2}{2} \right) \right\} \right]$$

onde N_t^i , n_t^i e λ^i são respectivamente a concentração total do nível i , a concentração de níveis i cheios e a distância entre x_d e a profundidade em que E_t^i cruza E_{fe} . Assim como no capítulo 3, N^+ é dado por $N^+ = N_d - N_a + N_t^{cte} + \sum_i N_{ti}^*$ (N_t^{cte} é a soma das concentrações

de cada centro de captura de minoritários multiplicada pelo devido estado de carga do defeito associado a este centro de captura quando ele está cheio mais a soma das concentrações de cada centro de captura de majoritários cuja energia $E_t(x_d)$ seja maior que E_{fe} multiplicada também pelo devido estado de carga do defeito associado quando o nível está, desta vez, vazio. $N_{ti}^*(x_d)$ corresponde à concentração do i -ésimo centro de captura de

majoritários com $E_t(x_d) < E_{fe}$ multiplicada pelo estado de carga de seu correspondente defeito quando o nível está cheio).

Ou seja, temos que resolver uma simples equação de segundo grau do tipo $Ax_d^2 - Bx_d + C = 0$ para calcular x_d . Os valores de A, B e C são dados por:

$$A = \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0} \left(N^+ + \sum_i (N_t^i - n_t^i(t)) \right) \quad (C.2)$$

$$B = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \sum_i [(N_t^i - n_t^i(t))\lambda^i] \quad (C.3)$$

$$C = -V + \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0} \left[\sum_i \left\{ N_t^i (x_0^2 - 2x_0\lambda^i + (\lambda^i)^2) + (N_t^i - n_t^i(t)) (-x_0^2 + 2\lambda^i x_0) \right\} \right] \quad (C.4)$$

Note-se que, neste caso, V_{rev} é negativo, mas V é positivo. Os valores de λ^i podem ser obtidos com a fórmula 3.68:

$$\lambda^i = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{e^2 N_d} (E_{fe} - E_t^i)} = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{e^2 N_d} \frac{E_{fe} - E_c + E_c - E_t^i}{kT}} \quad (C.5)$$

Nesta expressão, aproximaremos $E_c - E_t \approx E_{na}$ e calcularemos $E_{fe} - E_c$ através de:

$$n = N_c e^{\frac{E_{fe} - E_c}{kT}} \rightarrow E_{fe} - E_c = kT \ln \left(\frac{n}{N_c} \right) \quad (C.6)$$

Os únicos valores desconhecidos são os n_t^i . No entanto, estes podem ser calculados usando a relação C.1 com $n_t(0) = N_t$ e e_n dado por:

$$e_n^i(T) = \gamma_n T^2 \sigma_{na}^i e^{-\frac{E_{na}^i}{kT}} \quad (C.7)$$

Desta forma, podemos simplesmente calcular x_d através de:

$$x_d(t) = \frac{B(t) + \sqrt{B(t)^2 - 4A(t)C(t)}}{2A(t)} \quad (C.8)$$

Note-se que a outra possível solução não é física porque leva a valores negativos de $x_d(t)$.

Uma vez calculada $x_d(t)$, a capacitância medida a alta frequência pode ser facilmente obtida através da relação 3.48: $C(t) = \varepsilon\varepsilon_0 \frac{A}{x_d(t)}$. Com a curva $C \times t$ calculada, o

