

УДК 535.42

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ В КРЕМНИИ

Р.Р. ВАРДАНЯН¹, В.К. ДАЛЛАКЯН¹, У. КЕРСТ², К. БОЙТ²

¹Государственный инженерный университет Армении, Ереван,

²Берлинский технический университет, Германия

(Поступила в редакцию 27 июля 2011 г.)

Проанализированы различные эмпирические модели поглощения света свободными носителями заряда в кремнии в инфракрасном и ближнем инфракрасном диапазонах. Разработана усовершенствованная модель поглощения свободными носителями в кремнии. Результаты получены для диапазона длин волн от 0.9 мкм до 6 мкм для кремния *n*-типа и от 0.9 мкм до 8 мкм для кремния *p*-типа. Новая модель оценена с помощью параметра R^2 и получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

1. Введение

Для анализа отказов интегральных схем, как с передней стороны, так и с обратной, в настоящее время широко используется метод термической лазерной стимуляции. Термическая лазерная стимуляция наблюдалась в кремниевых приборах при использовании лазерного источника на 1.3 мкм [1,2]; она была вызвана поглощением свободными носителями в сильно допированных областях. Лазер на 1.064 мкм используется при фотоэлектрической лазерной стимуляции; при этом лазер не только генерирует в кремнии электрон-дырочные пары, но и создает некоторые термические эффекты.

Для определения величины прореживания, необходимой для конкретного измерения при анализе отказов, необходимы зависимости коэффициентов поглощения от длины волны и плотности носителей [3]. Определение коэффициента поглощения в ИК и ближнем ИК диапазоне весьма важно также для создания оптоэлектронных приборов и моделирования поглощения свободных носителей в солнечных элементах [4].

В настоящей работе проведен анализ существующих моделей поглощения света в кремнии в ИК и ближнем ИК диапазонах и разработана новая модель поглощения свободными носителями.

2. Эмпирические модели поглощения

В коротковолновой части ближнего ИК диапазона имеет место эффект оптического поглощения с участием фононов, при котором генерируются элек-

тронно-дырочные пары. Поскольку кремний не является прямозонным материалом, переход из максимума валентной зоны в минимум зоны проводимости может иметь место лишь с помощью фононов [5]. Исследования S.E. Aw и др. [6] приводят к полуэмпирической формуле для коэффициента поглощения с участием фононов:

$$\begin{aligned} a^{1/2} &= k_{pa} (E_0 - E_{ph} - \Delta E(N)) \text{ при } E_{ph} > E_0 - \Delta E(N), \\ a &= 0 \text{ при } E_{ph} \leq E_0 - \Delta E(N), \end{aligned} \quad (1)$$

где k_{pa} – эмпирически определяемая константа, E_0 – энергия щели, E_{ph} – энергия фонона и $\Delta E(N)$ – сдвиг энергии, зависящий от концентрации примесей N . Постоянная k_{pa} равна $58 \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-1/2}$, а эмпирическое значение E_0 составляет 1.09 эВ . Сдвиг энергии щели, согласно [6], равен

$$\Delta E(N) = k_N N^{1/3},$$

где значение k_N равно $10^{-8} \text{ эВ}\cdot\text{см}$ как для n -, так и для p -примесей. Отметим, что ранее подобное выражение для коэффициента поглощения с участием фононов без сдвига энергии щели было получено в работе [7].

Основным эффектом оптического поглощения в допированном кремнии в ближней ИК области является поглощение свободными носителями заряда, которое непосредственно не генерирует электронно-дырочных пар [5]. В 1987 году Сореф и Беннет [8] исследовали экспериментально изученный электрооптический эффект в кремнии и нашли изменения показателя преломления и коэффициента оптического поглощения, обусловленные инжекцией/обеднением свободных носителей заряда. В этой работе была использована модель Друде для поглощения и соответствующие преобразования Крамерса–Кронига. Изменение вышеуказанных величин при инжекции и обеднении свободных носителей может быть вычислено с помощью значений концентраций электронов и дырок в структуре. Например, для 1.55 мкм в кремнии модель Сорефа дает выражение [9-11]

$$\Delta a = 8.8 \times 10^{-22} N_n + 8.5 \times 10^{-8} N_p^{0.8},$$

где Δa – изменение поглощения, а N_n и N_p – концентрации, соответственно, электронов и дырок.

