Karakterizacija električki aktivnih defekata u 4H-SiC metodama tranzijentne spektroskopije

Brodar, Tomislav

Doctoral thesis / Disertacija

2021

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:262984

Rights / Prava: In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: 2025-03-10



Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb







Stedemote d'Edgreo d

Prirodoslovno-matematički fakultet

Tomislav Brodar

KARAKTERIZACIJA ELEKTRIČKI AKTIVNIH DEFEKATA U 4H-SiC METODAMA TRANZIJENTNE SPEKTROSKOPIJE

DOKTORSKI RAD

Mentor: dr. sc. Ivana Capan

Zagreb, 2021.



University of Zagreb

Faculty of Science

Tomislav Brodar

CHARACTERIZATION OF ELECTRICALLY ACTIVE DEFECTS IN 4H-SIC BY TRANSIENT SPECTROSCOPY METHODS

DOCTORAL DISSERTATION

Supervisor: dr. sc. Ivana Capan

Zagreb, 2021

Ovaj doktorski rad je izrađen pod vodstvom dr. sc. Ivane Capan, u Laboratoriju za poluvodiče Instituta Ruđer Bošković, u sklopu Sveučilišnog poslijediplomskog doktorskog studija Fizike pri Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

Informacije o mentoru

Ivana Capan rođena je 1977. godine u Tuzli, Bosna i Hercegovina. Studij fizike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu upisuje 1995. godine, a diplomirala je 2001. godine. Tijekom studija, u ak.god. 1998./99. dobila je Rektorovu nagradu za najbolji studentski znanstveni rad. Od 2001. godine do danas zaposlena je na Institutu Ruđer Bošković. Doktorsku disertaciju je obranila 2006. godine. Dobitnica je Državne nagrade za znanost u kategoriji mladih znanstvenika 2007. godine. Trenutno je voditelj Laboratorija za poluvodiče na Zavodu za fiziku materijala Instituta Ruđer Bošković. Ko-autor je preko 65 znanstvenih radova, održala je 14 pozvanih seminara i predavanja te sudjelovala u radu i vodila međunarodne znanstvene projekte (UKF, FP7, H2020, NATO SPS).

Zahvale

Ovim putem zahvaljujem mentorici dr. sc. Ivani Capan na vođenju kroz istraživački rad, na savjetima i uputama te svim članovima E-SiCure projekta jer bez njih rezultati izneseni u ovom radu ne bi bili mogući. Zahvaljujem dr. sc. Joséu Coutinhu na gostoprimstvu i susretljivosti tijekom posjeta Sveučilištu u Aveiru. Iznimno važni za interpretaciju rezultata karakterizacije defekata iznesene u ovom radu su DFT izračuni koje je proveo dr. sc. José Coutinho. Zahvalan sam dr. sc. Luki Snoju, dr. sc. Vladimiru Raduloviću i dr. sc. Klemenu Ambrožiču s Instituta Jožef Stefan na ozračivanju uzoraka neutronima. Na pripremi uzoraka vrhunske kvalitete sam vrlo zahvalan dr. sc. Takeshiu Ohshimo, dr. sc. Takahiru Makino, dr. sc. Shin-ichiru Sato i dr. sc. Yuichiu Yamazaki. Veliko hvala dr. sc. Željku Pastuoviću na suradnji. Članovima Instituta Ruđer Bošković Robertu Bernatu, Jasni Dasović, Damiru Žuljeviću i Kristini Tomić Luketić sam zahvalan na korisnim diskusijama. Zahvaljujem dr. sc. Zoranu Erešu na korisnim tehničkim rješenjima, savjetima i diskusijama. Dr. sc. Vladimiru Markevichu, dr. sc. Ianu D. Hawkinsu i dr. sc. Simonu Hammersleyu sam vrlo zahvalan na gostoprimstvu tijekom posjeta Sveučilištu u Manchesteru. Tijekom posjeta su provedena mjerenja uz njih, drago mi je što su podijelili sa mnom diskusije i svoje veliko iskustvo. Zahvaljujem svim profesorima tijekom studija, svima koji su sudjelovali u stvaranju uvjeta za uspješno obrazovanje, te članovima ureda za studente Fizičkog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na pomoći i ljubaznim odgovorima na sve upite. Puno hvala svim prijateljima i obitelji na neprestanoj podršci.

Sažetak

4H-SiC je široko-pojasni poluvodič s izvrsnim električkim svojstvima za upotrebu pri visoko temperaturnim, visoko naponskim i visoko frekvencijskim uvjetima. Razumijevanje defekata i fizikalnih procesa je preduvjet za kontrolu koncentracija defekata u materijalu, njihovog utjecaja na električna svojstva te daljnjeg povećanja otpornosti na zračenje i efikasnosti 4H-SiC elektroničkih komponenti.

U ovom radu je iznesena karakterizacija električki aktivnih defekata metodama tranzijentne spektroskopije. Defekti su uvedeni tijekom rasta kristala ili kontroliranim ozračivanjem. Kontroliran unos defekata u 4H-SiC je ostvaren ozračivanjem epitermalnim i brzim neutronima. Istražen je negativan-U poredak akceptorskih nivoa i kinetika uhvata elektrona dominantnog rekombinacijskog centra u n-tipu 4H-SiC, oznake Z_{1/2}. Pripadajući Z₁(=/0) i Z₂(=/0) duboki nivoi su razlučeni te pridijeljeni vakancijama ugljika na dvama različitim položajima u kristalnoj rešetci s lokalnom heksagonalnom $V_{C}(h)$ i kubičnom $V_{C}(k)$ simetrijom. $Z_{1}(=/0)$ i Z₂(=/0) duboki nivoi odgovaraju prijelazu između dvostruko negativnog i neutralnog stanja vakancija ugljika, dok opaženi $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ duboki nivoi su pridijeljeni prijelazima između negativnog i neutralnog stanja. Njihovi energijski položaji, udarni presjeci za uhvat elektrona i koncentracije su objašnjeni modelom vakancije ugljika, što potvrđuje njihove identifikacije. Proučeni su duboki nivoi uneseni ozračivanjem s energijama 0.4 eV i 0.7 eV ispod minimuma vodljive vrpce, uobičajenih oznaka redom EH1 i EH3. Uz poznate (-3/=) i (=/-) prijelaze vakancija silicija, opaženi su duboki nivoi metastabilnog M-centra te doprinos dodatnog defekta, najvjerojatnije kompleksnog defekta koji uključuje međupoložajne atome. Opisani su prijelazi između dvije konfiguracije M-centra, s M1 (E_C-0.43 eV) i M3 (E_C-0.72 eV) dubokim nivoima u jednoj konfiguraciji ili M2 (E_C-0.70 eV) dubokim nivoom u drugoj konfiguraciji. Razmotrili smo zamke za manjinske nosioce naboja u 4H-SiC, oznaka B i D centar, te utjecaj neutronskog ozračivanja na njih. B i D centar su pridijeljeni (-/0) prijelazu primjese bora na silicijevom B_{Si} i ugljikovom B_C mjestu u kristalnoj rešetci, tim redom. Dvije komponente D centra su razlučene i pripisane primjesi bora B_C s lokalnom heksagonalnom i kubičnom simetrijom.

Ključne riječi: 4H-SiC, defekti, neutronsko zračenje, metode tranzijentne spektroskopije

Mentor: dr. sc. Ivana Capan

Extended abstract

4H-SiC is a wide-bandgap semiconductor with excellent properties for high-temperature, high-voltage, and high-frequency applications. Identification of defects in 4H-SiC is a prerequisite for control of their concentrations and effect on electrical properties by material engineering. In this research work, characterization of electrically active defects is carried out by transient spectroscopy methods, which allow determination of defect parameters describing generation, recombination, and trapping of charge carriers at defects. The focus is on point defects introduced in 4H-SiC crystal during epitaxial growth and neutron irradiation.

The first three chapters of this thesis give a short overview of the structure and properties of 4H-SiC semiconductor, theoretical background regarding capture and emission kinetics of charge carriers at electrically active defects, and interesting results of other authors on the subject of defect characterization relevant to study presented here.

In the fourth chapter, characterization methods and materials are described. Schottky diodes produced by thermal evaporation of Ni on n-type 4H-SiC epitaxial layer were used. Controlled introduction of defects in 4H-SiC was realized by irradiation with epithermal and fast neutrons. Elastic collisions of neutrons with silicon and carbon atoms caused their displacement in 4H-SiC crystal. The specified neutron fluence levels spanned several orders of magnitude, ranging from 10⁹ n/cm² up to 10¹⁴ n/cm². Quality of the Schottky diodes and parameters necessary for characterization by transient spectroscopy methods were determined by analysis of current-voltage and capacitance-voltage characteristics. Majority carrier traps in epitaxial n-type 4H-SiC were characterized by Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) and Laplace DLTS techniques, while minority carrier traps were characterized by Minority Carrier Transient Spectroscopy (MCTS) and Laplace MCTS techniques.

The results of the characterizations, discussion, and conclusions are presented in the last two chapters. The current-voltage measurements on n-type Schottky diodes showed excellent rectifying characteristics, while capacitance-voltage measurements revealed homogenous doping and deep level concentrations. An increase in series resistance and a decrease in free carrier concentration with irradiation was observed at fluences higher than 10^{12} n/cm² due to introduced acceptor defects. Acceptor levels of dominant recombination center in 4H-SiC, labeled as $Z_{1/2}$, were investigated. $Z_1(=/0)$ and $Z_2(=/0)$ deep levels contributing to $Z_{1/2}$ peak in DLTS spectra were resolved and assigned to carbon vacancies at two different lattice sites with

local hexagonal V_C(h) and cubic V_C(k) symmetry, respectively. $Z_1(=/0)$ and $Z_2(=/0)$ deep levels were assigned to transitions between double negative and neutral charge states of carbon vacancy in accordance with its negative-U properties. Transitions between negative and neutral charge states of carbon vacancies, labeled $Z_1(-/0)$ and $Z_2(-/0)$, were resolved by Laplace DLTS technique and annealing procedures. Fast capture kinetics of electrons at neutral and negative carbon vacancies was examined in low temperature range (100 K-160 K). The determined activation energies, electron capture cross sections, and concentration ratios are well described by carbon vacancy model, which further confirms their identification. Irradiation induced deep levels with energy positions around 0.4 eV and 0.7 eV below the conduction band minimum, usually labeled EH1 and EH3, were examined and associated with silicon vacancy, M-center, and interstitially related defect. A higher EH3 concentration compared to EH1 concentration and observed decrease in EH3 concentration with low temperature annealing indicated a contribution of interstitially related defect to DLTS signal at the temperature of EH3 deep level. Deep levels of M-center were resolved by analyzing changes in DLTS spectra resulting from transitions between two different configurations of M-center. M1 (E_C-0.43 eV) and M3 (E_C-0.72 eV) deep levels were observed in configuration A of M-center, while M2 (E_C-0.70 eV) deep level was observed in configuration B. Two components at the temperature of EH1 deep level were resolved by Laplace DLTS technique. In configuration B of M-center, the resolved $EH1_1$ and $EH1_2$ deep levels were assigned to (-3/=) transition of silicon vacancies with local hexagonal and cubic symmetry, respectively. In configuration A, M1 deep level contributed to one of the resolved components in Laplace DLTS spectra at emission close to EH12 deep level. The study of minority carrier traps in n-type 4H-SiC and the influence of neutron radiation on them was performed. Two minority carrier traps in n-type 4H-SiC, labeled B and D center, were assigned to (-/0) transitions of substitutional boron on silicon B_{Si} and carbon B_C lattice sites, respectively. Furthermore, two components of D center were resolved by Laplace MCTS technique and attributed to (-/0) transitions of B_C located at hexagonal and cubic lattice sites. Peaks in MCTS spectra related to B and D center exhibited a shift towards lower temperatures with an increase in neutron irradiation fluence, which was explained by increased strain in epitaxial 4H-SiC caused by introduced defects.

Keywords: 4H-SiC, defects, neutron irradiation, transient spectroscopy methods

Supervisor: dr. sc. Ivana Capan

Popis kratica

DLTS	Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa		
	(eng. deep level transient spectroscopy)		
MCTS	Tranzijentna spektroskopija manjinskih nosioca		
	(eng. minority carrier transient spectroscopy)		
CVD	Kemijsko nanošenje iz parne faze (eng. chemical vapor deposition)		
EPR	Elektronska paramagnetska rezonancija		
PL	Fotoluminiscencija (eng. photoluminiscence)		
DFT	Teorija funkcionala gustoće (eng. density functional theory)		
I-V	Strujno-naponska		
C-V	Kapacitivno-naponska		

Sadržaj

1.	Uvo	od		1	
2.	2. Kristalna struktura i svojstva 4H-SiC				
3.	3. Električki aktivni defekti u 4H-SiC6				
	8.1.	Ener	gijski nivoi defekata	7	
	8.2.	Inter	akcija dubokih nivoa s vodljivom i valentnom vrpcom	9	
	3.2.1.		Uhvat nosioca naboja	. 11	
	3.2.	2.	Emisija nosioca naboja	. 13	
	8.3.	Točk	xasti defekti u 4H-SiC	. 15	
	3.3.	1.	Vakancija ugljika	. 15	
	3.3.	2.	Zamjenska primjesa bora	. 18	
	3.3.	3.	Duboki nivoi uvedeni zračenjem u 4H-SiC	. 19	
4.	Eks	perim	entalne metode i materijali	. 22	
2	l.1.	4H-S	SiC Schottky diode	. 22	
۷	ł.2.	Struj	no-naponska i kapacitivno-naponska karakteristika Schottky diode	. 25	
۷	1.3.	Meto	ode tranzijentne spektroskopije	. 31	
	4.3.	1. ′	Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa (DLTS)	. 31	
4.3.2. Tranzijentna spektroskopija manjinskih nosioca (MCTS)4.3.3. Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa visoke rezolucije i tranzije		2. '	Tranzijentna spektroskopija manjinskih nosioca (MCTS)	. 35	
		Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa visoke rezolucije i tranzijentna			
spektroskopija manjinskih nosioca visoke rezolucije			topija manjinskih nosioca visoke rezolucije	. 39	
2	1.4.	Eksp	perimentalni postav	. 41	
۷	1.5.	Neut	ronsko ozračivanje	. 43	
5.	Kar	akteri	zacija električki aktivnih defekata u 4H-SiC	. 46	
4	5.1.	Struj 46	no-naponske i kapacitivno-naponske karakteristike n-tip 4H-SiC Schottky die	oda	
4	5.2.	Zam	ke za većinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC	. 54	

5.2.1. Kinetika uhvata elektrona				
5.3. Zamke za većinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC uvedene neutronskim zračenjem				
66				
5.3.1. Doprinosi DLTS signalu na temperaturi EH3 dubokog nivoa				
5.3.2. Duboki nivoi metastabilnog M-centra74				
5.4. Zamke za manjinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC 80				
5.5. Zamke za manjinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC unesene neutronskim				
ozračivanjem				
6. Zaključak				
Popis literature				
Životopis autora s popisom objavljenih radova104				
Popis objavljenih radova105				

1. Uvod

Silicij karbid (SiC) je široko-pojasni poluvodič pogodan za upotrebu u visoko-temperaturnim, visoko-naponskim i visoko-frekvencijskim primjenama [1, 2]. Od više mogućih politipova SiC, 4H politip je preferiran kao materijal za elektroničke komponente zbog visokog energijskog procjepa te visoke i izotropne mobilnosti nosioca naboja [3].

Zbog odličnih svojstva, 4H-SiC je pronašao primjenu kao materijal za elektroničke komponente sustava za napajanja (npr. sustavi za napajanje električnih vozila [3]). Demonstriran je rad 4H-SiC komponenti na visokim temperaturama do 500 °C [1] te pogodnost 4H-SiC materijala za detektore s visokim omjerom signala i šuma [4]. Jedna od obećavajućih primjena 4H-SiC je za neutronski detektor za detekciju specijalnih nuklearnih materijala pri nadzoru granica [5]. Njegov razvoj i istraživanje izneseno u ovom radu su provedeni u sklopu NATO SPS projekta E-SiCure (*Engineering Silicon Carbide for Border and Port Security*).