sinal DLTS pode ser obtido facilmente para qualquer função peso desejada. No atual trabalho, utilizamos uma função degrau (a exemplo do que foi feito experimentalmente). O programa completo para a obtenção do espectro DLTS de centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-n* segue abaixo. O arquivo de entrada deve ser construído da seguinte forma: a primeira linha deve conter apenas o número de níveis que serão simulados; a segunda linha deve indicar o valor de tensão reversa utilizada (para obter os valores de capacitância medidos experimentalmente, o valor de 6,646 V foi utilizado); a terceira linha deve conter a concentração de dopantes (cm^{-3}); a quarta linha, o valor de x_0 (em cm); e as linhas que seguem devem descrever cada nível. Estas linhas são divididas em três colunas: a primeira indicando a concentração N_t^i do nível, a segunda, a energia aparente E_{na}^i e a terceira, a seção de choque aparente de captura de elétrons σ_{na}^i para o correspondente nível.

```
//-----
//Programa Sim_DLTS_n.cpp
//Simula o espectro DLTS que seria observado a partir
//dos dados passados pelo arquivo de entrada.
//Sintaxe: Sim_DLTS_n arquivo_entrada arquivo_saída
//-----

// Definições e includes
#include <iostream.h>
#include <fstream.h>
#include <math.h>
#define Ep 13.1
#define E0 8.85418e-14
#define ee 1.60218e-19
#define gama_n 2.3e20
#define gama_p 1.7e21
#define kk 8.617385e-5
#define Area 0.0050265
#define tamanho 5000
#define Nc 4.7e17
#define Nv 7e18
#define fator 3.607843137

//Rotina de integração
long double integra(long double v_inic, long double v_final, long double *numer, long double
*prof)
{
    long double antes, depois, integral, deltax, deltay;
    int t, cc;

    if (v_inic < prof[0]) v_inic = prof[0];
    integral=0;

    //achando o começo
    for (t=1; t<tamanho;t++)
```

```

    {
        if (v_inic < prof[t])break;
    }

    //se o começo for o fim: integral=0
    if (t < tamanho)
    {

        //calculando o primeiro ponto
        deltax = prof[t] - prof[t-1];
        deltay = numer[t] - numer[t-1];
        integral = (numer[t-1] + deltay*(v_inic - prof[t-1])/deltax)*(prof[t]
- v_inic) + (prof[t] - v_inic)*(deltay*(prof[t] - v_inic)/deltax)/2;
        for (cc=t;cc<tamanho -1;cc++)
        {
            if (prof[cc+1] > v_final)
            {
                deltax = prof[cc+1] - prof[cc];
                deltay = numer[cc+1] - numer[cc];
                integral += numer[cc]*(v_final - prof[cc]) + deltay*((v_final -
prof[cc])/deltax)*(v_final - prof[cc])/2;
                break;
            }
            deltax = prof[cc+1] - prof[cc];
            deltay = numer[cc+1] - numer[cc];
            integral += numer[cc]*deltax + deltay*deltax/2;
        }
    }

    return integral;
}

```

```

// Corpo principal
void main (int argc, char * argv[])
{
    int tt,ll,picos;
    long double numer[tamanho], prof[tamanho];
    long double V, Nd,N_mais, *Nt,*lambda,*nt, v_A,v_B,v_C,*Ena,*sig_na;
    long double x0, xd,T,ii,*en, Cap,Sinal_DLTS,Ef_Ec;
    //tipo-p: long double V, Na,N_mais, Nt[picos],lambda[picos],nt[picos],
    //v_A,v_B,v_C,Ena[picos],sig_na[picos];
    //long double x0, xd,T,ii,en[picos], Cap,Sinal_DLTS,Ev_Ef;

    fstream arquivo;
    if (argc!=3)
    {
        cout << "Sim_DLTS_n arquivo_entrada arquivo_saida";
    }
    else
    {
        arquivo.open(argv[1],ios::in);
        arquivo >> picos;
        arquivo >> V;
    }
}

```

```

arquivo >> Nd;
//tipo-p: arquivo >> Na;
arquivo >> x0;
Nt = new long double [picos];
lambda = new long double [picos];
nt = new long double [picos];
en = new long double [picos];
Ena = new long double [picos];
sig_na = new long double [picos];
for (tt=0;tt<picos;tt++)
{
arquivo >> Nt[tt];
arquivo >> Ena [tt];
arquivo >> sig_na[tt];
}
arquivo.close();
//Como Nt<<Nd, vamos aproximar N+=Nd
N_mais = Nd;
//tipo-p:N_mais = Na;
arquivo.open(argv[2],ios::out|ios::trunc);
arquivo << "T Sinal_Dlts \n";
for (T = 70;T<370;T++)
{
// cálculo dos lambdas e das taxas de emissão
Ef_Ec = kk*T*logl(Nd/Nc);
// tipo-p: Ev_Ef = kk*T*logl(Na/Nv);
for (tt=0;tt<picos;tt++)
{
en[tt] = gama_n*T*T*sig_na[tt]*exp(-Ena[tt]/(kk*T));
lambda[tt] = sqrtl(2*Ep*E0*(Ena[tt]+Ef_Ec)/(ee*Nd));
//tipo-p: en[tt] = gama_p*T*T*sig_na[tt]*exp(-Ena[tt]/(kk*T));
//lambda[tt] = sqrtl(2*Ep*E0*(Ena[tt]+Ev_Ef)/(ee*Na));
}
for (tt=0; tt<tamanho; tt++)
{
ii = (double)tt/1000;
v_A = N_mais*ee/(2*Ep*E0);
v_B = 0;
v_C = - V;
for (ll=0;ll<picos;ll++)
{
nt[ll] = Nt[ll] *exp(-en[ll]*ii);
v_A += (Nt[ll] - nt[ll])*ee/(2*Ep*E0);
v_B += lambda[ll]*(Nt[ll]-nt[ll])*ee/(Ep*E0);
v_C += ee*(Nt[ll]*(x0*x0-2*lambda[ll]*x0+lambda[ll]*lambda[ll]) + (Nt[ll] -
nt[ll])*(-x0*x0+2*x0*lambda[ll]))/(2*Ep*E0);
}
xd=(v_B + sqrtl(v_B*v_B - 4*v_A*v_C))/(2*v_A);
Cap = 1e12*Ep*E0*Area/xd;
numer[tt] = Cap;
prof[tt] = ii;
}
Sinal_DLTS = (- integra (0,1.28,numer,prof) + integra (1.28,2.56,numer,prof))/2.56;
arquivo << T << " " << Sinal_DLTS << "\n";
}
arquivo.close();