В работе Сорефа и Беннета отмечалось, что коэффициент поглощения, предсказываемый этой моделью, занижен по сравнению с измеренным значением (рис.12-15 работы [8]). Однако, эта модель удобна для определения изменения показателя преломления и коэффициента оптического поглощения из-за инжекции/обеднения свободных носителей в кремниевых электрооптических приборах [12-16].

Широко используемая эмпирическая модель поглощения свободными носителями в кремнии дана Шредером и др. [17,18]:

$$a = \lambda^2 \left(10^{-18} N_n + 2.7 \times 10^{-18} N_p \right), \quad (2)$$

где коэффициент поглощения a измеряется в см^{-1} , концентрации N_n и N_p электронов и дырок – в см^{-3} , а длина волны λ – в мкм. Эта модель применима для больших длин волн ($\lambda \geq 5$ мкм).

Для длин волн вблизи щели существует модель Грина [19], основанная на анализе данных Шмида [20]:

$$a = \lambda^2 \left(2.6 \times 10^{-18} N_n \lambda + 2.7 \times 10^{-18} N_p \right), \quad (3)$$

где a измеряется в см^{-1} , λ – в мкм, а N_n и N_p – в см^{-3} .

ИК поглощение свободными носителями смоделировано также в работе [6] с использованием уравнения Друде:

$$a = \lambda^2 \left(3.5 \times 10^{-18} N_n \lambda + 3.3 \times 10^{-18} N_p \right). \quad (4)$$

С помощью этого уравнения можно определить [3] коэффициент поглощения на длинах волн, больших ~ 1.5 мкм, при которых поглощение в основном обусловлено безфотонным взаимодействием носителей.

Для того чтобы оценить вышеприведенные модели, определим коэффициенты поглощения в ИК диапазоне по формулам (2), (3) и (4) и сравним их с экспериментальными данными, приведенными в работе [8]. С этой целью переведем экспериментальные зависимости от энергии фотона в зависимости от длины волны. В качестве примера на рис.1 приведены экспериментальные кривые и расчетные модельные кривые для двух различных концентраций примесей.

Из рисунка видно, что имеет место некоторое расхождение экспериментальных данных по коэффициенту поглощения с построенными для различных моделей кривыми. В области малых длин волн разница между экспериментальными данными и вычислениями по модели Грина (3) меньше, чем между экспериментом и моделью S.E. Aw и др. (4). Для больших длин волн ситуация обратная: модель S.E. Aw и др. подгоняется под экспериментальные данные лучше, чем модель Грина. Можно также заключить, что в случае низких концентраций примеси и длин волн, больших чем 5 мкм, модель Шредера (2) лучше фитирует экспериментальные данные, чем остальные модели (рис.1а). Однако в случае больших концентраций примеси модель S.E. Aw и др. подходит лучше, чем модель Шредера (рис.1б).

Для кремния p -типа коэффициент поглощения, полученный по модели Грина и по модели S.E. Aw и др., также сравнивался с экспериментальными данными, приведенными в [8]. Для этого типа кремния также имеется некоторое расхождение между экспериментальными и теоретическими данными. Аналогичное расхождение экспериментальных данных с кривой, рассчитанной по модели Грина, получено Штумпфом при анализе данных [5]. Как отмечено в [3], для образца с концентрацией примеси бора в монокристаллическом крем-

нии, равной $5.5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (рис.6.2 работы [5]), для подгонки эмпирической кривой к измерениям число свободных носителей должно быть в 1.5 раза больше.