Električki aktivni defekti utječu na koncentraciju slobodnih nosioca naboja, najjednostavniji primjer je postizanje n-tipa ili p-tipa dopiranja 4H-SiC unosom zamjenskih primjesa dušika ili bora. Optimalno vrijeme života manjinskih nosioca naboja moguće je postići putem kontrole koncentracija dominantnih rekombinacijskih centara, kao što je vakancija ugljika u 4H-SiC. Smanjenje vremena života manjinskih nosioca naboja se može postići unosom vakancija ugljika putem ozračivanja elektronima [6], ionskom implantacijom [7] ili zagrijavanjem na dovoljno visoke temperature [8]. Smanjenje koncentracije vakancija ugljika je moguće ostvariti unosom međupoložajnih atoma ugljika te naknadnim zagrijavanjem kako bi se vakancije poništile s međupoložajnim atomima. Atomi ugljika mogu biti uneseni u 4H-SiC koristeći termalnu oksidaciju [9, 10], implantaciju C iona [11] ili zagrijavanjem s piroliziranim slojem bogatim ugljikom [12].

Električki aktivni defekti u 4H-SiC materijalu u pravilu negativno utječu na efikasnost prikupljanja naboja 4H-SiC detektora [13]. Pri upadu određene čestice u detektor, dolazi do gubitka njene energije i stvaranja parova elektrona i šupljina. Rekombinacija i zatočenje nosioca naboja na defektima smanjuje broj detektiranih elektrona i šupljina, odnosno signal na krajevima detektora. Unos defekata u 4H-SiC je očekivan tijekom rada detektora u radioaktivnom okruženju. U pravilu, dodavanjem odgovarajućih primjesa u poluvodički materijal moguće je smanjiti formiranje najutjecajnijeg rekombinacijskog centra, koji smanjuje

vrijeme života nosioca naboja, te povećati efikasnost detekcije detektora i njegov životni vijek [8].

Interes za istraživanje svojstva defekata postoji radi njihovog utjecaja na električna svojstva materijala te mogućih primjena defekata, npr. za kvantne senzore i kvantno računarstvo [14, 15]. U ovom radu, iznesena je karakterizacija defekata u 4H-SiC metodama tranzijentne spektroskopije kako bismo doprinijeli razumijevanju defekata i fizičkih procesa prisutnih u 4H-SiC. Pažnja je posvećena točkastim defektima unesenim u n-tip 4H-SiC tijekom epitaksijalnog rasta i neutronskog ozračivanja. Zamke za većinske nosioce naboja su karakterizirane tranzijentnom spektroskopijom dubokih nivoa (DLTS, eng. *Deep Level Transient Spectroscopy*) i Laplace DLTS tehnikom, dok zamke za manjinske nosioce naboja su karakterizirane tranzijentnom spektroskopijom spektroskopijom manjinskih nosioca naboja (MCTS, eng. *Minority Carrier Transient Spectroscopy*) i Laplace MCTS tehnikom.

U sljedećim poglavljima je dan kratak opis kristalne strukture i svojstva 4H-SiC, električki aktivnih defekata i njihove interakcije s nosiocima naboja te kratak pregled literature vezan uz defekte u 4H-SiC na koje ćemo se usredotočiti u ovom radu. Zatim je dan kratak opis korištenih eksperimentalnih metoda te su izneseni rezultati provedene karakterizacije električki aktivnih defekata.

2. Kristalna struktura i svojstva 4H-SiC



Slika 1. Shematski prikaz (a) veze ugljikovog atoma (sive boje) sa susjednim atomima silicija (zlatne boje) i (b) kristalne strukture 4H politipa SiC s označenim položajima Si-C ravnina.

Kristal SiC sadrži podjednak broj tetravalentnih Si i C atoma koji su kovalentno vezani dijeleći elektrone hibridnim sp3 orbitalama [16]. Svaki C atom je okružen s četiri susjedna atoma Si koji se nalaze u vrhovima tetraedra (Slika 1 (a)), i obratno [17]. Jaka kovalentna veza Si-C je odgovorna za odlična mehanička svojstva SiC. SiC se može kristalizirati u velikom broju kristalnih struktura, politipova, koje se mogu opisati slažući slojeve Si-C parova atoma okomitih na c kristalnu os. Postoje tri različite pozicije slojeva A, B i C. Oznaka politipova SiC u Ramsdellovoj notaciji sadrži broj slojeva parova atoma Si-C koji se periodično ponavljaju i oznaku jedinične ćelije (H za heksagonsku, C za kubičnu ili R za romboedarsku jediničnu ćeliju). Redoslijedi ponavljanja Si-C slojeva kod najvažnijih politipova 3C, 4H i 6H su redom ABC, ABCB i ABCACB. Ilustracija kristalne strukture 4H-SiC i ponavljajućih Si-C ravnina prikazana je na slici 1 (b). Ovisno o načinu slaganja Si-C slojeva, u kristalnoj rešetci mogu postojati položaji s različitim drugim po udaljenosti susjednim atomima. U 4H-SiC kristalu postoje dva položaja Si i C atoma koji se razlikuju po svojoj okolini, s lokalnom (h) heksagonalnom i (k) kubičnom simetrijom. Na slici 1 (b), prema položaju susjednih slojeva je vidljivo kako se mjesta s kubičnom lokalnom simetrijom nalaze unutar Si-C slojeva na poziciji B, a heksagonska mjesta u slojevima na pozicijama A i C.

Politip	Energijski	Mobilnost	Mobilnost	Probojno	Termalna
SiC	procijep	elektrona / \perp c osi	šupljina	električno polje c	vodljivost
	(eV)	$(cm^2V^{-1}s^{-1})$	$(cm^2V^{-1}s^{-1})$	osi	$(W \text{ cm}^{-1} \text{K}^{-1})$
				(MV/cm)	
4H	3.26	1200/1020	120	2.8	3.3-4.9
6Н	3.02	100/450	100	3.0	3.3-4.9
3C	2.36	~1000/1000	100	1.4	3.3-4.9

Tablica 1. Osnovna svojstva 4H, 6H i 3C politipa SiC [16].

Tablica 2. Odabrana svojstva 4H-SiC [16]. Oznakama $\parallel i \perp$ su označeni smjerovi paralelno i okomito na c kristalnu os te s m_e masa slobodnog elektrona.

Efektivna masa elektrona $m_{e,\parallel}^*$ / $m_{e,\perp}^*$ (m_e)	0.33 / 0.42	
Efektivna masa šupljina $m_{h,\parallel}^{*}$ / $m_{h,\perp}^{*}$ (m _e)	1.75 / 0.66	
Broj ekvivalentnih minimuma vodljive vrpce M_C	3	
Efektivna gustoća stanja vodljive vrpce N _C	1.8 ×10 ¹⁹ (2.1 ×10 ¹⁹)	
(valentne vrpce N _V) (cm ⁻³)		
Dielektrična konstanta $\epsilon_{r,\parallel} / \epsilon_{r,\perp}$	10.32 / 9.76	
Saturacijska brzina elektrona $v_{e,sat}$ (šupljina $v_{h,sat}$)	2.2×10 ⁷ (~1.3×10 ⁷)	
(cm/s)		

Svojstva politipova se razlikuju kao posljedica različitih redoslijeda ponavljanja Si-C slojeva. Nekoliko osnovnih svojstva politipova SiC je navedeno u tablici 1. 4H politip je preferiran materijal među osnovnim politipovima SiC za elektroničke komponente zbog većeg energijskog procijepa te veće i izotropnije mobilnosti nosioca naboja. Široki energijski procijep 4H-SiC omogućuje rad komponenti na visokim temperaturama i neosjetljivost detektora na vidljivu svjetlost. Visoko električno probojno polje i visoka termalna vodljivost rezultiraju većom efikasnosti komponenata napajanja. Velika otpornost na oštećenja pri ozračivanju omogućuje dug životni vijek 4H-SiC komponenti u radioaktivnom okruženju. Energija potrebna za pomak atoma ugljika iz položaja u kristalnoj rešetci iznosi oko 20 eV, dok energija

širokopojasnih poluvodiča je mogućnost stvaranja SiO₂ izolacijskog sloja putem termalne oksidacije, kao u slučaju Si poluvodiča.



Slika 2. Apsorpcijski koeficijent 4H-SiC u ovisnosti o valnoj duljini na temperaturi 300 K. Isprekidana crvena i plava linija redom označavaju doprinos Γ-M i Γ-L indirektnih prijelaza. Iznosi prikazanih krivulja su određeni u radu Cha et al. [21].

Indirektna vrpčasta struktura omogućuje dugo vrijeme života manjinskih nosioca naboja u 4H-SiC. Valentna vrpca ima maksimum u Γ točki unutar Brillouinove zone, dok vodljiva vrpca ima minimum u M točki. Vodljiva vrpca u prvoj Brillouinovoj zoni ima ekvivalentna tri minimuma, dok u slučaju valentne vrpca degeneracija nije prisutna. U tablici 2 su navedene efektivne mase elektrona i šupljina, dielektrična konstanta te saturacijske brzine u 4H-SiC. Zbog indirektne vrpčaste strukture, apsorpcijski koeficijent svjetlosti α raste proporcionalno kvadratu energije upadnih fotona. Na slici 2 je prikazana ovisnost apsorpcijskog koeficijenta o valnoj duljini. Na manjim duljinama, Γ -L prijelaz doprinosi apsorpcijskom koeficijentu. Duljina prodiranja $1/\alpha$ iznosi oko 145 µm pri valnoj duljini 365 nm [16].

Kristal SiC može se proizvesti modificiranom Lely metodom (fizičkom depozicijom iz parovitoga stanja) ili kemijskim nanošenjem iz parne faze (CVD, eng. *chemical vapor deposition*). Za proizvesti 4H-SiC kristal s niskom koncentracijom defekata je nužno koristiti epitaksijalni rast CVD procesom na 4H-SiC supstratu [16]. Epitaksijalni sloj se koristi kao aktivno područje u elektroničkim komponentama zbog visoke kvalitete kristala.

3. Električki aktivni defekti u 4H-SiC



Slika 3. Shematski prikaz točkastih defekata u kristalnoj strukturi.

Defekti narušavaju periodičnost kristalne strukture. Mogu biti uneseni u poluvodički materijal tijekom njegovog rasta, pri proizvodnji električkih komponenti i tijekom rada komponenti. Defekti su uvijek prisutni u materijalu budući da smanjuju slobodnu energiju kristala povećavajući konfiguracijsku entropiju. Najjednostavniji točkasti defekti su vakancija (odnosno praznina, nedostatak atoma u kristalnoj strukturi), međupoložajni atom, zamjenska primjesa ili međupoložajna primjesa (Slika 3). Uz njih su mogući i složeniji točkasti defekti koji uključuju veći broj atoma, npr. parovi međupoložajnih atoma. Uz točkaste defekte, u kristalu se mogu naći jednodimenzionalni i dvodimenzionalni defekti kao što su dislokacije i pogreške u slijedu slaganja mrežnih ravnina. U 4H-SiC je moguć veći broj konfiguracija određenog defekta zbog postojanja dvaju različitih položaja u kristalnoj rešetci. Na primjer, vakancija ugljika (V_C) može stajati na dva različita položaja u kristalnoj rešetci, s lokalnom V_C(h) heksagonskom ili V_C(k) kubičnom simetrijom. U slučaju kompleksa defekata, za danu simetriju kristalne rešetke mogu postojati razne konfiguracije ovisno o usmjerenju defekta. Energijski nivoi defekata ovise o mjestu u kristalnoj rešetci budući da različite okoline vode na različiti potencijal koji defekti osjećaju.

3.1. Energijski nivoi defekata

Električki aktivni defekti unose energijske nivoe unutar energijskog procijepa u koje mogu biti uhvaćeni nosioci naboja. Prema položaju energijskih nivoa unutar energijskog procijepa, energijske nivoe udaljene od vodljive ili valentne vrpce za nekoliko vrijednosti karakteristične termalne energije k_BT nazivamo dubokim nivoima, dok energijske nivoe na manjoj udaljenosti nazivamo plitkim nivoima. Na sobnoj temperaturi plitki nivoi su ionizirani. Defekti se mogu podijeliti na donore i akceptore ovisno o naboju koji poprimaju. Donori poprimaju pozitivan naboj predajom elektrona vodljivoj vrpci ili uhvatom šupljina, dok akceptori postaju negativno nabijeni predajom šupljina valentnoj vrpci ili uhvatom elektrona. Prema broju elektrona u valentnoj ljusci, atomi iz dušikove skupine periodnog sustava elemenata su donori, dok atomi iz borove skupine su akceptori.

Naboj električki aktivnog defekta, odnosno broj elektrona lokaliziranih na defektu, ovisi o položaju Fermijevog nivoa unutar energijskog procijepa. Za defekt s dva stanja naboja q - 1 i q, broj defekata naboja q - 1 i q je podjednak ukoliko je Fermijava energija E_F jednaka energiji prijelaza E(q-1/q). Funkcija raspodjele stanja naboja q - 1 glasi [22]:

$$f^{q-1} = \left(1 + \frac{g_q}{g_{q-1}} e^{\frac{E(q-1/q) - E_F}{k_B T}}\right)^{-1}$$
(3.1)

gdje su g_{q-1} i g_q pripadni faktori degeneracije stanja, k_B Boltzmannova konstanta te T temperatura. Prijelazi se uobičajeno označavaju oznakama (i/j), gdje i označava stanje prije te j stanje nakon prijelaza. Na primjer, oznaka za emisiju elektrona iz jednostrukog negativnog stanja je (-/0), a prijelaz iz jednostruko pozitivnog u neutralno stanje emisijom šupljine označavamo s (+/0).



Slika 4. Ilustracija (a) pozitivnog-U i (b) negativnog-U poretka dubokih nivoa unutar energijskog procijepa.

Električki aktivni defekti mogu unijeti više dubokih nivoa unutar energijskog procijepa, tj. energija prijelaza između različitih stanja defekta emisijom ili uhvatom nosioca naboja. Na slici 4 je ilustriran pozitivan-U i negativan-U poredak energijskih nivoa [23]. Pri pozitivnom-U poretku energijskih nivoa, energija vezanja elektrona je manja u slučaju više elektrona lokaliziranih na defektu zbog odbojne Coulombove interakcije, tj. u stanju negativnijeg naboja defekta. Stoga, energijski nivoi prijelaza s pozitivnijim početnim stanjem su na nižoj energiji unutar energijskog procijepa. Poredak energijskih nivoa može biti obrnut ukoliko nakon uhvata elektrona dolazi do dovoljno velike relaksacije kristalne rešetke [23]. Pri negativnom-U poretku nivoa, stanje s više elektrona lokaliziranih na defektu ima manju energiju od stanja s manjim brojem elektrona. Stoga, jednostruko negativno stanje defekta prikazano na slici 4 (b) je metastabilno. Pri povećavanju Fermijeve energije, defekt iz neutralnog prelazi u jednostruko negativno stanje te odmah zatim u dvostruko negativno stanje. Stoga se defekt s negativnim-U poretkom nivoa nalazi u neutralnom ili dvostruko negativnom stanju u ravnotežnom stanju, ovisno o položaju Fermijevog nivoa.

3.2. Interakcija dubokih nivoa s vodljivom i valentnom vrpcom



Slika 5. Shematski prikaz interakcije dubokih nivoa s vodljivom i valentnom vrpcom. Vjerojatnosti emisije i uhvata elektrona (šupljina) su redom označene s e_n i c_n (e_p i c_p).

Interakcije dubokih nivoa s vodljivom i valentnom vrpcom su ilustrirane na slici 5. Ovisno o iznosima vjerojatnosti uhvata i emisije nosioca naboja, defekti se mogu ponašati kao zamke za nosioce naboja, rekombinacijski ili generacijski centri [24]. Ukoliko duboki nivo nakon emisije šupljine u valentnu vrpcu emitira elektron u vodljivu vrpcu govorimo o procesu generacije nosioca naboja. Proces rekombinacije nosioca naboja se sastoji od uhvata elektrona iz vodljive vrpce i uhvata šupljine iz valentne vrpce. Ukoliko se nakon uhvata nosioc naboja zadrži neko vrijeme u dubokom nivou prije emisije u vrpcu, duboki nivo odgovara zamki za nosioce naboja. Vjerojatnosti za interakciju s vodljivom ili valentnom vrpcom ovise o zasebnim svojstvima defekta. Međutim, nivoi bliži vodljivoj (valentnoj) vrpci imaju veću vjerojatnost interakcije s njom, a udaljeniji manju vjerojatnost. Stoga većina rekombinacijskih centara spada u duboke nivoe jer se nalaze bliže sredini energijskog procijepa s velikom vjerojatnosti interakcije s obije vrpce [25]. Zamke za elektrone interagiraju isključivo s vodljivom vrpcom, dok zamke za šupljine interagiraju s valentnom vrpcom. Navedenim procesima duboki nivoi utječu na električna svojstva poluvodiča. Prisutnost rekombinacijskih centra smanjuje vrijeme života manjinskih nosioca naboja. Uhvat slobodnih nosioca naboja u zamke može dovesti do kompenzacije, odnosno smanjenja koncentracije slobodnih nosioca naboja.