```

```

delete [] Nt;
delete [] lambda;
delete [] nt;
delete [] en;
delete [] Ena;
delete [] sig_na;
}
}

```

Exemplo de arquivo de entrada:

```

5
6.646
1.5e16
4e-5
0.4798e14  0.3  8e-15
0.144e14  0.39  7e-14
0.436e14  0.67  2e-12
0.173e14  0.8  6e-12
0.296e14  0.82  2e-13

```

Note-se que o caso de centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-p* é completamente análogo (o valor de V para as simulações em GaAs *tipo-p* foi 3.423 V e $N_a = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). As pequenas modificações que devem ser feitas ao programa estão apresentadas como comentários. Esta simulação leva em conta E_{na} e não a energia correta $E_c - E_t$ (até porque, não tínhamos como fazer as medidas de secção de choque necessárias para a correção de E_{na}). Outro aspecto importante é que, neste programa, assumiu-se $N_{dop} \gg N_t$, de forma que $N^+ = N_{dop}$.

Um caso um pouco diferente surge quando temos mais de um nível correspondente ao mesmo defeito. Vamos considerar aqui dois centros de captura de majoritários em GaAs *tipo-n* (o caso para *tipo-p* é análogo a este) correspondentes a um mesmo defeito. Sejam os três possíveis estados de carga deste defeito A (mais positivo), B e C (mais negativo). Durante o pulso, os níveis são preenchidos, de forma que o defeito irá se encontrar no estado C ($[C] \approx N_t$). Após o pulso, a transição B/A só poderá ser observada para aqueles defeitos que já tiverem realizado a transição C/B. Assim, vamos chamar de nível 1 aquele correspondente à transição C/B e de 2 o da transição B/A. Para o nível 1, nada será alterado, e teremos:

$$n_{t,1}(t) = N_t e^{-e_{n,1}t} \quad (\text{C.9})$$

Já para o nível 2, teremos que reescrever C.1 da seguinte forma:

$$\frac{dn_{t,2}(t)}{dt} = -e_{n,2} \left(\{N_t - n_{t,1}(t)\} - \{N_t - n_{t,2}(t)\} \right) \quad (\text{C.10})$$

O primeiro termo no parênteses corresponde à concentração dos defeitos cujo nível 1 está vazio (ou seja, defeitos nos estados A ou B). O segundo termo corresponde à concentração dos defeitos que têm o nível 2 vazios (ou seja, estejam estado de carga A). Assim, o parênteses inteiro representa a concentração de defeitos no estado de carga B, ou

seja, os defeitos que têm o nível 2 cheio e estão livres para realizar a transição B/A. Reescrevendo a relação acima:

$$\frac{dn_{i,2}(t)}{dt} = -e_{n,2}n_{i,2} + e_{n,2}N_i e^{-e_{n,1}t} \quad (C.11)$$

$$\rightarrow n_{i,2}(t) = \frac{e_{n,1}}{e_{n,1} - e_{n,2}} N_i e^{-e_{n,2}t} + \frac{e_{n,2}}{e_{n,2} - e_{n,1}} N_i e^{-e_{n,1}t} \quad (C.12)$$

Note-se, no entanto, que, se os picos correspondentes a estes níveis estiverem bem separados em temperatura (ou seja, se $e_{n,1}$ e $e_{n,2}$ passam pelo valor correspondente à janela para temperaturas bem diferentes), para a temperatura correspondente ao pico do nível 2, teremos $e_{n,1} \gg e_{n,2}$, e a expressão acima poderá ser simplificada, voltando-se à usual relação:

$$n_{i,2}(t) = N_i e^{-e_{n,2}t} \quad (C.13)$$

O programa usado para fazer este cálculo é bastante semelhante ao programa Sim_DLTS_n.cpp, de forma que não o apresentaremos aqui.

Outro caso interessante é o de uma densidade de estados do tipo não delta. Para simular este caso, supomos que se possa considerar esta distribuição como uma soma de muitos estados discretos não correlacionados (o que pode ser uma aproximação bastante forte, mas serve para mostrar, ao menos do ponto de vista qualitativo, algumas das conseqüências desta descrição para o espectro DLTS). O mesmo programa (Sim_DLTS_n.cpp) pode, então, ser utilizado para calcular o espectro DLTS.