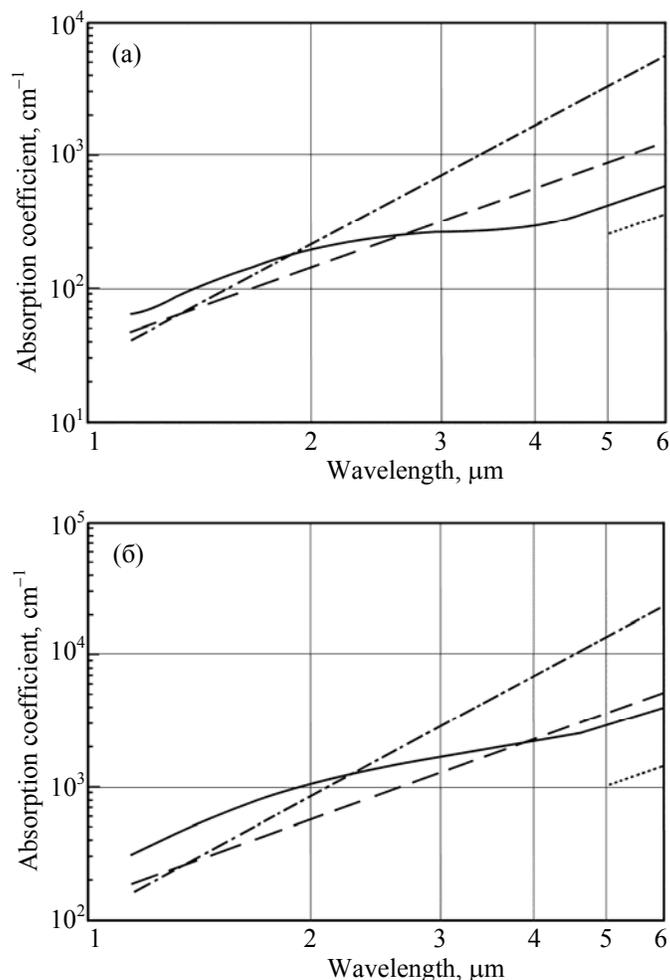


Рис.1. Сравнение экспериментальных данных (сплошная линия) по коэффициенту поглощения свободными носителями в кремнии *n*-типа с расчетными данными по эмпирическим моделям Шредера (точечная кривая), Грина (штрих-пунктирная кривая) и S.E. Aw и др. (пунктирная кривая). Экспериментальные данные и эмпирические зависимости построены для следующих концентраций примеси: (а) $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$; (б) $n = 4 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, имеются различные модели коэффициента поглощения свободными носителями в кремнии, применимые в различных областях ИК диапазона с различной степенью фитирования. С целью уменьшения расхождения между экспериментальными данными и эмпирической моделью мы развили новый подход к анализу экспериментальных данных и моделированию поглощения свободными носителями в кремнии.

3. Распределение интенсивности лазерного пучка в среде

Проанализируем математическую модель коэффициента поглощения света в ИК диапазоне, используя экспериментальные данные, приведенные Сорэфом и Беннетом для кремния n - и p -типа (рис.5 и 7 работы [8]). Рассмотрим область длин волн от 1.15 мкм до 6 мкм для кремния n -типа и от 1.15 мкм до 8 мкм для кремния p -типа. Вначале экспериментальные данные оцифровывались с помощью компьютерной программы “GetData Graph Digitizer” и определялись данные по коэффициентам поглощения. Далее в этих графиках энергия фотона переводилась в длину волны при помощи фактора 1.2398561 мкм/эВ. Эти экспериментальные данные интерполировались программой “MatLab” и были получены полиномы шестой степени. Для кремния n типа имеем

$$a_{ni}(\lambda) = A_i\lambda^6 + B_i\lambda^5 + C_i\lambda^4 + D_i\lambda^3 + E_i\lambda^2 + F_i\lambda + G_i, \quad (5)$$

где $a_{ni}(\lambda)$ – коэффициент поглощения в кремнии n -типа, а i – номер кривой с соответствующей концентрацией примеси; $i = 1, \dots, 7$. Коэффициенты A, B, C, D, E, F, G представлены в таблице.

Табл.1. Коэффициенты полинома (5).