Za duboke nivoe energije E_T i ukupne koncentracije N_T može se napisati jednadžba vremenske promjene koncentracije dubokih nivoa popunjenih s elektronima:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{n}_{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\mathbf{t}} = (\mathbf{e}_{\mathrm{p}} + \mathbf{c}_{\mathrm{n}})(\mathbf{N}_{\mathrm{T}} - \mathbf{n}_{\mathrm{T}}) - (\mathbf{e}_{\mathrm{n}} + \mathbf{c}_{\mathrm{p}})\mathbf{n}_{\mathrm{T}}$$
(3.2)

gdje su vjerojatnosti emisije $e_n (e_p)$ definirane kao broj elektrona (šupljina) emitirane u vodljivu (valentnu) vrpcu u jedinci vremena, a vjerojatnosti uhvata $c_n (c_p)$ definirane kao broj elektrona (šupljina) uhvaćenih iz vodljive (valentne) vrpce u duboki nivo u jedinci vremena. Rješenje prethodne jednakosti uz pretpostavku konstantnih vrijednosti vjerojatnosti emisije i uhvata glasi:

$$n_{\rm T}(t) = n_{\rm T}(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + N_{\rm T}(e_{\rm p} + c_{\rm n})\tau\left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right)$$
(3.3)

gdje je $n_T(0)$ koncentracija dubokih nivoa popunjenih s elektronima u početnom trenutku i $\tau = 1/(e_n + c_n + e_p + c_p)$. Iz prethodnog izraza je vidljivo kako u stacionarnom stanju koncentracija popunjenih defekata iznosi $n_T(t \rightarrow \infty) = N_T(e_p + c_n)\tau$ te kako će postojati eksponencijalna promjena popunjenosti dubokih nivoa ukoliko u početnom trenutku postoji odstupanje od ravnotežnog stanja.

Ukoliko su u početnom trenutku duboki nivoi prazni $n_T(0) = 0$ te uhvat elektrona dominantan proces ($c_n \gg e_n, e_p, c_p$), popunjenost dubokih nivoa se povećava u vremenu:

$$n_{\rm T}(t) = N_{\rm T}(1 - e^{-c_{\rm n}t})$$
 (3.4)

U slučaju kada su u početnom trenutku duboki nivoi potpuno popunjeni elektronima $n_T(0)=N_T$ i emisija elektrona dominantan proces ($e_n \gg c_n$, e_p , c_p) popunjenost dubokih nivoa se smanjuje eksponencijalno u vremenu:

$$n_{\rm T}(t) = N_{\rm T} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{e}_{\rm n} t} \tag{3.5}$$

U slučaju kada su dominantni procesi uhvata c_p ili emisije e_p šupljina, mogu se izvesti analogni izrazi za koncentraciju dubokih nivoa popunjenih sa šupljinama $p_T = N_T - n_T$.

Prethodno razmatranje vrijedi u slučaju jednostruke emisije i uhvata nosioca naboja, odnosno pozitivnog-U sistema. Promjena popunjenosti dubokih nivoa negativnog-U sistema, kada se defekt može naći u tri stanja različitih naboja, je dana rješenjem sljedećih diferencijalnih jednadžbi za vremensku promjenu koncentracija defekta n_q u stanju naboja q:

$$\frac{dn_{q}}{dt} = -c_{q}n_{q} + e_{q-1}n_{q-1}$$
(3.6)

$$\frac{dn_{q-1}}{dt} = c_q n_q - (c_{q-1} + e_{q-1})n_{q-1} + e_{q-2}n_{q-2}$$
(3.7)

$$\frac{\mathrm{d}n_{q-2}}{\mathrm{d}t} = c_{q-1}n_{q-1} - e_{q-2}n_{q-2} \tag{3.8}$$

gdje su c_q i e_q pripadne vjerojatnosti uhvata i emisije. U slučaju kada su defekti u početnom trenutku u stanju naboja q i uhvat elektrona dominantan proces ($c_q \gg e_q$), rješenje sistema diferencijalnih jednadžbi je oblika:

$$\mathbf{n}_{\mathbf{q}}(\mathbf{t}) = \mathbf{N}_{\mathbf{T}} \mathbf{e}^{-\mathbf{c}_{\mathbf{q}} \mathbf{t}} \tag{3.9}$$

$$n_{q-1}(t) = N_T \frac{c_q}{c_q - c_{q-1}} \left(e^{-c_{q-1}t} - e^{-c_q t} \right)$$
(3.10)

$$n_{q-2}(t) = N_T \left(\frac{c_{q-1}}{c_q - c_{q-1}} e^{-c_q t} - \frac{c_q}{c_q - c_{q-1}} e^{-c_{q-1} t} + 1 \right)$$
(3.11)

Svi defekti nakon dovoljno dugo vremena prelaze u stanje naboja q-2 uzastopnim uhvatom dva elektrona.

3.2.1. Uhvat nosioca naboja

Prema definiciji, vjerojatnosti uhvata elektrona c_n i šupljina c_p su povezane s udarim presjecima za uhvat elektrona σ_n i šupljina σ_p :

$$c_n = \sigma_n v_{th,n} n \tag{3.12}$$

$$\mathbf{c}_{\mathbf{p}} = \sigma_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathrm{th},\mathbf{p}} \mathbf{p} \tag{3.13}$$

gdje su n i p koncentracije elektrona i šupljina te njihova termalna brzina iznosi:

$$v_{th,n(p)} = \sqrt{\frac{3k_{\rm B}T}{m_{e(p)}^{\rm c}}}$$
(3.14)

uz efektivnu masu $m_{e(p)}^{c} = 3/(1/m_{e(p),\parallel}^{*} + 2/m_{e(p),\perp}^{*})$. Prijelazi elektrona iz vodljive vrpce (šupljina iz valentne vrpce) u nivoe unutar energijskog procijepa mogu biti neradijativni (putem Augerovog prijelaza, multi-fononske emisije [26], kaskadnog uhvata, ili dvostupanjskog kaskadnog uhvata [27]) ili radijativni. U slučaju dubokih nivoa, uhvat slobodnih nosioca naboja se često odvija procesom multi-fononske emisije pri kojem uhvaćen nosioc naboja gubi energiju generiranjem fonona.



Slika 6. Shematski prikaz konfiguracijsko koordinatnog dijagrama za uhvat elektrona procesom multi-fononske emisije. Označena su stanja $|n_q+e^-\rangle$ slobodnog i $|n_{q-1}\rangle$ uhvaćenog elektrona, frekvencije fotonskih vibracija ω_{q-1} i ω_q , generalizirane koordinate minimuma Q_{q-1} i Q_q , razlika energija minimuma $E_C - E(q-1/q)$, barijera za uhvat elektrona ΔE_{σ} , te aktivacijska energija E_a .

Multi-fononski uhvat elektrona u duboki nivo je ilustriran na koordinatno konfiguracijskom dijagramu na slici 6. Prikazana generalizirana koordinata Q opisuje pomake atoma koji tvore defekt i susjednih atoma, dok energija na osi ordinata odgovara zbroju energije elektrona i elastične energije od pomaka atoma iz ravnotežnih položaja. Dvije prikazane krivulje odgovaraju stanjima slobodnog elektrona $|n_q+e^-\rangle$ i elektrona uhvaćenog u zamku $|n_{q-1}\rangle$. Pri dovoljno visokim temperaturama, pri kojim su vibracije kristalne rešetke dovoljno velike, dolazi do preklapanja stanja slobodnog i uhvaćenog elektrona te prijelaza preko barijere ΔE_{σ} . Nakon uhvata elektrona, atomi u okolini defekta se nalaze u pobuđenom stanju povećanih vibracija. Položaji atoma se relaksiraju prema ravnotežnom stanju prijenosom vibracija na kristalnu rešetku, odnosno emisijom fonona. Henry et al. [26] su modelom multi-fononske emisije opisali temperaturnu ovisnost udarnog presjeka koja se opaža za veliki broj dubokih nivoa:

$$\sigma(T) = \sigma_{\infty} e^{-\frac{\Delta E_{\sigma}}{k_{\rm B}T}}$$
(3.15)

gdje je ΔE_{σ} energijska barijera za uhvat nosioca naboja te σ_{∞} udarni presjek u granici $T \rightarrow \infty$. Udarni presjek je termalno aktiviran, eksponencijalno raste s 1/k_BT jer je za prijelaz potrebno imati dovoljan broj fonona. Iznos udarnog presjeka i njegova temperaturna ovisnost mogu ukazati na naboj defekta [28]. Na primjer, u slučaju zamke negativnog naboja postoji odbojna Coulombova barijera za uhvat elektrona, dok pri uhvatu šupljina postoji privlačna Coulomb interakcija koja povećava vrijednost udarnog presjeka.

3.2.2. Emisija nosioca naboja

Izrazi za vjerojatnosti emisije elektrona e_n i šupljina e_p:

$$e_n = \sigma_n v_{th,n} N_C \frac{g_0}{g_1} e^{-\frac{\Delta G_n}{k_B T}}$$
(3.16)

$$e_{p} = \sigma_{p} v_{th,p} N_{V} \frac{g_{0}}{g_{1}} e^{-\frac{\Delta G_{p}}{k_{B}T}}$$
(3.17)

se mogu izvesti koristeći princip detaljne ravnoteže, raspodjelu (3.1) te definiciju vjerojatnosti uhvata elektrona i šupljina (3.12, 3.13). Prema principu detaljne ravnoteže, u termodinamičkoj ravnoteži broj elektrona emitiranih iz dubokog nivoa u vodljivu vrpcu jednak je broju uhvaćenih elektrona te broj emitiranih šupljina u valentnu vrpcu je jednak broju uhvaćenih šupljina:

$$\mathbf{e}_{n}\mathbf{n}_{T} = \mathbf{c}_{n}(\mathbf{N}_{T} - \mathbf{n}_{T}) \tag{3.18}$$

$$e_{p}(N_{T} - n_{T}) = c_{p}n_{T}$$
 (3.19)

U prethodnom izrazima (3.16, 3.17), degeneracije stanja dubokog nivoa prije i nakon emisije nosioca naboja su redom označene s g₀ i g₁ te promjena Gibbsove slobodne energije je označena s $\Delta G_{n(p)} = \Delta H_{n(p)}$ - T $\Delta S_{n(p)}$. Efektivna gustoća stanja u vodljivoj N_C i valentnoj N_V vrpci mogu se odrediti iz izraza:

$$N_{\rm C} = 2M_{\rm C} \left(\frac{2\pi m_e^{\rm d} k_{\rm B} T}{h^2}\right)^{3/2}, N_{\rm V} = 2 \left(\frac{2\pi m_p^{\rm d} k_{\rm B} T}{h^2}\right)^{3/2}$$
(3.20)

koristeći iznos efektivne mase $m_{e(p)}^{'d} = (m_{e(p),\parallel}^* m_{e(p),\perp}^* m_{e(p),\perp}^*)^{1/3}$ te broja minimuma vodljive vrpce M_C. Uzimajući u obzir temperaturnu ovisnost udarnog presjeka (3.15), termalnih brzina (3.14) i efektivnih gustoća stanja u vodljivoj i valentnoj vrpci (3.20), vjerojatnosti emisije se mogu zapisati u obliku:

$$e_{n(p)} = K_{T, n(p)} \sigma_{n(p)}^{a} T^{2} e^{-\frac{E_{n(p)}^{a}}{k_{B}T}}$$
(3.21)

gdje je $K_{T, n(p)}$ temperaturno neovisna konstanta, $E_{n(p)}^{a}$ aktivacijska energija i $\sigma_{n(p)}^{a}$ udarni presjek:

$$E_{n(p)}^{a} = \Delta H_{n(p)} - \Delta E_{\sigma, n(p)}$$
(3.22)

$$\sigma_{n(p)}^{a} = \frac{g_{0}}{g_{1}} \sigma_{\infty, n(p)} e^{\frac{\Delta S_{n(p)}}{k_{B}}}$$
(3.23)

Prema prethodnom izrazu, linearnom regresijom ovisnosti $\ln(e_{n(p)}/T^2)$ o $1/(k_BT)$:

$$\ln\left(\frac{e_{n(p)}}{T^2}\right) = \ln\left(K_{T, n(p)}\sigma_{n(p)}^a\right) - \frac{E_{n(p)}^a}{k_BT}$$
(3.24)

može se odrediti aktivacijska energija $E_{n(p)}^{a}$ i udarni presjek $\sigma_{n(p)}^{a}$ iz nagiba pravca i odsječka na osi ordinata. Postoji nekoliko efekata koji mogu dodatno utjecati na iznos vjerojatnosti emisije $e_{n(p)}$ dane izrazima (3.16, 3.17). U prisutnosti električnog polja, može doći do snižavanja Coulombove potencijalne barijere za termalnu emisiju nosioca naboja iz lokaliziranog stanja na defektu i time do povećanja vjerojatnosti emisije. Navedeni efekt električnog polja (Poole-Frenkel efekt [29]) je prisutan ukoliko emisija nosioca naboja povećava iznos naboja defekta, tj. naboj defekta postaje pozitivniji ili negativniji. Na vjerojatnost emisije također može utjecati naprezanje u materijalu promjenom energije nivoa defekta, ovisno o njegovoj orijentaciji i simetriji [30].

3.3. Točkasti defekti u 4H-SiC



Slika 7. Shematski prikaz položaja dubokih nivoa unutar energijskog procijepa 4H-SiC (lijevo) i pripadnih defekata (desno). Prikazane su oznake dubokih nivoa, udaljenosti njihovih položaja od maksimuma valentne vrpce (E_V) ili minimuma vodljive vrpce (E_C) te pridijeljeni prijelazi ilustriranih defekta.

U ovom potpoglavlju je iznijet pregled rezultata u literaturi vezano uz dominantne točkaste defekte u 4H-SiC unesene tijekom epitaksijalnog rasta i ozračivanja. Razmotreni su duboki nivoi vakancije ugljika, zamjenske primjese bora te defekata uvedenih zračenjem (Slika 7). Pri proučavanju defekata su se pokazale iznimno važne tehnike elektronske paramagnetske rezonancije (EPR), fotoluminiscentne spektroskopije (PL), izračuni teorijom funkcionala gustoće (DFT) i metode tranzijentne spektroskopije.

3.3.1. Vakancija ugljika

Jedan od dominantnih rekombinacijskih centara u epitaksijalnom 4H-SiC n-tipa je vakancija ugljika (V_C). Unutar energijskog procijepa 4H-SiC unosi akceptorske V_C(0/=) i donorske V_C(0/+) nivoe na energijama oko 0.6-0.7 eV i 1.5-1.6 eV ispod dna vodljive vrpce [31], tim redom.

Negativan-U poredak akceptorskih nivoa vakancije ugljika je određen foto-EPR spektroskopijom [32–35]. Signal vakancija ugljika u jednostruko negativnom stanju V_C⁻ može se opaziti EPR spektroskopijom budući da imaju polucijelobrojan iznos spina, za razliku od vakancija ugljika u neutralnom V_C⁰ i dvostruko negativnom V_C⁼ stanju čiji signal se ne opaža. Kao što je prethodno opisano za negativan-U sistem, vakancije nastoje uhvatiti dva elektrona i prijeći u V_C⁼ stanje. Stoga je potrebno osvjetljenje uzorka za prelazak vakancija u V_C⁻ stanje te opažanje pripadnog EPR signala. Prateći intenzitet EPR signala V_C⁻ u ovisnosti o energiji fotona, određene su ionizacijske energije potrebne za optičke prijelaze (=/-) i (-/0) te opažena ovisnost intenziteta u skladu s negativnim-U poretkom.

 $Z_{1/2}$ i EH_{6/7} duboki nivoi karakterizirani tehnikom DLTS spektroskopije su pridijeljeni V_C(0/=) i V_C(0/+) prijelazima [31], tim redom. Njihova identifikacija kao dubokih nivoa vakancije ugljika je predložena na temelju rezultata komplementarnih DLTS, DFT i EPR studija. Hemmingsson et al. [36] su pokazali postojanje dviju komponenti Z_{1/2} centra i njihov negativan-U poredak. Zbog sličnosti električnih svojstva dvaju komponenti Z_{1/2} centra, za njihovo podrijetlo je predložen defekt koji se nalazi na dvama različitim pozicijama u kristalnoj rešetci. Koncentracije i energijski nivoi Z_{1/2} centra određeni DLTS tehnikom pokazuju odličnu korelaciju s vrijednostima određenim foto-EPR tehnikom [32, 37]. Također, povećavanje koncentracije Z_{1/2} dubokog nivoa je opaženo nakon ozračivanja elektronima niske energije (80 keV-210 keV) koji uzrokuju samo pomak atoma ugljika u kristalnoj rešetci [20, 38]. Smanjenje koncentracije Z_{1/2} dubokog nivoa je opaženo u slučaju epitaksijalnog rasta pod uvjetima bogatim atomima ugljika [38] te studijama koje unosom međupoložajnih atoma ugljika i naknadnim zagrijavanjem postižu rekombinaciju međupoložajnih atoma ugljika s vakancijama [9–12].

Ozračivanja i implantacije iona s različitim tipovima čestica i energija unose $Z_{1/2}$ duboki nivo u n-tip 4H-SiC, koji se odlikuje velikim udarnim presjecima za uhvat elektrona i šupljina (~10⁻¹⁵ cm² i ~10⁻¹⁴ cm² [39], tim redom) i visokom termalnom stabilnošću [40]. Rekombinacija nosioca naboja putem $Z_{1/2}$ dubokog nivoa uzrokuje smanjuje vremena života manjinskih nosioca naboja. Karakterizacija kinetike uhvata nosioca naboja i energijskih nivoa vakancije ugljika je od velike važnosti za inženjerstvo materijala zbog njene prisutnosti u epitaksijalnom 4H-SiC te moguće kontrole njene koncentracije.



Slika 8 (a) Shematski prikaz vakancija ugljika u kristalu 4H-SiC s lokalnom kubičnom V_C(k) (unutar A i C slojeva Si-C parova atoma) i heksagonskom simetrijom V_C(h) (unutar B slojeva Si-C parova atoma). (b) Ilustracija četiri različite strukture (konfiguracije) vakancija ugljika. Položaji atoma silicija na krajevima tetraedra su označeni krugovima, a rekonstruirane veze među Si radikalima su označene linijama. Prikazana je ravnina okomita na [0001] kristalnu os. (c) Konfiguracijsko koordinatni dijagram vakancije ugljika u 4H-SiC u neutralnom, negativnom i dvostruko negativnom stanju. Naznačene su energije prijelaza među stanjima različitog naboja te aktivacijske energije za transformacije između dvaju konfiguracija. Mjerna jedinica navedenih energija je eV. (Reproducirano iz [41, 42])

Rezultati EPR mjerenja i DFT izračuna pružaju informaciju o strukturi (konfiguracijama) vakancije ugljika u 4H-SiC [33, 42]. Vakancije se mogu naći na dva različita položaja u 4H-SiC s lokalnom kubičnom $V_{C}(k)$ i heksagonskom simetrijom $V_{C}(h)$ (Slika 8 (a)). Konfiguracije vakancije ugljika, odnosno položaji susjednih atoma silicija, su shematski prikazani na slici 8 (b). Vakancija ugljika poprima jednu od četiri prikazane konfiguracije (označene s A, B, C i D) ovisno o stanju naboja i položaju u kristalnoj rešetci. Na slici 8 (c) je prikazan konfiguracijsko koordinatni dijagram neutralnog, negativnog i dvostrukog negativnog stanja vakancije ugljika s označenim energijama prijelaza između minimuma krivulja potencijala. Izračunate energije (-/0) i (=/-) prijelaza među stabilnim stanjima $V_{\rm C}(k)$ su redom $E_{\rm C}$ - 0.61 eV i $E_{\rm C}$ - 0.64 eV, dok u slučaju V_C(h) redom iznose E_C - 0.67 eV i E_C - 0.64 eV [41]. Prema navedenim izračunatim energijama, negativne-U vrijednosti $V_{C}(k)$ i $V_{C}(h)$ su redom U = -0.03 eV i U = +0.03 eV. Nepouzdanosti negativnih-U vrijednosti i energija prijelaza određenih HSE06 hibridnim funkcionalnom gustoće uglavnom iznose oko 0.1 eV zbog periodičkih interakcija među superćelijama [42]. Energije $V_{C}(k)$ i $V_{C}(h)$ su izračunate pod istim postavkama kako bi se pogreške izračunatih vrijednosti mogle međusobno oduzeti pri promatranju relativnih vrijednosti među njima, koje stoga imaju manju nepouzdanost. Dobivanje veće negativne-U vrijednosti za V_C(k) je u skladu s eksperimentalnim rezultatima Laplace DLTS [41] i foto-EPR [33] spektroskopija. U ovom radu, eksperimentalnim rezultatima karakterizacije dubokih nivoa vakancije ugljika ćemo se nadovezati i potvrditi opisan model vakancije ugljika i prijelaza među njenim stanjima.

3.3.2. Zamjenska primjesa bora

Bor se uobičajeno koristi kao p-tip dopand u 4H-SiC. Nedavna istraživanja su pokazala kako je bor u velikim koncentracijama prisutan i u n-tipu materijala [43–45]. Do nenamjernog uvođenja bora u kristal dolazi tijekom rasta kristala CVD metodom. Kao takav, bor unutar energijskog procijepa unosi dvije zamke za šupljine s energijama oko 0.27 eV i 0.61 eV iznad valentne vrpce koji se uobičajeno označavaju kao B i D centar [43–46], tim redom. Njihovo pridjeljivanje akceptorskim prijelazima bora na silicijevom $B_{si}(-/0)$ i ugljikovom $B_{C}(-/0)$ mjestu u 4H-SiC je podržano DFT izračunima [47, 48] i korelacijama njihovih koncentracija s uvjetima epitaksijalnog rasta [43, 49]. Uvjeti rasta bogati ugljikovim atomima pogoduju većoj koncentraciji B centra zbog više praznih silicijevih mjesta dostupnih za formiranje B_{si} , dok uvjeti rasta bogati silicijevim atomima pogoduju većoj koncentraciji D centra zbog više dostupnih ugljikovih mjesta za formiranje B_c . U literaturi se također može naći prijedlog B_{Si} -V_c defekta karakteriziranog EPR spektroskopijom kao model porijekla D centra [50, 51], no prijedlog nije podržan DFT izračunima budući da određene energije njihovih prijelaza značajno odstupaju od energije D centra [49, 52].

Bor je često prisutna primjesa u 4H-SiC zbog upotrebe pri dopiranju p-tipa i nenamjerne kontaminacije tijekom epitaksijalnog rasta [43, 44]. U ovom radu ćemo karakterizirati B i D centre koristeći MCTS i Laplace MCTS tehnike te podržati njihovo pridjeljivanje B_{Si} i B_C defektima.

3.3.3. Duboki nivoi uvedeni zračenjem u 4H-SiC

3.3.3.1. EH1 i EH3 duboki nivoi

Dva duboka nivoa energija oko 0.4 eV i 0.7 eV ispod vodljive vrpce se mogu primijetiti u ntipu 4H-SiC nakon ozračivanja (neutronima, elektronima i protonima) ili ionske implantacije raznih tipova čestica i energija. Prethodno korištene oznake za njih su S1/S2 [40, 53], S2/S4 [54, 55] te EH1/EH3 [13, 20, 35, 56]. U dostupnoj literaturi, moguće je pronaći njihovo pridjeljivanje jednostavnim kompleksima defekata povezanih s međupoložajnim atomom ugljika ili prijelazima vakancije silicija.

Opažanje kako su koncentracije $E_C - 0.4$ eV i $E_C - 0.7$ eV dubokih nivoa podjednake pri raznim dozama ozračivanja te kako se njihove koncentracije podjednako smanjuju pri zagrijavanju na više temperature ukazuje da odgovaraju različitim prijelazima istog defekta, nazvanog S-centar [14, 53]. Povećanjem energije upadnog zračenja se povećava vjerojatnost unosa defekata pomakom Si atoma u 4H-SiC. Bathen et al. [14] su duboke nivoe energija $E_C - 0.4$ eV i $E_C - 0.7$ eV unesene ozračivanjem 1.8 MeV protonima pridijelili energijskim prijelazima vakancije silicija $V_{Si}(-3/=)$ i $V_{Si}(=/-)$. Smanjenje koncentracije S-centra pri temperaturama u rasponu 400 °C - 600 °C s aktivacijskom energijom 1.8 eV je objašnjeno transformacijom vakancije silicija u par vakancije ugljika i ugljikovog anti-site defekta $V_{Si} \rightarrow C_{Si} - V_C$ [53, 57]. Upotrebom Laplace DLTS tehnike razlučene su dvije komponente DLTS signala i pridijeljene (-3/=) prijelazu vakancija silicija s lokalnom heksagonskom $V_{Si}(h)$ i kubičnom $V_{Si}(k)$ simetrijom. Opažanje njihovih podjednakih koncentracija podupire njihovu identifikaciju budući da je očekivan unos $V_{Si}(k)$ i $V_{Si}(h)$ u podjednakim koncentracijama tijekom protonskog ozračivanja.

Ozračivanje elektronima niske energije (80 - 210 keV), koje uzrokuje samo pomake ugljikovih atoma u kristalu, unosi EH1 i EH3 duboke nivoe [20, 58]. Pomak ugljikovih atoma u 4H-SiC može rezultirati međupoložajnim atomima ugljika CI, vakancijama ugljika VC te anti-site defektima C_{Si} i Si_C. Smanjenje koncentracije EH1 i EH3 je primijećeno na temperaturama pri kojima su međupoložajni atomi ugljika mobilni (300 C-400°C [59]), što ukazuje njihov nestanak u reakcijama defekata koje uključuju međupoložajni atom ugljika [54]. DFT izračuni pokazuju kako postoji nekoliko modela defekata koji bi prema aktivacijskim energijama i temperaturnoj stabilnosti mogli odgovarati opaženim dubokim nivoima. Na primjer, najjednostavniji kompleksi defekata koji uključuju međupoložajni atom ugljika su C_i(-/0) [60] i (C_i)₂(-/0) [61]. Alfieri et al. [58] su primijetili da brzina smanjenja koncentracije EH1 i EH3 dubokih nivoa uvedenih ozračivanjem elektronima niske energije raste s povećanjem temperature s aktivacijskom energijom 1.1 eV. Određena aktivacijska energija je drugačija spram aktivacijske energije u slučaju S-centra, što ukazuje na drugi tip defekta koji su označili kao EH centar. Malene razlike između njihovih položaja unutar energijskog procijepa i temperaturnih ovisnosti koncentracija otežavaju njihovo razlučivanje te raspoznavanje. Njihove stope unosa pri ozračivanju ovise o vrsti upadnih čestica i njihovim energijama.



Generalizirana koordinata

Slika 9. Koordinatno konfiguracijski dijagram M-centra. Prikazane vrijednosti aktivacijskih energija M1, M2 i M3 dubokih nivoa i prijelaza između njegovih dviju konfiguracija A i B [62–64].

Ozračivanja i ionske implantacije unose metastabilan defekt, oznake M-centar, u n-tip 4H-SiC. Njegova prisutnost je poznata nakon ozračivanja elektronima i protonima [62, 64–67], a nedavno je njegov unos također opažen pri ionskoj implantaciji (2 MeV He i 7.5 MeV C iona) te neutronskom ozračivanju od strane Brodar et al. [63]. Koordinatno konfiguracijskim dijagramom na slici 9 su ilustrirani prijelazi između stanja različitog naboja M-centra te između njegovih konfiguracija označenih slovima A i B. M1 i M3 duboki nivoi pridijeljeni (=/-) i (-/0) prijelazima M-centra se opažaju u konfiguraciji A, dok M2 duboki nivo pridijeljen (=/-) prijelazu se opaža u konfiguraciji B [64]. Transformacija M-centra u konfiguraciju B se odvija pri njegovom dvostruko negativnom stanju i temperaturama iznad 400 K, a prijelaz u konfiguraciju A pri neutralnom stanju i temperaturama iznad 290 K [62]. Energijski položaji M1, M2 i M3 dubokih nivoa unutar energijskog procijepa (E_C-0.43 eV, E_C-0.7 eV i E_C-0.72 eV) su vrlo bliski položajima EH1, Z_{1/2} i EH3 dubokih nivoa, tim redom. Stoga za njihovo razlučivanje DLTS tehnikom je potrebno promatrati razlike između DLTS spektra s M-centrom u konfiguraciji A i B. Smanjenje koncentracije M-centra pri zagrijavanju se odvija procesom aktivacijske energije 2.0 eV [64], u sličnom temperaturnom rasponu kao u slučaju EH1 i EH3 dubokih nivoa.

4. Eksperimentalne metode i materijali

4.1. 4H-SiC Schottky diode



Slika 10. Shematski prikaz energijskog dijagrama n-tipa Schottky diode, spoja metalapoluvodič, bez primjene vanjskog napona. Oznakom E_0 je označen vakuumski nivo (energija slobodnog elektrona u vakuumu pri mirovanju), Φ_M izlazni rad metala, χ_S elektronski afinitet poluvodiča, Φ_S izlazni rad poluvodiča, W širina područja osiromašenja te V_{Bi} kontaktni potencijal. Unutar energijskog procijepa su prikazani pozitivni plitki donori te akceptorski duboki nivoi popunjeni elektronima do duljine λ unutar područja osiromašenja [68].

Schottky dioda je formirana spojem metala i poluvodiča ispravljačkog karaktera. Njihov energijski dijagram u slučaju n-tipa poluvodiča je prikazan na slici 10. Na idealnom spoju metal-poluvodič se javlja barijera visine koja odgovara razlici izlaznog rada metala i elektronskog afiniteta $\Phi_B = \Phi_M - \chi_S$ te kontaktni potencijal koji definiramo kao razliku izlaznih radova metala i poluvodiča q $V_{Bi} = q(\Phi_M - \Phi_S)$. Spoj metala i poluvodiča n-tipa ima ispravljački karakter ukoliko je q $\Phi_M > q\Phi_S$, odnosno postoji barijera za prelazak elektrona iz vodljive vrpce poluvodiča u metal.

U termodinamičkoj ravnoteži, Fermijevi nivoi u metalu i poluvodiču su izjednačeni. U metalu uz površinu kontakta se nalazi negativan naboj elektrona, dok u poluvodiču n-tipa pozitivan naboj istog ukupnog iznosa i suprotnog predznaka [25]. Unutar poluvodiča je formirano

područje osiromašenja bez slobodnih nosioca naboja, s pozitivnim nabojem koji potječe od fiksnih ioniziranih donora ili akceptora. Poluvodič je neutralan izvan područja osiromašenja jer slobodni nosioci naboja zasjenjuju fiksne naboje.

Ukupan pad potencijala po dubini područja osiromašenja odgovara razlici kontaktnog potencijala i vanjskog napona primijenjenog na diodu V_{Bi} - V. Ukupan naboj, električno polje unutar područja osiromašenja i širina područja osiromašenja se mogu odrediti integracijom Poissonove jednadžbe. U slučaju uniformne koncentracije gustoće naboja $q(N_D^+-N_A^-)$, širina područja osiromašenja W i električno polje E unutar poluvodiča glase:

W(V)=A
$$\sqrt{\frac{2\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_0}{q(N_{\rm D}^+-N_{\rm A}^-)}} \left(V_{\rm Bi}-V-\frac{k_{\rm B}T}{q}\right)$$
 (4.1)

$$E(x) = \begin{cases} \frac{q(N_D^+ - N_A^-)}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (W - x), & za \ x < W \\ 0, & za \ x > W \end{cases}$$
(4.2)

gdje x označava udaljenost od Schottky kontakta. Član k_BT/q u izrazu (4.1) dolazi od doprinosa raspodjele slobodnih nosioca naboja na rubu područja osiromašenja.

Primjenom pozitivnog vanjskog napona dolazi do toka struje kroz Schottky diodu. Dominantan proces transporta je termička emisija elektrona iz poluvodiča u metal preko Schottky barijere za umjerene koncentracije dopiranja ($N_D^+ \leq 10^{17} \text{ cm}^2$) i pri umjerenim temperaturama (~300 K) [25]. Povećanje pozitivnog napona dovodi do smanjenja širine područja osiromašenja W i pada napona na njemu V_{Bi} -V. Stoga s povećanjem napona sve veći broj elektrona u vodljivoj vrpci ima energiju dovoljnu za prijelaz preko barijere q(V_{Bi} -V) te dolazi do povećanja toka elektrona iz poluvodiča u metal. Pri tome tok elektrona iz metala u poluvodič se ne mijenja budući da barijera za prijelaz elektrona iz metala u poluvodič ne ovisi o naponu. Primjena reverznog napona rezultira vrlo malom reverznom strujom budući da dovodi do povećanja širine područja osiromašenja i barijere za prijelaz elektrona iz poluvodiča u metal.