Номер кривой	Концентрация примесей (см ⁻³)	A	B	C	D	E	F	G
1	3.2×10^{17}	0	0	-0.053928	1.0177	-6.752	19.019	-13.232
2	6×10^{18}	0.35701	-8.2592	74.773	-329.77	710.92	-608.74	167.9
3	10^{19}	0.77911	-18.467	171.53	-781.09	1789	-1809.3	699.91
4	2.4×10^{19}	1.9546	-45.884	422.21	-1893.7	4196.6	-3841	1238.6
5	2.8×10^{19}	0	0	-10.467	183.94	-1070.4	2805.3	-1909.5
6	3.2×10^{19}	0	0	-15.443	253.06	-1385.7	3448.4	-2315
7	4×10^{19}	0.79563	-22.235	237.9	-1205.7	2946.3	-2480.8	715.91

Полином (5) достаточно хорошо фитирует экспериментальную зависимость коэффициента поглощения от длины волны при заданной концентрации примеси. Для определения коэффициента поглощения при любом значении концентрации примеси N , строим зависимости $a = f(N)$ для фиксированных значений длины волны. Для кремния n -типа построена эта зависимость в диапазоне от 1.15 мкм до 6 мкм с использованием полинома (5) и изменением длины волны с шагом 0.05 мкм. Пример зависимости $a = f(N)$ для n -кремния при $\lambda = 6$ мкм приведен на рис.2.

В большинстве опубликованных работ [16,17,20] указывается, что коэффициент поглощения свободными носителями зависит от концентрации последних линейно (по крайней мере, при комнатной температуре). Поэтому каждая кривая $a = f(N)$ интерполируется как линейная функция. Принимая во внимание, что теоретически коэффициент поглощения должен зануляться при нулевой концентрации примеси, интерполяционную линейную функцию надо

записать в виде

$$a(\lambda, N) = k(\lambda)N \quad (6)$$

с коэффициентом $k(\lambda)$, зависящим от длины волны. Для получения зависимости этого коэффициента от длины волны построена соответствующая функция (точечная линия на рис.3).

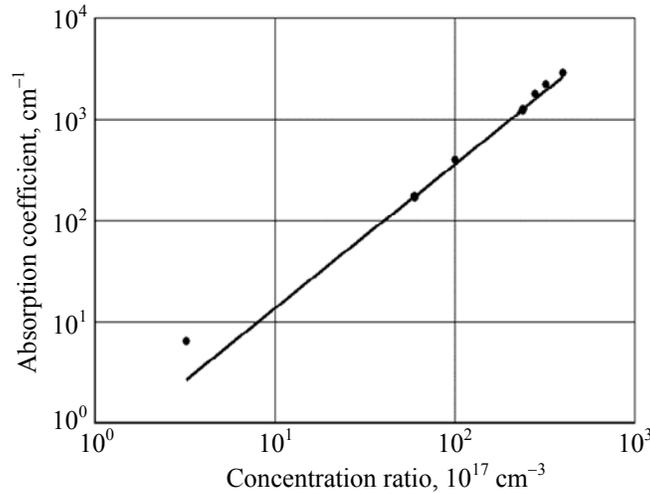


Рис.2. Зависимость коэффициента поглощения от концентрации примеси для *n*-кремния. Точки показывают экспериментальные значения при $\lambda = 6$ мкм.

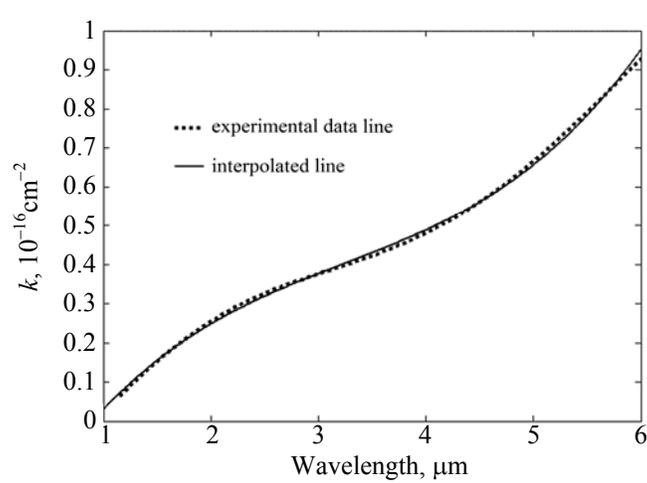


Рис.3. График функции $k(\lambda)$ для *n*-кремния.