Schottky barijera Φ_B visokog iznosa (~1.8 eV) se može formirati spojem Ni s 4H-SiC, što čini spoj Ni-4H-SiC dobrim odabirom za primjenu metoda tranzijentne spektroskopije pri proučavanju defekata u 4H-SiC [69]. Ni-SiC kontakt postaje omski pri temperaturama iznad 900 °C, dolazi do smanjenja Schottky barijere zbog pojave faze silicida i vakancija ugljika pri površini kontakta [70].



Slika 11. Shematski prikaz 4H-SiC Schottky dioda površine Schottky kontakta (a) $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ (oznake FN) i (b) $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ (oznake SN). (c) Schottky diode pričvršćene na tiskanim pločicama s električnim kontaktima.

U ovom radu, mjerenja su provedena na Schottky diodama koje su pripremili suradnici na QST institutu (*National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology*) u Japanu. Schottky diode su proizvedene na epitaksijalnom sloju n-tipa 4H-SiC dopiranog dušikom (do 5×10^{14} cm⁻³), debljine približno 25 µm [71]. Schottky barijera je formirana termalnim naparivanjem Ni na epitaksijalni sloj kroz metalnu masku s kvadratičnim otvorom dimenzija 1 mm × 1 mm ili 2 mm × 2 mm. Donji omski kontakt na stražnjoj strani SiC supstrata je formirana sinteriranjem Ni na temperaturi 950 °C u atmosferi argona. Proizvedene diode su ilustrirane na slici 11. Debljina Ni kontakta Schottky dioda površine 1 mm × 1 mm (oznake FN) iznosi oko 100 nm, dok u slučaju Schottky dioda površine 2 mm × 2 mm (oznake SN) debljina iznosi 15 nm. Ni sloj debljine 15 nm je polupropustan na svjetlost, približno 30 % upadne
svjetlosti na kontakt je transmitirano u 4H-SiC. Za potrebe *wire bonding*-a, na dio površine 15 nm Ni kontakta je zbog njegove osjetljivosti naneseno dodatnih 100 nm Ni. Schottky diode su pričvršćene na tiskane pločice srebrnom pastom povezujući donji omski kontakt uzorka i kontakt na pločici. Gornji Schottky kontakt je povezan s električnim kontaktom na tiskanoj pločici koristeći zlatnu žicu.

4.2. Strujno-naponska i kapacitivno-naponska karakteristika Schottky diode

Analizom strujno-naponske (I-V) i kapacitivno-naponske (C-V) karakteristike uzoraka dobivamo informaciju o ispravnosti uzorka te vrijednosti koje su preduvjet za tehnike tranzijentne spektroskopije na Schottky spoju, npr. otpor uzorka, visinu potencijalne barijere, neto koncentraciju dopanada te ovisnost širine područja osiromašenja o naponu.

Strujno-naponska (I-V) karakteristika Schottky diode je opisana s jednakosti:

$$I = I_{S} \left[e^{\frac{q(V-IR_{S})}{nk_{B}T}} - 1 \right]$$
(4.3)

gdje je I_S saturacijska struja, n faktor idealnosti i R_S serijski otpor. Na dijelu ln(I)-V krivulje pri kojem je eksponencijalni član u zagradi dominantan $qV/nk_BT \gg 1$ i utjecaj serijskog otpora zanemariv V \gg IR_S se opaža linearna ovisnost:

$$\ln(I) = \ln(I_S) + \frac{qV}{nk_BT}$$
(4.4)

iz koje se može odrediti faktor idealnosti n i iznos saturacijske struje I_S . Vrijednost faktora idealnosti n daje informaciju o procesu transporta. U slučaju termičke emisije većinskih nosioca naboja preko Schottky barijere faktor idealnosti iznosi 1. Veće vrijednosti mogu ukazati na prisutnosti drugih procesa (npr. procesa tuneliranja ili prisutnost stanja na površini spoja metalpoluvodič). Iz iznosa saturacijske struje I_S se može odrediti efektivna visina potencijalne barijere Φ_B korištenjem relacije:

$$I_{\rm S} = AA^* T^2 e^{\frac{q\Phi_{\rm B}}{k_{\rm B}T}}$$
(4.5)

gdje je A površina Schottky kontakta i $A^*=146 \text{ A cm}^{-2}\text{K}^{-2}$ efektivna Richardsonova konstanta.

U I-V karakteristici pri većim strujama se može opaziti utjecaj pada napona na serijskom otporu diode. Serijski otpor može potjecati od omskog i Schottky kontakta, 4H-SiC supstrata te epitaksijalnog sloja. Serijski otpor može se odrediti iz I-V karakteristike, npr. koristeći Nordovu ili Cheungovu metodu [72, 73]. Pri Nordovoj metodi, definiramo funkciju:

$$F(V) = \frac{V}{2} - \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{I}{AA^* T^2}\right)$$
(4.6)

čije su vrijednosti određene izmjerenom I-V krivuljom. Očitavanjem napona V₀ i struje I₀ za koje funkcija F(V) ima minimum se može odrediti serijski otpor R_S i visina Schottky barijere Φ_B :

$$R_{\rm S} = \frac{k_{\rm B}T}{qI_0} \tag{4.7}$$

$$\Phi_{\rm B} = F(V_0) + \frac{V_0}{2} - \frac{k_{\rm B}T}{q}$$
(4.8)

Prethodni izrazi (4.7) i (4.8) su izvedeni koristeći uvjet minimuma dF/dV = 0 i ovisnost struje o naponu danu Schottky jednadžbom (4.3), uz pretpostavku vrijednosti faktora idealnosti 1 i $qV/k_BT \gg 1$. Pri Cheungovoj metodi, serijski otpor R_S i faktor idealnosti n mogu se odrediti iz linearne ovisnosti derivacije dV/d(ln I) o struji I. Njihova veza slijedi iz Schottky jednakosti (4.1) uz $qV/nk_BT \gg 1$:

$$\frac{dV}{d(\ln I)} = R_{\rm S}I + \frac{nk_{\rm B}T}{q}$$
(4.9)

prema kojoj se serijski otpor R_S određuje iz nagiba pravca, a faktor idealnosti n iz odsječka pravca na osi ordinata. Koristeći određen faktor idealnosti n, može se definirati funkcija:

$$H(I) = V - \frac{nk_BT}{q} ln\left(\frac{I}{AA^*T^2}\right)$$
(4.10)

čije vrijednosti se mogu izračunati koristeći izmjerenu I-V karakteristike. Uvrštavajući Schottky jednadžbu (4.3) u funkciju H(I) slijedi njena linearna ovisnost o struji I:

$$H(I) = R_{\rm S}I + n\Phi_{\rm B} \tag{4.11}$$

prema kojoj nagib odgovara serijskom otporu R_S , a presjecište osi ordinata umnošku faktora idealnosti n i visine Schottky barijere Φ_B . Vrijednost serijskog otpora R_S određenog iz nagiba funkcije H(I) omogućuje provjeru konzistentnosti pristupa.

Diferencijalni kapacitet je definiran kao omjer povećanja naboja unutar područja osiromašenja dQ pri malom povećanju vanjskog napona za dV:

$$C = \frac{dQ}{dV}$$
(4.12)

Pri povećanju reverznog napona dV dolazi do povećanja širine područja osiromašenja dW i time povećanja naboja $dQ = q(N_D^+-N_A^-)dW$ koji potječe od fiksnih donora i akceptora na rubu područja osiromašenja. Ukupan naboj i širina područja osiromašenja su povezani Poissonovom jednadžbom s padom napona na području osiromašenja. Neovisno o raspodjeli naboja, iz njihove povezanosti slijedi veza diferencijalnog kapaciteta C sa širinom područja osiromašenja W:

$$C(W) = \frac{A\varepsilon_r \varepsilon_0}{W}$$
(4.13)

gdje je ε_0 dielektrična konstanta vakuuma te ε_r relativna dielektrična konstanta 4H-SiC.



Slika 12. Shematski prikaz (a) strujnog kruga Schottky diode i (b) ekvivalentnog strujnog s mjerenim kapacitetom C' i konduktancijom G'. Označeni su diferencijalni kapacitet C i konduktancija G područja osiromašenja te serijski otpor R_S.

Uobičajeno se mjerenje kapaciteta vrši promatranjem pomaka u fazi između struje i primjernog sinusoidnog napona frekvencije f = 1 MHz. Mjereni kapacitet je određen komponentom struje izvan faze, dok mjerena konduktancija je određena amplitudom komponente struje u fazi s primijenjenim naponom. Za korištenu visoku frekvenciju malog oscilatornog napona dV ne dolazi do promjene popunjenosti zamki unutar područja osiromašenja ($e_n \ll 2\pi f$). Diferencijalni kapacitet C i konduktancija G područja osiromašenja se mogu opisati paralelnim spojem kondenzatora i otpornika za mali oscilatorni napon dV, dok cijela Schottky dioda se može prikazati njihovim serijskim spojenim s otporom diode R_s (Slika 12). Takav strujni krug se

može prikazati ekvivalentnim krugom paralelno spojenog kondenzatora i otpornika, čije vrijednosti odgovaraju mjerenim vrijednostima kapaciteta C' i konduktancije G' diode:

$$G' = \frac{G(R_SG+1) + (2\pi fC)^2 R_S}{(R_SG+1)^2 + (2\pi fR_SC)^2}$$
(4.14)

$$C' = \frac{C}{(R_{s}G+1)^{2} + (2\pi f R_{s}C)^{2}}$$
(4.15)

Stoga za precizno mjerenje kapaciteta područja osiromašenja C, Schottky diode trebaju imati dovoljno malen serijski otpor R_s i konduktanciju područja osiromašenja G kako bi zadovoljili uvjete $R_SG\ll1$ i $2\pi fR_SC\ll1$ pri promatranom rasponu napona [74]. Uvjet $R_SG\ll1$ je lako zadovoljen pri reverznom naponu za Schottky diode s malom reverznom strujom. Iznos serijskog otpora se može procijeniti iz propusne I-V karakteristike uzorka, kao što je prethodno opisano (4.7, 4.9, 4.11).

Kapacitet Schottky diode pri naponu V u slučaju homogene koncentracije donora N_D^+ i akceptora N_A^- iznosi:

$$C(V) = A \sqrt{\frac{q\epsilon_r \epsilon_0}{2} \frac{N_D^+ - N_A^-}{V_{Bi} - V - \frac{k_B T}{q}}}$$
(4.16)

Prethodan izraz može se zapisati u obliku:

$$\frac{1}{C^{2}} = \frac{2}{q\epsilon_{r}\epsilon_{0}A^{2}} \frac{V_{Bi}-V}{N_{D}^{+} - N_{A}^{-}}$$
(4.17)

Iz ovisnosti $1/C^2$ o naponu V primjenom linearne regresije može se odrediti iznos neto koncentracije dopanada N_D^+ - N_A^- i kontaktni potencijal V_{Bi} . Visina Schottky barijere može se odrediti iz njene povezanosti s kontaktnim potencijalom V_{Bi} , uvrštavajući vrijednost odsječka pravca na y-osi V_i u izraz:

$$\Phi_{\rm B} = V_{\rm i} + (E_{\rm C} - E_{\rm F}) + \frac{k_{\rm B}T}{q}$$
(4.18)

gdje je $E_C - E_F = \frac{k_BT}{q} \ln [N_C/(N_D^+ - N_A^-)]$ položaj Fermijevog nivoa ispod minimuma vodljive vrpce. U slučaju nehomogene koncentracije dopanada, profil njihove neto koncentracije može se odrediti iz nagiba $1/C^2$ - V karakteristike:

$$N(W) = \frac{-2}{A^2 \epsilon q \frac{\Delta}{\Delta V} \left(\frac{1}{C^2}\right)}$$
(4.19)

28

pri čemu se koristi numerička derivacija $\Delta/\Delta V$ te dubina W određena izrazom (4.13). Budući da izvan područja osiromašenja slobodni nosioci naboja zasjenjuju fiksne naboje, u neutralnom području poluvodiča određen profil odgovara efektivnoj koncentraciji slobodnih nosioca naboja.

U prethodnim izrazima (4.16) i (4.19) se pretpostavlja oštra granica između područja osiromašenja s prostornim nabojem i neutralnog poluvodiča. Ta pretpostavka ne mora biti ispunjena u slučaju prisutnosti dubokih nivoa koncentracije usporedive s koncentracijom dopiranja, kada ne vrijedi $N_T \ll N_D^+ - N_A^-$, te moramo uzeti u obzir njihovu koncentraciju. Kao što je vidljivo na slici 10, duboki nivoi su popunjeni unutar područja osiromašenja od položaja W - λ do W. Duljina λ ovisi o položaju dubokog nivoa E_T unutar energijskog procijepa. Definirana je pozicijom presijecanja Fermi nivoa i energije dubokog nivoa te pri uniformnoj koncentraciji dopanada iznosi:

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\varepsilon(E_{\rm T} - E_{\rm F})}{e(N_{\rm D}^+ - N_{\rm A}^-)}}$$
(4.20)

Razmotrimo utjecaj uniformne koncentracije N_T akceptorskih dubokih nivoa na određivanje neto koncentracije dopanada. Ukoliko je vjerojatnost emisije e_n dubokog nivoa dovoljno velika, prostorna raspodjela popunjenih dubokih nivoa prati promjenu vanjskog napona ΔV tijekom mjerenja C-V karakteristike. Može se pokazati kako mjerena neto koncentracija N u izrazu (4.19) se mijenja prema [74]:

$$N = N_D^+ - N_A^- - N_T, za W \le \lambda$$
(4.21)

$$N = N_D^+ - N_A^- - \frac{\lambda}{W} N_T, \text{ za } W > \lambda$$
(4.22)

Ukoliko je za danu energiju dubokog nivoa λ duljina veća od područja osiromašenja $W \leq \lambda$, akceptorski nivoi su popunjeni elektronima unutar cijelog područja osiromašenja te koncentracija naboja ima konstantan iznos $N_D^+ - N_A^- - N_T$. Ukoliko je pri promatranom rasponu napona širina područja osiromašenja veća od λ duljine $W > \lambda$, pad napona se događa na područjima s koncentracijom naboja $q(N_D^+ - N_A^-)$ pri dubinama manjim od $W - \lambda$ i $q(N_D^+ - N_A^- - N_T)$ u rasponu od $W - \lambda$ do W. S povećanjem širine područja osiromašenja opaža se povećanje koncentracije N, koja u slučaju $W \gg \lambda$ poprima iznos $N_D^+ - N_A^-$. Stoga za homogenu koncentraciju dopanada i dubokih nivoa može se opaziti promjena u nagibu $(1/C^2)$ -V karakteristike ukoliko je koncentracija dubokih nivoa usporediva s neto koncentracijom

dopanada te ukoliko je emisija nosioca naboja dovoljno brza tako da tijekom mjerenja prostorna raspodjela popunjenih dubokih nivoa u rasponu od W - λ do W prati povećanje širine područja osiromašenja. Akceptorski nivoi u donjoj polovici energijskog procijepa sa zanemarivom vjerojatnosti emisije e_n se ne prazne tijekom C-V mjerenja te stoga doprinose statičnom naboju unutar područja osiromašenja čija je koncentracija označavana s N_A⁻ u prethodnim izrazima.

4.3. Metode tranzijentne spektroskopije

Tehnike spektroskopije na Schottky i pn spojevima omogućuju određivanje parametara dubokih nivoa vezanih uz generaciju, rekombinaciju i zatočenje nosioca naboja [75]. Metode tranzijentne spektroskopije su neizostavne pri proučavanju električki aktivnih defekata u poluvodičima zbog svoje visoke osjetljivosti i energijske razlučivosti. Mogu se proučavati defekti pri koncentracijama nekoliko redova veličine manjim od potrebnih koncentracija pri EPR i PL tehnikama [76].



4.3.1. Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa (DLTS)

Slika 13. Shematski prikaz popunjavanja i pražnjenja dubokih nivoa tijekom DLTS mjerenja te rezultirajuće promjene kapaciteta uzorka. (a) Ravnotežno stanje popunjenosti dubokih nivoa pri

reverznom naponu V_R. (b) Uhvat većinskih nosioca naboja u duboke nivoe tijekom naponskog pulsa V_P. (c) Emisija nosioca naboja iz dubokih nivoa nakon pulsa. (d) Tranzijent kapaciteta nakon primijenjenog naponskog pulsa duljine t_P. Označene su širine područja osiromašenja W pri reverznom naponu i naponu pulsa, pad potencijala na području osiromašenja q(V_{Bi} - V) te vjerojatnosti emisije e_n i uhvata c_n elektrona.

DLTS tehnika omogućuje karakterizaciju zamki za većinske nosioce naboja. Tijekom DLTS mjerenja, na uzorak je primijenjen reverzan napon V_R te primjenom naponskih pulseva V_P se popunjavaju duboki nivoi unutar područja osiromašenja (Slika 13). Tijekom električnog pulsa, dolazi do smanjenja širine područja osiromašenja te uhvata elektrona iz vodljive vrpce u duboke nivoe ispod Fermijevog nivoa. Koncentracija popunjenih dubokih nivoa se eksponencijalno povećava prema jednakosti (3.4) te za dovoljno dugačak naponski puls dolazi do popunjavanja svih dubokih nivoa unutar područja određenog širinom područja osiromašenja pri naponu pulsa W_P i reverznom naponu W_R . Nakon pulsa, pri reverznom naponu dolazi do emisije elektrona iz popunjenih dubokih nivoa u vodljivu vrpcu. Uz pretpostavku dovoljno male koncentracije dubokih nivoa spram neto koncentracije dopanada $N_T \ll N_D^+$ - N_A^- , promjena popunjenosti dubokih nivoa uzrokuje promjenu kapaciteta uzorka [77]:

$$\Delta C(t) = \frac{-C_R}{N_D W_R^2} \int_0^{W_R} x \,\Delta n_T(x, t) dx$$
(4.23)

gdje su C_R i W_R ravnotežna vrijednosti kapaciteta i širine područja osiromašenja pri reverznom naponu V_R te Δn_T razlika koncentracije popunjenih dubokih nivoa u početnom trenutku i vremenu t. Eksponencijalna promjena broja popunjenih dubokih nivoa unutar područja osiromašenja rezultira eksponencijalnom promjenom kapaciteta (Slika 13 (d)):

$$C(t) = C_R - \Delta C_0 e^{-e_n t}$$
(4.24)

gdje je s ΔC_0 označena amplituda tranzijenta kapaciteta. Iz vremenske promjene kapaciteta može se dobiti informacija o emisiji iz dubokog nivoa. DLTS signal je definiran kao razlika kapaciteta u dva određena trenutka t₁ i t₂ (*double-box car* metoda [78]):

$$\Delta C(T) = \Delta C_0 \left(e^{-e_n(T)t_2} - e^{-e_n(T)t_1} \right)$$
(4.25)

Tijekom DLTS mjerenja, temperatura uzorka se polagano povećava te mjerimo DLTS signal u ovisnosti o temperaturi T. Budući da je vjerojatnost emisije $e_n(T)$ (3.21) rastuća funkcija temperature imamo brže pražnjenje dubokih nivoa na višim temperaturama i time bržu

eksponencijalnu promjenu kapaciteta (Slika 14 (a)). Stoga, DLTS signal ima maksimum kao funkcija temperature te iščezava pri vrlo niskim i visokim temperaturama (Slika 14 (b)).



Slika 14. (a) Shematski prikaz promjene tranzijenta kapaciteta C(t) i DLTS signala s temperaturom. (b) Rezultirajući DLTS spektri za odabir triju različitih parova vremena t_1 i t_2 .

Vrhovi u DLTS spektru odgovaraju dubokim nivoima prisutnim u materijalu, pri čemu su položaji i visine pojedinih vrhova određeni parametrima i koncentracijom zamki. Iz definicije

DLTS signala danom jednakosti (4.25) može se odrediti veza vjerojatnosti emisije na temperaturi maksimuma $e(T_{Max})$ i vremena t_1, t_2 :

$$e_n(T_{Max}) = \frac{\ln\left(\frac{t_2}{t_1}\right)}{t_2 - t_1}$$
 (4.26)

Prema tome, poznata je vjerojatnost emisije na temperaturi maksimuma iz poznatih vremena t_1 i t_2 . Mjereći niz DLTS spektara s različitim vremenima t_1 i t_2 moguće je odrediti vjerojatnosti emisije dubokih nivoa na nizu temperatura očitavajući položaje maksimuma vrha. Povećanjem emisije spektra opaža se pomak vrha prema većim temperaturama kao što je prikazano na slici 14 (b). Prema ovisnosti emisije o temperaturi (3.21), iz Arrhenius grafa ovisnosti e_n/T^2 o $1/k_BT$ linearnom regresijom može se odrediti aktivacijska energija E_a (odnosno energija dubokog nivoa unutar energijskog procijepa) i udarni presjek za uhvat elektrona σ_n . Pri tome je pretpostavljena temperaturna neovisnost udarnog presjeka σ_n , čija vrijednost se može odrediti do na red veličine.

Vrijednost udarnog presjeka može se odrediti iz ovisnosti amplitude tranzijenata ΔC_0 o duljini pulsa t_P:

$$\Delta C_0(t_p) = \Delta C_0 m(1 - e^{-c_n t_p})$$
(4.27)

i definicije udarnog presjeka za uhvat elektrona (3.12). Tijekom pulsa, koncentracija popunjenih dubokih nivoa eksponencijalno raste u vremenu (3.4) jer je uhvat elektrona dominantan proces. Zatim se mjere dovoljno dugi tranzijenti kapaciteta tako da su duboki nivoi ispražnjeni pri njegovom završetku, odnosno početku idućeg pulsa. Porast koncentracije popunjenih dubokih nivoa vodi na povećanje amplitude tranzijenata $\Delta C_0(t_P)$. Primjenom dovoljno dugačkih pulseva dolazi do popunjavanja svih dubokih nivoa te saturacije amplitude tranzijenta kapaciteta. Koncentracija dubokog nivoa N_T može se odrediti iz amplitude tranzijenata kapaciteta $\Delta C_{0,m}$ pri dovoljno dugim pulsevima [79]:

$$N_{\rm T} = \frac{2(N_{\rm D}^{+} - N_{\rm A}^{-})}{\left(1 - \frac{\lambda_{\rm R}}{W_{\rm R}}\right)^{2} - \left(\frac{W_{\rm P} - \lambda_{\rm P}}{W_{\rm R}}\right)^{2}} \frac{\Delta C_{0,\rm m}}{C_{\rm R}}$$
(4.28)

gdje je W_R (W_P) širina područja osiromašenja te λ_R (λ_P) lambda duljina pri reverznom naponu (naponu pulsa). Efekt λ duljine je važno uzeti u obzir pri manjoj širini područja osiromašenja W_R ili za uzak raspon dubina $W_P - W_R$ unutar kojeg promatramo duboke nivoe. Neto koncentracija dopanada N_D^+ - N_A^- , iznosi kapaciteta pri reverznom naponu C_R i naponu pulsa C_P , te širine područja osiromašenja W_R i W_P (4.13) se mogu odrediti koristeći C-V karakteristiku (kao što je objašnjeno u prethodnom podpoglavlju) na temperaturi pri kojoj je očitana amplituda vrha u DLTS spektru. Pri korištenom mjernom postavu u ovom radu, DLTS spektar je normiran tako da amplituda vrha u DLTS spektru odgovara amplitudi tranzijenata kapaciteta ΔC_0 .

4.3.2. Tranzijentna spektroskopija manjinskih nosioca (MCTS)



Slika 15. Izračun profila koncentracije šupljina p i elektrona n po dubini. Izračun je proveden prema [80], uz zanemarivanje rekombinacije nosioca naboja. Širina područja osiromašenja pri naponu -10 V je određena iz C-V karakteristike polupropusne 4H-SiC Schottky diode na 300 K, dok ukupna foto-struja za 365nm upadnu svjetlost iznosi oko 184 nA.

Osvjetljenjem prednjeg polupropusnog kontakta Schottky diode mogu se popunjavati zamke za manjinske nosioce naboja unutar područja osiromašenja [81]. Za energiju upadne svjetlosti nešto veću od energijskog procjepa (s apsorpcijskom duljinom α u rasponu $10^2 - 10^3$ cm⁻¹), svjetlost prodire u materijal na dubine iza područja osiromašenja te generira parove elektrona i šupljina u materijalu. Broj generiranih elektrona i šupljina je proporcionalan intenzitetu svjetlosti koja eksponencijalno opada s udaljenosti od Schottky kontakta (dubinom) x:

$$G(x) = \alpha T_{v} \Phi e^{-\alpha x} \tag{4.29}$$

gdje je Φ tok upadnih fotona i T_v koeficijent transmisije prednjeg polupropusnog Schottky kontakta. Šupljine koje difuzijom dolaze do granice područja osiromašenja su injektirane u područje osiromašenja zbog električnog polja u području osiromašenja, dok elektrone električno polje otklanja. Prema tome, tijekom svjetlosnog pulsa koncentracija i struja šupljina I_{ph} u području osiromašenja su puno veće od koncentracije i struje elektrona. Uz pretpostavku da sva foto-struja I_{ph} kroz područje osiromašenja potječe od driftne struje šupljina, koncentracija šupljina p može se odrediti iz iznosa foto-struje prema izrazu:

$$p = \frac{I_{ph}}{eAv_p}$$
(4.30)

gdje brzina šupljina v_p= $\mu_h E$ odgovara saturacijskoj brzini v_{sat, p} pri dovoljno velikom električnom polju unutar područja osiromašenja. Međutim, prethodan jednostavan izraz daje podcijenjenu vrijednost ukoliko koncentracija šupljina p nije konstantna unutar područja osiromašenja. Promjena električnog polja s dubinom dovodi do promjene brzine i koncentracije šupljina te time struja difuzije ne mora biti zanemariva. Na drugi način, koncentracije šupljina i elektrona mogu se odrediti rješavajući jednadžbe kontinuiteta:

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \mathrm{G}_{\mathrm{p}} - \mathrm{U}_{\mathrm{p}} - \frac{1}{\mathrm{eA}} \frac{\mathrm{d}\mathrm{I}_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}x} \tag{4.31}$$

$$\frac{\mathrm{dn}}{\mathrm{dt}} = \mathrm{G_n} - \mathrm{U_n} + \frac{1}{\mathrm{eA}} \frac{\mathrm{dI_n}}{\mathrm{dx}}$$
(4.32)

gdje su U_p i U_n stope rekombinacije te G_p i G_n pripadne stope generacije dane izrazom (4.29). Struje šupljina I_p i elektrona I_n odgovaraju zbroju driftnih i difuzijskih komponenti:

$$I_{p} = eA\mu_{p}Ep - eAD_{p}\frac{dp}{dx}$$
(4.33)

$$I_n = eA\mu_n En + eAD_n \frac{dn}{dx}$$
(4.34)

gdje su D_p i D_n pripadni difuzijski koeficijenti. Prethodne jednakosti se numerički rješavaju uz rubni uvjet na površini da kvazi-Fermijev nivo za šupljine odgovara Fermijevom nivou u metalu, dok u neutralnom području može se pretpostaviti slaganje numeričkog i analitičkog rješenja jednadžbi kontinuiteta zbog uvjeta kontinuiranosti p i I_p. Koncentracija elektrona u neutralnom području odgovara neto koncentraciji dopanada pri puno manjoj koncentraciji šupljina, a na površini se može pretpostaviti vrijednost kvazi-Fermijevog nivoa za elektrone između Fermijeve razine u odsustvu osvjetljenja i Fermijevog nivoa u metalu [80]. Na slici 15

je prikazan primjer izračuna profila koncentracije elektrona i šupljina tijekom svjetlosnog pulsa pri postavkama MCTS mjerenja i karakteristikama uzoraka korištenih u ovom radu.



Slika 16. Shematski prikaz (a) uhvata šupljina iz valentne vrpce u duboke nivoe tijekom primijenjenih pulseva svjetlosti, (b) emisije šupljina iz dubokih nivoa nakon svjetlosnog pulsa i (c) promjena kapaciteta uzorka tijekom MCTS mjerenja.

Pri MCTS tehnici, zamke za šupljine se popunjavaju primjenom pulseva svjetlosti uz konstantan reverzan napon na Schottky diodi [82, 83]. Tijekom pulsa svjetlosti, događa se uhvat šupljina iz valentne vrpce u zamke za manjinske nosioce naboja (Slika 16 (a)). Budući da vjerojatnost uhvata šupljina c_p ovisi o koncentraciji šupljina, iznos emisije šupljina e_p ne mora biti puno manji od c_p pri korištenom intenzitetu svjetlosnog pulsa. Stoga u stacionarnom stanju ne dolazi nužno do potpunog popunjavanja zamki sa šupljinama. Koncentracija popunjenih zamki za šupljine je manja od ukupne koncentracije zamki za faktor $c_p/(c_p+e_p)$. U slučaju potpuno praznih zamki na početku pulsa, koncentracija popunjenih zamki za šupljine raste prema:

$$p_{T}(t) = N_{T} \frac{c_{p}}{c_{p} + e_{p}} \left[1 - e^{-(c_{p} + e_{p})t} \right]$$
(4.35)

Nakon pulsa svjetlosti događa se emisija šupljina iz zamki u valentnu vrpcu i time eksponencijalno smanjenje koncentracija popunjenih zamki p_T u vremenu. Promjena $p_T(t)$ nakon dovoljno dugog pulsa svjetlosti ((c_p+e_p) $t_P \gg 1$) glasi:

$$p_{\rm T}(t) = N_{\rm T} \frac{c_{\rm p}}{c_{\rm p} + e_{\rm p}} e^{-e_{\rm p} t}$$
(4.36)

Uz pretpostavku dovoljno male koncentracije zamki ($N_T \ll N_D^+ - N_A^-$) i izraz (4.23), eksponencijalna promjena broja popunjenih zamki unutar područja osiromašenja rezultira eksponencijalnom promjenom kapaciteta. MCTS signal je definiran kao razlika kapaciteta $C(t_1) - C(t_2)$ u dva trenutka t_1 i t_2 , kao u slučaju DLTS tehnike (4.25). Analogno analizi DLTS spektara, očitavanjem položaja vrhova se mogu odrediti vjerojatnosti emisija na nizu temperatura. Vrijednosti aktivacijske energije E_a i udarnog presjeka za uhvat šupljina σ_p se određuju iz Arrhenius grafa ovisnosti e_p/T^2 o $1/k_BT$. Za razliku od DLTS tehnike, pri MCTS tehnici se promatraju uhvat i emisija šupljina čiji pozitivan naboj vodi na suprotan predznak tranzijenata kapaciteta. Iz prethodnih izraza (4.23) i (4.35) za ovisnost amplitude tranzijenta o duljini pulsa slijedi:

$$\Delta C_0(p,t_p) = C_R \frac{N_T}{2(N_D^+ - N_A^-)} \frac{c_p}{c_p + e_p} \left[1 - e^{-(c_p + e_p)t_p} \right]$$
(4.37)

gdje je vjerojatnost emisije šupljina e_p poznata iz MCTS spektra, te su reverzan kapacitet C_R i neto koncentracija dopanada N_D^+ - N_A^- poznati iz C-V karakteristike. Zamke za šupljine se popunjavaju unutar cijelog područja osiromašenja tijekom MCTS mjerenja. Koncentracija zamki za šupljine N_T i vrijednost udarnog presjeka za uhvat šupljina σ_p mogu se odrediti iz ovisnosti amplitude tranzijenta kapaciteta o duljini primijenjenog svjetlosnog pulsa ili intenzitetu svjetlosnog pulsa pri konstantnoj duljini pulsa t_P . Promjena intenziteta svjetlosti mijenja koncentraciju šupljina unutar područja osiromašenja p i time vjerojatnost uhvata šupljina $c_p = \sigma_p v_{th,p} p$ (3.13). Prethodan izraz (4.37) se primjenjuje pri nelinearnoj regresiji, izražen u ovisnosti o koncentraciji šupljina p ili duljini pulsa t_P .

Uz uhvat i emisiju šupljina mogu se događati i procesi direktne fotoionizacije pri kojima se elektroni i šupljine emitiraju iz zamki u vodljivu ili valentnu vrpcu. Direktna fotoionizacija može promijeniti popunjenost zamki za šupljine tijekom pulsa i time utjecati na mjerenja udarnog presjeka. U slučaju prisutnosti procesa fotoionizacije, izraz (4.33) ostaje vrijediti uz

supstitucije $c_p \rightarrow c_p + e_n^o$ i $e_p \rightarrow e_p + e_p^o$ koje uzimaju u obzir vjerojatnost optičke emisije elektrona iz zamke u vodljivu vrpcu e_n^o te vjerojatnost optičke emisije šupljine iz zamke u valentnu vrpcu e_p^o . Vjerojatnost emisije elektrona (šupljina) putem optičkog prijelaza je proporcionalna Φ toku fotona po jediničnoj površini:

$$e_{n(p)}^{0} = \sigma_{n(p)}^{0}(h\nu)\Phi(h\nu)$$
 (4.38)

gdje je $\sigma_{n(p)}^{0}$ udarni presjek za optički prijelaz elektrona (šupljina) koji ovisi o svojstvima defekta.