Принимая во внимание, что линия (точечная) экспериментальных данных имеет вид кривой третьего порядка, получаем фитирующую интерполяционную кривую в виде следующего полинома третьей степени для *n*-кремния:

$$4k(\lambda) = 10^{-18} (1.2073\lambda^3 - 11.696\lambda^2 + 48.391\lambda - 34.812), \quad (7)$$

который достаточно хорошо совпадает с эмпирической кривой. Подставляя (7) в (6), получим выражение для поглощения свободных носителей в *n*-кремнии в диапазоне от 1.15 мкм до 6 мкм:

$$a_n = N_n 10^{-18} (1.2073\lambda^3 - 11.696\lambda^2 + 48.391\lambda - 34.812). \quad (8)$$

Подобным образом получаем формулу для поглощения свободных носителей в *p*-кремнии в диапазоне от 1.15 мкм до 8 мкм:

$$a_p = N_p 10^{-19} (-2.4853\lambda^3 + 65.535\lambda^2 - 120.11\lambda + 122.18). \quad (9)$$

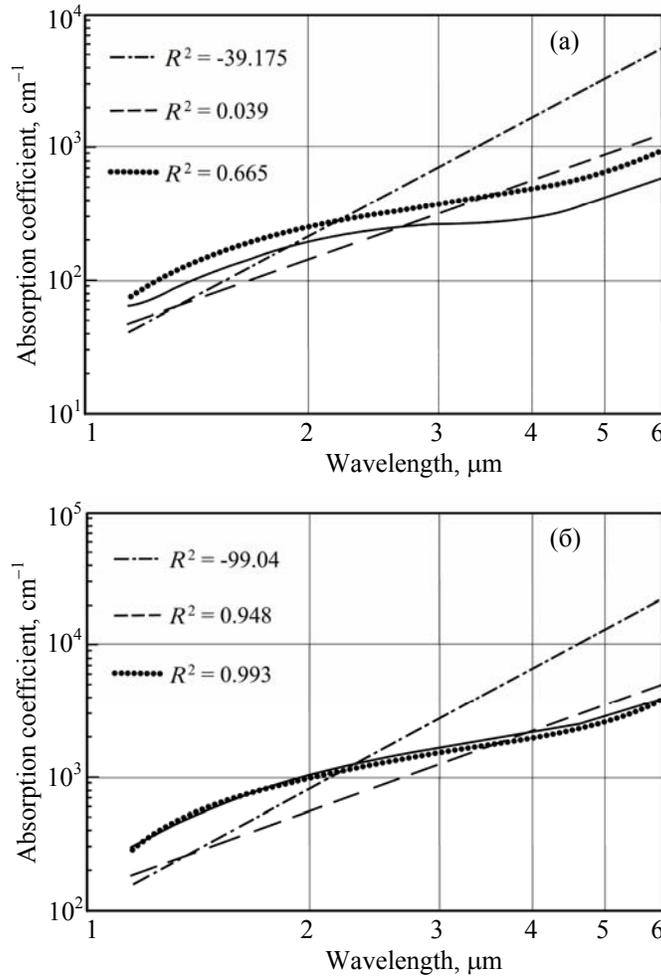


Рис.4. Сравнение экспериментальных данных (сплошная линия) с формулой (8) для *n*-кремния (точечная линия) и с вычисленными по эмпирическим моделям Грина (штрих-пунктир) и S.E. Aw и др. (пунктир). Графики построены для концентраций примеси 10¹⁹ см⁻³ (а) и 4 × 10¹⁹ см⁻³ (б).

Используя полученную для *n*-кремния формулу (8), мы построили зависимость коэффициента поглощения от длины волны и сравнили с экспериментальными данными. Результаты для двух различных концентраций примеси представлены на рис.4. На рисунке видно, что форма кривой (точечной), полученная из формулы (8), подобна форме экспериментальной кривой и в определенном диапазоне длин волн лучше фитирует эту кривую (сплошная линия), чем кривые, построенные по моделям Грина (штрих-пунктирная линия) и S.E. Aw и др. (пунктирная линия).

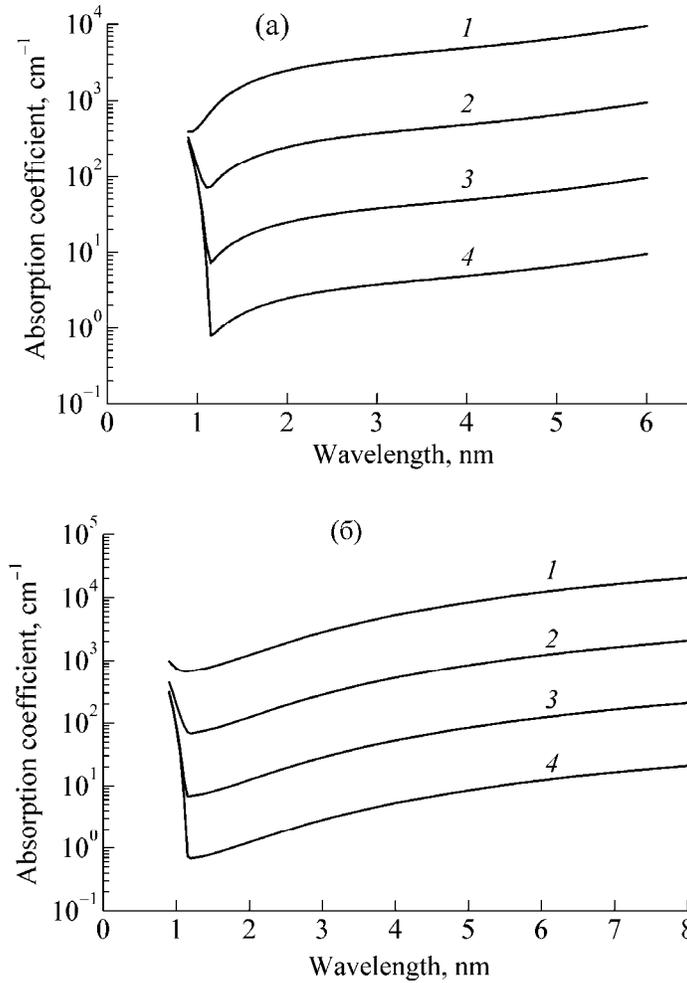


Рис.5. Коэффициенты поглощения для кремния *n*- (а) и *p*- (б) типа при различных концентрациях примесей: 1 – 10²⁰ см⁻³, 2 – 10¹⁹ см⁻³, 3 – 10¹⁸ см⁻³, 4 – 10¹⁷ см⁻³.

Для того чтобы оценить, насколько хорошо фитируются экспериментальные данные, используется параметр R^2 . Отметим, что R^2 имеет обычно дробные значения между нулем и единицей и не имеет размерности. На самом

деле эта величина не является квадратом чего-либо и может быть также отрицательной. Большие значения (близкие к единице) указывают на лучшее совпадение модели с экспериментальными данными [21]. Поэтому мы вычислили параметр R^2 для различных концентраций примеси для каждой модели (рис.4). Сравнивая полученные результаты, можно видеть, что формула (8) лучше соответствует экспериментальным данным, чем другие модели. Кроме того, мы вычислили полный R^2 для всех концентраций примеси и получили следующие значения: $R^2 = -12.36$ для модели Грина, $R^2 = 0.897$ для модели S.E. Aw и др. и $R^2 = 0.985$ по формуле (8). Это также свидетельствует о том, что формула (8) лучше описывает эксперимент.

Построены также графики зависимости коэффициента поглощения от длины волны для p -кремния и сравнены с формулой (9). Для оценки качества фитирования был вычислен параметр R^2 также для p -кремния. Получены следующие значения полного по всем кривым параметра R^2 : 0.960 для модели Грина, 0.996 для модели S.E. Aw и др. и 0.997 для формулы (9). Как видим, формула (9) лучше фитирует экспериментальные данные. Однако, учитывая малое отличие значений R^2 друг от друга, можно заключить, что в случае p -кремния все модели подходят примерно одинаково.

Таким образом, разработанная модель (8) и (9) может применяться для определения коэффициента поглощения свободными носителями в кремнии. С использованием развитой эмпирической модели мы определили и построили коэффициенты поглощения для кремния n - и p - типа при различных концентрациях примесей (рис.5).

Отметим, что для малых длин волн и в ближнем ИК диапазоне коэффициент поглощения определяется с помощью формулы (1). Рис.5 показывает, что, как и ожидалось, коэффициент поглощения растет, а минимум поглощения сдвигается в сторону коротких волн с ростом концентрации примеси.

4. Заключение

Из результатов работы можно сделать следующие выводы.