MCTS tehnika je pogodna za primjenu na poluvodičima s indirektnim energijskim procijepom zbog većih vremena života manjinskih nosioca i time većih duljina difuzije koje pogoduju efikasnoj injekciji šupljina unutar područja osiromašenja. Omjer struja šupljina i elektrona ovisi o valnoj duljini upadne svjetlosti, duljini difuzije materijala te širini područja osiromašenja. Stoga, odabirom valne duljine i reverznog napona postavljaju se optimalni parametri mjerenja.

4.3.3. Tranzijentna spektroskopija dubokih nivoa visoke rezolucije i tranzijentna spektroskopija manjinskih nosioca visoke rezolucije

Laplace DLTS i Laplace MCTS tehnike omogućuju red veličine bolju energijsku rezoluciju dubokih nivoa spram DLTS i MCTS tehnika. Njihovom upotrebom mogu se razlučiti duboki nivoi bliskih emisija ($e_1/e_2 \ge 2$), s nerazlučenim preklapajućim vrhovima u DLTS ili MCTS spektru. Popunjavanje zamki se provodi primjenom električnih i svjetlosnih pulseva kao pri DLTS i MCTS tehnikama, tim redom. Laplace DLTS i Laplace MCTS su izotermalne tehnike, mjerenja tranzijenta kapaciteta se provode pri konstantnoj temperaturi uz veći broj usrednjenih mjerenja. Izmjeren tranzijent kapaciteta odgovara zbroju eksponencijalnih funkcija koji se može zapisati u integralnom obliku:

$$\Delta C(t) = \int_0^\infty f(e)e^{-et}de \qquad (4.39)$$

Laplace transformacija tranzijenta kapaciteta daje funkciju spektralne gustoće f(e) u ovisnosti o emisiji e, odnosno spektar iz kojeg se mogu odrediti emisije prisutnih dubokih nivoa. Površina ispod vrha u Laplace DLTS i Laplace MCTS spektru odgovara amplitudi pripadnog eksponencijalnog tranzijenata. U ovom radu, za izračun Laplace transformacije se primjenjuje FLOG procedura temeljena na Tikhonovoj regularizacijskoj metodi [76]. U pravilu, numeričke metode pokušavaju pronaći spektralnu funkciju s najmanjim brojem vrhova u spektru koja dobro opisuje izmjeren tranzijent kapaciteta. Nužno je imati dovoljno velik omjer signala i šuma jer Laplace transformacija nema jedinstveno rješenje u prisutnosti šuma. Važno je imati vrlo stabilnu temperaturu tijekom mjerenja (< 0.1 K) za imati dobro definirane vrijednosti emisije te usrednjiti veći broj tranzijenata N (50 ~ 1000) budući da se omjer signala i šuma povećava proporcionalno N^{1/2}. Laplace DLTS tehnika se pokazala vrlo korisna pri proučavanju dubokih nivoa bliskih emisija, npr. pri proučavanju donorskog nivoa vakancije ugljika $V_C(0/+)$ u 4H-SiC [31].

4.4. Eksperimentalni postav



Slika 17. (a) Shema mjernog postava za metode tranzijentne spektroskopije. (b) Položaji komponenti mjernog postava, uključujući Oxford Instruments OptistatDN kriostat te kriostat korišten pri I-V i C-V mjerenjima.

I-V i C-V karakterizacija Schottky dioda je provedena u vakuumu u odsutnosti osvjetljenja, koristeći Keithley 4200 Semiconductor characterization system i Keithley 6487 Picoammeter/Voltage Source. Na slici 17 je prikazana shema korištenog mjernog postava za metode tranzijentne spektroskopije te položaji komponenti i korištenih kriostata. Za mjerenje malih promjena kapaciteta uzorka (≤ 1 pF) je korišten 1 MHz Boonton 7200 mjerač kapaciteta i kompenzacijski kondenzator. Mjerač kapaciteta mjeri razliku između kapaciteta kompenzacijskog kondenzatora i uzorka, što omogućuje korištenje najmanjeg raspona kapaciteta (±2 pF) s najmanjom razinom šuma. Pri mjerenjima kapaciteta, utjecaj vanjskih izvora električnog šuma je otklonjen povezivanjem uzorka i kapacitivnog metra koaksijalnim kablovima i uzemljenjem svih komponenti mjernog postava u zvjezdastoj konfiguraciji. Uzorak je postavljen na probu Oxford Instruments OptistatDN kriostata. U kriostatu postoje dva grijača, jedan na probi u blizini uzroka te drugi na okolnom dijelu kroz koju prolazi kapilara za protok tekućeg dušika i koji je u doticaju s probom. Brzina protoka tekućeg dušika kroz kapilaru, odnosno brzina hlađenja okolnog dijela, se podešava otvaranjem ventila. Temperature uzorka na probi i hladnijeg okolnog dijela su kontrolirane koristeći dva temperaturna kontrolera LakeShore 332 i LakeShore 335. Prijenos topline među njima (brzina hlađenja) ovisi o razlici njihovih temperatura. Prostor oko uzorka je vakuumiran kako bi se postigla toplinska izolacija uzoraka od okoline te spriječila kondenzacija vode na uzorku pri nižim temperaturama. Stoga se mjerni postav odlikuje malom razinom šuma (~1 fF) pri mjerenju kapaciteta i visokom stabilnošću temperature uzorka (<0.1 K tijekom pojedinog mjerenja). Signal na analognom izlazu mjerača kapaciteta je digitaliziran koristeći NI PCI-6251 DAQ i i Laplace DLTS softver na računalu. Za primjenu reverznog napona i električnih pulseva na uzorak pri DLTS i Laplace DLTS mjerenjima je korišten napon s izlaza NI PCI-6251 DAQ. Za primjenu većih reverznih napona na uzorak od - 10 V je po potrebi korišteno naponsko pojačalo (Analog Devices LTC6090IS8E#PBF operational amplifier). Za primjenu konstantnog reverznog napona tijekom MCTS i Laplace MCTS mjerenja je korišten unutarnji naponski izvor kapacitivnog metra, dok je napon s izlaza NI PCI-6251 DAQ korišten za aktiviranje svjetlosnih pulseva. Izvori svjetlosti su montirani ispred optičkih prozora kriostata te usmjereni prema uzorku. Kao izvor svjetlosti pri MCTS mjerenjima je korištena 365 nm LED-ica napajana Thorlabs LDC205C strujnim izvorom. Korištena brzina podizanja temperature pri DLTS i MCTS mjerenjima je manja od 3 K/min, osiguravajući dobro definiranu temperaturu uzorka. Mjerni postav za MCTS i Laplace MCTS mjerenja na Institutu Ruđer Bošković je postavljen za potrebe istraživanja iznesenog u ovom radu.



Slika 18. Neutronski spektar unutar F-24 kanala za ozračivanje TRIGA reaktora na IJS u Sloveniji [84, 85] korištenog za ozračivanje Schottky dioda (crna linija). Spektar neutrona unutar kadmijeve (Cd) kutije debljine stranica 1 mm korištene za filtriranje termalnih neutrona je prikazan crvenom linijom.

4H-SiC Schottky diode n-tipa su ozračene s epitermalnim i brzim neutronima na istraživačkom TRIGA reaktoru Instituta Jožef Stefan (IJS) u Sloveniji. Termalni neutroni s energijom manjom od 0.55 eV su filtrirani tijekom ozračivanja stavljajući Schottky diode unutar kutije od kadmija sa stranicama debljine 1 mm. Energijski spektar neutrona na lokaciji ozračivanja (Slika 18) je karakteriziran na temelju Monte Carlo izračuna koristeći MCNP® programski paket i mjerenja aktivacije Au folije za ¹⁹⁷Au(n,γ) reakciju [86, 87]. Tok neutrona unutar kadmijeve kutije je određen iz karakteriziranog energijskog spektra neutrona i donje granične vrijednosti 0.55 eV. Udio toka epitermalnih neutrona (energija u rasponu od 0:55 eV do 100 keV) i toka brzih neutrona (energija u rasponu od 100 keV do 20 MeV) su približno 51 % i 49 %, tim redom. Tok brzih neutrona prati tipični fisijski spektar, s vrhom u području od 1 MeV do 2 MeV te ponekim manjim vrhovima i ponorima zbog efekata apsorpcijskih rezonancija.

Elastični sudari neutrona s atomima silicija i ugljika rezultiraju njihovim pomakom i time unosom defekata. Neutronskim ozračivanjem je ostvaren kontrolirani unos intrinzičnih defekata u 4H-SiC, koji su jednoliko raspoređeni u materijalu zbog velike dubine prodiranja neutrona. Termalni neutroni su filtrirani zbog većeg udarnog presjeka za neelastične sudare s atomima silicija i ugljika. U jednoj od mogućih neelastičnih reakcija ${}^{30}Si(n, \gamma){}^{31}Si \rightarrow {}^{31}P$ atomi silicija prelaze u fosfor koji je dopand p-tipa (dopiranje transmutiranjem [88]). Stoga, termalni neutroni nisu idealni za unos isključivo intrinzičnih točkastih defekata.

Pomak atoma u 4H-SiC pri ozračivanju neutronima je simuliran koristeći Fluka software [89]. Neutronski spektar prikazan na slici 18 je korišten pri određivanju prosječne vrijednosti koncentracije pomaknutih atoma po upadnom neutronu ($5.0 \pm 0.5 \text{ cm}^{-3}\text{n}^{-1}$). Tok neutrona po jedinici letargije θ je povezan s tokom neutrona Φ energija u rasponu od E₁ do E₂ pomoću izraza [90]:

$$\Phi(E_1 \le E \le E_2) = \int_{E_1}^{E_2} \theta \, d(\ln E)$$
(4.40)

Ukupno je simulirano 10^6 upadnih neutrona za svaku od 627 vrijednosti energija u rasponu od 2×10^{-4} eV do 2×10^7 eV. Određen broj pomaknutih atoma je jednak broju unesenih vakancija i zamjenskih sudara. U zamjenskom sudaru, upadni atom ostaje na mjestu pomaknutog atoma kojem je predao svoju energiju. Stoga, izračunata koncentracija pomaknutih atoma daje procjenu reda veličine koncentracija unesenih defekata.

U tablici 3 su navedeni parametri ozračivanja, snaga reaktora i vrijeme ozračivanja. Schottky diode su ozračene na sobnoj temperaturi bez primijene vanjskog napona. Odabrane su doze u rasponu od 10⁹ n/cm² do 10¹⁴ n/cm² koje pokrivaju nekoliko redova veličina.

Oznaka	Doza	Vrijeme	Snaga reaktora	Pod-Cd doza
Schottky diode	(nepouzdanost)	ozračivanja		(nepouzdanost)
	$(n \text{ cm}^{-2})$	(s)		$(n \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1})$
FN0	0	0	/	/
FN1E9	1.1×10 ⁹ (2.9%)	30	2.5 W	3.66×10 ⁷ (2.7%)
FN1E10	1.1×10 ¹⁰ (2.7%)	300	2.5 W	3.66×10 ⁷ (2.7 %)
FN1E11	9.4×10 ¹⁰ (2.9%)	273	25 W	3.44×10 ⁸ (2.9 %)
FN1E12	9.4×10 ¹¹ (2.9%)	2730	25 W	3.44×10 ⁸ (2.7 %)
FN1E13	1.0×10 ¹³ (11 %)	2.73	250 kW	3.66×10 ¹² (2.7 %)
FN5E13	5.0×10 ¹³ (2.7 %)	1365	2.5 kW	3.66×10 ¹⁰ (2.7 %)
FN1E14	1.0×10 ¹⁴ (2.9%)	27.3	250 kW	3.66×10 ¹² (2.7 %)
SN0	0	0	/	/
SN1E12	9.4×10 ¹¹ (2.9%)	2730	25 W	3.44×10 ⁸ (2.7 %)
SN1E13	1.0×10 ¹³ (11 %)	2.73	250 kW	3.66×10 ¹² (2.7 %)
SN5E13	5.0×10 ¹³ (2.7 %)	1365	2.5 kW	3.66×10 ¹⁰ (2.7 %)

Tablica 3. Popis uzoraka i postavki neutronskog ozračivanja. Oznake Schottky dioda površine 1 mm×1 mm sadrže FN oznaku i dozu ozračivanja, dok oznake polupropusnih Schottky dioda površine 2 mm×2 mm sadrže SN oznaku.

5. Karakterizacija električki aktivnih defekata u 4H-SiC

5.1. Strujno-naponske i kapacitivno-naponske karakteristike n-tip 4H-SiC Schottky dioda



Slika 19. I-V karakteristike n-tipa 4H-SiC Schottky dioda na temperaturi 300 K. Prikazane su karakteristike (a) FN dioda površine 1 mm×1 mm i (b) SN polupropusnih dioda površine 2 mm×2 mm. Reverzne I-V karakteristike su prikazane u umetku. I-V karakteristike izračunate

uz konstantne vrijednosti faktora idealnosti, visina barijere i serijskog otpora (određenih Nordeovom metodom) su prikazane crnom isprekidanom linijom za FN0 i SN0 uzorke.

Schottky dioda	$n_{\rm L}$	$\Phi_{\mathrm{B,L}}\left(\mathrm{eV}\right)$	n	$\Phi_{\rm B}\left({\rm eV}\right)$
FN0			1.02	1.59
FN1E9			1.06	1.53
FN1E10	1.66	1.19	1.40	1.22
FN1E11	1.41	1.28	1.14	1.48
FN1E12	1.26	1.38	1.14	1.46
FN1E13			1.01	1.57
FN5E13			1.02	1.56
SN0			1.02	1.63
SN1E12			1.04	1.58
SN1E13			1.56	1.39

Tablica 4. Faktori idealnosti n i visine potencijalne barijere Φ_B određene iz linearnog dijela log(I)-V karakteristike na temperaturi 300 K (Slika 19). Indeksom L su označene vrijednosti određene iz linearnog područja pri nižim naponima.

I-V karakteristike n-tipa 4H-SiC Schottky dioda korištenih u ovom radu su prikazane na slici 19. Schottky diode su pokazale odličnu ispravljačku karakteristiku, opažene reverzne struje pri naponu od $V_R = -10$ V i temperaturi 300 K su manje od 10 pA. Opažanje vrlo malene reverzne struje je iznimno važno za njihovu primjenu kao detektora, posebice kao detektora za neutrone razvijenih u sklopu E-SiCure projekta [5]. Mala reverzna struja omogućuje visok omjer signala i šuma detektora, tj. opažanje strujnog signala koji se javlja pri upadu čestice u detektor s visokom osjetljivošću i rezolucijom [91]. Također, mala vrijednost reverzne struje je preduvjet za metode tranzijentne spektroskopije korištenih u ovom radu. Kao prvo, za mjerenje kapaciteta područja osiromašenja je potrebno imati dovoljno malu konduktanciju uzorka pri primijenjenim naponima (vidjeti poglavlje *4.2 Strujno-naponska i kapacitivno-naponska karakteristika Schottky diode*). Kao drugo, uhvat nosioca naboja u duboke nivoe ne mora biti zanemariv uz protok nosioca kroz područje osiromašenja (uz reverznu struju) i time ne mora biti ispunjena pretpostavka njihovog zanemarivog uhvata pri analizi mjerenja (3.5). Faktori idealnosti n i visine Schottky barijere Φ_B određeni iz linearnih područja propusnih log(I)-V karakteristika (4.4, 4.5) su navedeni u tablici 4. Vrijednosti faktora idealnosti n blizu jedinične vrijednosti ukazuju kako je dominantan transport termičke emisije elektrona preko Schottky barijere. Schottky diode se odlikuju visokom Schottky barijerom (1.4 eV-1.6 eV).