1. Имеется некоторое расхождение между экспериментальными данными и различными известными моделями поглощения света свободными носителями в кремнии.

2. Для уменьшения расхождения между экспериментальными данными и эмпирическими моделями развит новый подход к анализу экспериментальных данных и моделированию поглощения свободными носителями.

3. Разработана новая улучшенная эмпирическая модель для определения коэффициента поглощения свободными носителями в ближнем ИК и ИК диапазонах.

4. Полученные эмпирические формулы для кремния n - и p -типа удовлетворительно описывают экспериментальные данные. Развитая модель может использоваться для определения коэффициента поглощения свободными носителями в кремнии.

Авторы благодарны фонду Фольксваген, при поддержке которого выполнена настоящая работа.

ЛИТЕРАТУРА

1. **F.Beaudoin, R.Desplats, P.Perdu, C.Boit.** Principles of Thermal Laser Stimulation Techniques. Microelectronics Failure Analysis. Fifth Edition, p. 414.
2. **U.Kindereit, G.Woods, J.Tian, U.Kerst, C.Boit.** Investigation of laser voltage probing signals in CMOS transistors. IRPS, 2007.
3. **R.A.Falk.** Near IR absorption in heavily doped silicon – an empirical approach. Proc. of the 26th International Symposium for Testing and Failure Analysis, p.121.
4. **D.A.Clugston, P.A.Basore.** Prog. Photovolt.: Res. Appl., **5**, 229 (1997).
5. **W.Stumpf.** Investigation and simulation of the optical properties of doped silicon. University of Constance, Faculty of Physics, 2001.
6. **S.E.Aw, H.S.Tan, C.K.Ong.** J. Phys. Condensed Matter, **3**, 8213 (1991).
7. **А.М.Васильев, А.П.Ландсман.** Полупроводниковые фотопреобразователи. М.: Сов. радио, 1971.
8. **R.A.Soref, B.R.Bennett.** IEEE J. Quantum Electron., **QE-23**, 123 (1987).
9. **A.Liu, R.Jones, L.Liao, D.Samara-Rubio, D.Rubin, O.Cohen, R.Nicolaescu, M.Paniccia.** Nature, **427**, 615 (2004).
10. **C.E.Png, S.P.Chan, S.T.Lim, G.T.Reed.** J. Lightwave Technol., **22**, 1573 (2004).
11. **C.A.Barrios, V.R.Almeida, R.Panepucci, M.Lipson.** J. Lightwave Technol., **21**, 2332 (2003).
12. **M.Lipson.** J. Lightwave Technol., **23**, 4222 (2005).
13. **Q.Xu, B.Schmidt, S.Pradhan, M.Lipson.** Nature, **435**, 325 (2005).
14. **C.Chen, B.Miao, D.W.Prather.** Proc. SPIE, **6477**, 64770Y (2007).
15. **E.Heller, B.Grote, J.J.Maki, R.Scarmozzino.** Proc. SPIE, **5722**, 482 (2005).
16. **X.Zhang, B.Li, C.Gao.** Eur. Phys. J. Special Topics, **153**, 279 (2008).
17. **D.K.Schroder, R.N.Thomas, J.C.Swartz.** IEEE Trans. on Electron Devices, **ED-25**, 254 (1978).
18. Silicon Basic Parameters at 300K, <http://www.ioffe.ru/SVA>.
19. **M.A.Green.** Silicon solar cells: Advances Principles and Practice. Sydney: Bridge Printery, 1995.
20. **P.E.Schmid.** Phys. Rev., **23**, 5531 (1981).
21. **H.W.Coleman, W.G.Steele.** Experimentation, Validation, and Uncertainty Analysis for Engineers. New Jersey: John Wiley & Sons, 2009.

MODELING FREE CARRIER ABSORPTION IN SILICON

R.R. VARDANYAN, V.K. DALLAKYAN, U. KERST, C. BOIT

Different empirical models of light absorption in silicon by free charge carriers in near infrared and infrared regions are analyzed. An improved empirical model for free carrier absorption in silicon is developed. Results are obtained for the wavelength range from 0.9 μm to 6 μm for *n*-type, and from 0.9 μm to 8 μm for *p*-type silicon. The new model is evaluated by parameter R^2 and the sufficient fitting of experimental data is obtained.