U slučaju FN1E10, FN1E11 i FN1E12 dioda se primjećuje povećana struja pri nižim naponima, odnosno izbočenje u log(I)-V grafu. Njihova I-V karakteristika se može modelirati kao paralelan spoj dviju Schottky dioda s različitim iznosima Schottky barijere, površina i serijskih otpora [92, 93]. Tung et al. [94] su razmotrili utjecaj postojanja lokaliziranih područja niže Schottky barijere na I-V karakteristiku. Lokalizirani defekti na površini Schottky kontakta mogu uzrokovati smanjenje visine Schottky barijere u okolini defekata te opažanje većih faktora idealnosti n_L i nižih visina barijera $\Phi_{B,L}$. Pri nižim naponima dominira tok struje kroz područja niže Schottky barijere $\Phi_{B,L}$, dok pri većim naponima struja prolazi i kroz ostatak površine s višom barijerom Φ_{B} . Lokalizirana područja niže barijere nisu prisutna kod svih uzoraka jer su navedeni površinski defekti nasumično raspoređeni na površini 4H-SiC. U propusnoj log(I)-V karakteristici FN1E14 i SN5E13 uzoraka se ne primjećuje linearno područje (4.4) zbog utjecaja velikog serijskog otpora.

Kako bismo opisali I-V karakteristiku u cijelom saturacijskom području potrebno je pretpostaviti naponsku ovisnost faktora idealnosti n i serijskog otpora R_S. Izračunate I-V krivulje uz konstantne vrijednosti n i R_S su prikazane crnim isprekidanim linijama na slici 19. Izračunate vrijednosti struje su manje od izmjerenih u saturacijskom području. Opažanje smanjenja serijskog otpora R_S s povećanjem napona se može objasniti smanjenjem otpora epitaksijalnog sloja 4H-SiC zbog injekcije elektrona iz visoko dopiranog supstrata u epitaksijalni sloj [95]. S porastom struje dolazi do porasta koncentracije injektiranih elektrona, odnosno koncentracije slobodnih nosioca naboja unutar epitaksijalnog sloja, i time do smanjenja njegovog otpora.



Slika 20. Ovisnost serijskog otpora n-tipa 4H-SiC Schottky dioda o dozi neutronskog ozračivanja. Prikazane vrijednosti su određene iz Cheungovom metodom [73] iz I-V karakteristika FN i SN Schottky dioda pri naponu 1.2 V-1.3 V na temperaturi 300 K.

Na slici 20 su prikazane vrijednosti serijskog otpora određene Cheungovom metodom iz saturacijskog područja I-V karakteristika. Za usporedbu vrijednosti serijskih otpora je odabrana Cheungova metoda radi njene jednostavne primjene na svim uzorcima. Schottky diode ozračene neutronima s dozama manjim od 10^{13} n/cm² nisu pokazale povećanje serijskog otpora, u slaganju s rezultatima iz literature za danu koncentraciju dopanada [96, 97]. Prema procijeni serijskog otpora iz I-V karakteristika, moguć je utjecaj serijskog otpora na mjerenja kapaciteta Schottky dioda ozračenih dozama 5×10^{13} n/cm² i 10^{14} n/cm². Veće vrijednosti serijskog otpora su primijećene u slučaju SN uzoraka spram FN uzoraka pri istim dozama ozračivanja.



Slika 21. $(1/C)^2$ -V karakteristike (a) FN i (b) SN Schottky dioda na temperaturi 300 K.



Slika 22. Dubinski profili efektivne koncentracije većinskih nosioca naboja n unutar n-tipa 4H-SiC Schottky dioda. Prikazane vrijednosti su određene koristeći izraz (4.19) i C-V karakteristike na temperaturi 300 K (Slika 21).



Slika 23. Utjecaj neutronskog ozračivanja na koncentraciju slobodnih nosioca naboja n unutar n-tipa 4H-SiC Schottky dioda. Prikazane vrijednosti su određene regresijom koristeći izraz (4.17) i C-V karakteristike na temperaturi 300 K (Slika 21).

Slika 21 prikazuje ovisnost $(1/C)^2$ o V karakteristike FN i SN Schottky dioda na temperaturi 300 K. Odstupanje od linearne ovisnosti $(1/C)^2$ o V se primjećuje u slučaju FN5E13, FN1E14 i SN5E13 dioda, dok u slučaju svih ostalih dioda se primjećuju linearne karakteristike u skladu s očekivanjem za prisutnu homogenu koncentraciju dopanada. Opažena odstupanja od linearnosti (1/C)² o V karakteristika mogu se objasniti utjecajem dubokih nivoa usporedive koncentracije s neto koncentracijom dopanada $N_T \sim N_D^+$ - N_A^- i izrazom (4.22). Slike 22 i 23 prikazuju koncentracije većinskih nosioca naboja u ovisnosti o dubini (tj. udaljenosti od Schottky kontakta diode) i dozi neutronskog ozračivanja. Dubinski profili su određeni numeričkom derivacijom C-V karakteristike prema izrazu (4.19), dok vrijednosti na slici 23 su određene linearnom regresijom (4.17) u reverznih napona od -1 V do 0 V kako bi se umanjio utjecaj dubokih nivoa na određene vrijednosti. Pri dozama neutronskog ozračivanja većim od 1012 n/cm2 primjećuje se smanjenje koncentracije slobodnih nosioca naboja zbog unesenih defekata, dok pri manjim dozama nije primijećena razlika spram neozračenih Schottky dioda. 4H-SiC se ponaša kao intrinzičan poluvodič nakon ozračivanja pri dozi od 10¹⁴ n/cm², što je vidljivo prema približno konstantnoj C-V karakteristici. Uhvat elektrona iz vodljive vrpce u unesene akceptorske nivoe rezultira smanjenjem gustoće pozitivnog naboja unutar područja osiromašenja Schottky dioda i koncentracije slobodnih elektrona u neutralnom području izvan područja osiromašenja. Koncentracija slobodnih nosioca naboja n u ovisnosti o dozi neutronskog ozračivanja Φ je dobro opisana linearnom jednakosti [98]:

$$\mathbf{n}(\Phi) = \mathbf{n}_0 - \mathbf{K}\Phi \tag{5.1}$$

gdje je n₀ koncentracija slobodnih nosioca prije ozračivanja i K stopa uklanjanja nosioca naboja. Određene stope uklanjanja u slučaju FN i SN Schottky dioda su 7 cm⁻¹ i 3 cm⁻¹, tim redom. Manja stopa otklanjanja je očekivana u slučaju manje koncentracije dopanada [99]. Određene vrijednosti stopa uklanjanja pri ozračivanju epitermalnim i brzim neutronima K su istog reda veličine kao prethodno iznesene vrijednosti za neutronsko ozračivanje [50]. Razlike u stopama otklanjanja mogu postojati zbog razlike u parametrima ozračivanja ili energijskom spektru neutrona.

Smanjenje koncentracije slobodnih nosioca rezultira povećanjem serijskog otpora poluvodičkog materijala, koje je prethodno opaženo iz I-V karakteristika. Manje koncentracije slobodnih nosioca naboja u slučaju SN uzoraka su u slaganju s opažanim nešto većim serijskim otporima spram FN uzoraka. Određene vrijednosti kontaktnih potencijala i visina potencijalnih barijera su precijenjene u slučaju SN uzoraka i FN5E13 uzorka što ukazuje na moguću

prisutnost utjecaja serijskog otpora na $(1/C^2)$ -V karakteristiku. Prisutnost serijskog otpora uzrokuje vertikalan pomak $(1/C^2)$ -V krivulje, no za dovoljno male vrijednosti $2\pi fR_SC \leq 0.1$ nema utjecaja na njen nagib i određene koncentracije [74]. Dobivanje većih vrijednosti visina barijere također može biti uzrokovano prisutnošću tankog izolacijskog sloja i površinskih stanja na površini poluvodiča, no prema procesu proizvodnje Schottky dioda i iznosima određenih faktora idealnosti je poznato kako nisu prisutni.

5.2. Zamke za većinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC



Slika 24. Z_{1/2} duboki nivo u DLTS spektru neozračenog n-tipa 4H-SiC. Isprekidanom linijama su prikazani izmjereni DLTS spektri, dok su punim linijama označene krivulje nelinearne regresije. Z_{1/2} vrh s proširenjem na niskotemperaturnoj strani može se vrlo dobro opisati s dvije komponente DLTS signala (4.25). Reverzni napon, napon pulsa i širina pulsa su $V_R = -10 V$, V_P =-0.1 V i t_p = 10 ms, tim redom.

U DLTS spektru neozračenog n-tipa 4H-SiC (Slika 24) primjećuje se duboki nivo pri temperaturi oko 300 K, uobičajene oznake $Z_{1/2}$. Njegova aktivacijska energija i udarni presjek za uhvat elektrona određeni iz Arrhenius grafa redom iznose 0.67 ± 0.01 eV i $\sigma_n = 8 \times 10^{-15}$ cm². Na niskotemperaturnoj strani $Z_{1/2}$ vrha se može primijetiti proširenje koje ukazuje na preklapanje više vrhova u spektru, koji nisu razlučeni DLTS tehnikom. $Z_{1/2}$ vrh se može vrlo dobro opisati koristeći dvije komponente DLTS signala kao što vidimo iz usporedbe izmjerenog i simuliranog spektra na slici 24. Izračunate krivulje su određene nelinearnom regresijom uz aktivacijske energije, udarne presjeke za uhvat elektrona i amplitude tranzijenata kao slobodne parametre. $Z_{1/2}$ duboki nivo je pridijeljen prijelazu između dvostruko negativnog i neutralnog stanja (=/0) vakancije ugljika V_C [31, 39]. Dvije komponente DLTS signala su razlučene u radu Capan et al. [41], te pridijeljene (=/0) prijelazima vakancija ugljika na heksagonalnom V_C(h) i kubičnom V_C(k) mjestu u kristalnoj rešetci (ilustriranim na slici 8). U nastavku ćemo primijeniti Laplace DLTS tehniku za razlučivanje prisutnih komponenti DLTS signala. Prednost Laplace DLTS tehnike je izravno opažanje dubokih nivoa kao vrhova u spektru, dok pri prilagodbama rezultati ovise o pretpostavkama modela (broju vrhova i odabranim slobodnim parametrima) [100].



Slika 25. Laplace DLTS spektar n-tipa 4H-SiC na temperaturi $Z_{1/2}$ vrha (300 K). Reverzan napon V_R, napon pulsa V_P i širina pulsa t_P su -10 V, -0.1 V i 10 ms, tim redom.

Tablica 5. Aktivacijske energije E_a , udarni presjeci σ_n i koncentracije N_T dubokih nivoa određeni Laplace DLTS mjerenjima na FN0 Schottky diodi. Udarni presjeci za uhvat elektrona su unutar reda veličine izračunatih vrijednosti.

Duboki nivo	$E_{a}(eV)$	$\sigma_n (cm^2)$	N_{T} (cm ⁻³)
Z ₁ (=/0)	0.566 ± 0.007	3×10 ⁻¹⁵	5.4×10^{11}
Z ₂ (=/0)	0.672 ± 0.005	6×10 ⁻¹⁵	1.8×10^{12}



Slika 26. Arrhenius graf ovisnosti e_n/T^2 o $1/k_BT$ određenih Laplace DLTS tehnikom za $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ duboke nivoe. Prikazani su pravci linearne regresije (3.24).

U Laplace DLTS spektru na temperaturi $Z_{1/2}$ vrha (Slika 25) primjećuju se dva vrha označena sa $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$. Veća energijska rezolucija Laplace DLTS spram DLTS tehnike omogućuje njihovo razlučivanje. Laplace DLTS mjerenjima na nizu temperatura je određen pripadni Arrhenius graf na slici 26. Određene aktivacijske energije i udarni presjeci za uhvat elektrona $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa su navedeni u tablici 5. Navedene koncentracije su određene iz pripadnih amplituda tranzijenata kapaciteta (4.23), koje odgovaraju površini ispod odgovarajućeg vrha u Laplace DLTS spektru. Broj razlučenih komponenti i njihovi parametri su u slaganju sa simuliranim modelom prikazanim na slici 24.

Duljina naponskih pulseva (10 ms) korištenih pri DLTS i Laplace DLTS mjerenjima je dovoljno duga za potpuno popunjavanje dubokih nivoa. U slučaju negativnog-U poredaka dubokih nivoa, tijekom popunjavajućih pulseva dolazi do uhvata dvaju elektrona na pripadnim defektima. Nakon pulsa opaža se tranzijent kapaciteta uzrokovan uzastopnom emisijom dvaju elektrona. Emisija drugog elektrona se događa gotovo instantno spram emisije prvog elektrona zbog veće stabilnosti stanja s dva elektrona. Stoga je brzina promjene kapaciteta (4.24) određena s vjerojatnošću emisije prvog elektrona te određene aktivacijske energije $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa odgovaraju energiji prijelaza (=/-) iz dvostruko u jednostruko negativno stanje vakancije ugljika. Budući da $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ signali potječu od emisije dva elektrona, koncentracije navedene u tablici 5 su dvostruko veće od koncentracija pripadnih vakancija ugljika.



Slika 27. $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ duboki nivoi u Laplace DLTS spektru n-tipa 4H-SiC. Vakancije ugljika su postavljene u neutralno stanje prije mjerenja primjenom reverznog napona na temperaturi 320 K i hlađenjem pod reverznim naponom na temperaturu mjerenja. Korišteni su kratki 100 ns pulsevi koji dio vakancija popunjavaju s jednim elektronom. Broj primijenjenih pulseva i usrednjenih tranzijenata je 10. Reverzan napon V_R i napon pulsa V_P su redom -10 V i -0.1 V.

Za opažanje (-/0) prijelaza vakancija ugljika, potrebno je postaviti ih u metastabilno jednostruko negativno stanje te promatratrati tranzijente kapaciteta pri nešto nižim temperaturama. U radovima Koizumi et al. [101] i Capan et al. [41] su opisane procedure za zamrzavanje vakancija ugljika u neutralnom stanju i njihovog djelomičnog popunjavanja s jednim elektronom koje su korištene u ovom radu. Vakancije ugljika su postavljene u neutralno stanje primjenom reverznog napona (-10 V) na temperaturi 320 K u trajanju oko 5 min. Pri tom reverznom naponu se dogodila emisija dvaju elektrona iz vakancija ugljika, odnosno prijelaz (=/0). Zatim je Schottky dioda pod primijenjenim reverznim naponom ohlađena na temperaturu mjerenja (220 K-270 K) pri čemu su vakancije ugljika ostale u neutralnom stanju. Primjenom kratkih pulseva (duljine $t_P = 100$ ns) je dio vakancija ugljika popunjen s jednim elektronom. Zatim je

izmjerena promjena kapaciteta nakon pulsa uzrokovana emisijom elektrona iz jednostruko negativnih vakancija ugljika. Pražnjenje dvostruko negativnih vakancija ugljika se ne opaža u promatranom temperaturnom rasponu (220 K-270 K) zbog veće energije vezanja dva elektrona pri negativnom-U poretku nivoa i vrlo male vjerojatnosti emisije. Tranzijent kapaciteta izmjeren navedenom procedurom je korišten za izračun Laplace DLTS spektra prikazanog na slici 27. U Laplace DLTS spektru se primjećuju dva duboka nivoa koji su pridijeljeni (-/0) prijelazu vakancija ugljika na heksagonalnom i kubičnom mjestu u kristalnoj rešetci te označeni sa $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$, tim redom.

U prethodnom radu Capan et al. [41], mjerenjima na neozračenoj 4H-SiC Schottky diodi istog tipa kao FN0 Schottky dioda su određene aktivacijske energije $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa 0.59 eV i 0.67 eV te aktivacijske energije $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa 0.48 eV i 0.41 eV, tim redom. Opaženi su omjeri amplituda $[Z_2(=/0)]:[Z_1(=/0)] = 4.4 \pm 0.2$ i $[Z_2(-/0)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:[Z_1(-1)]:$ (0)] = 2.5 ± 0.7 [41]. Rezultati karakterizacije Z₁(=(0) i Z₂(=(0) dubokih nivoa su vrlo dobro opisani DFT izračunima i modelom vakancije ugljika. Veća stabilnost $V_{C}^{=}(k)$ spram $V_{C}^{=}(h)$ objašnjava opažanje veće koncentracije $Z_2(=/0)$ dubokog nivoa spram koncentracije $Z_1(=/0)$ dubokog nivoa. $V_{C}(k)$ pridijeljen $Z_{2}(=/0)$ dubokom nivou ima veću vjerojatnost za formiranje tijekom epitaksijalnog rasta zbog niže energije osnovnog stanja spram V_C(h) pridijeljenog $Z_1(=/0)$ dubokom nivou (vidjeti energije osnovnog stanja $V_{\rm C}^{-}$ na slici 8 (c) [42]). Također, usporedba energija prijelaza $V_{C}(k)/V_{C}(h)$ određenih DFT izračunima [41] i foto-EPR mjerenjima [32] s aktivacijskim energijama $Z_2(=/0)/Z_1(=/0)$ i $Z_2(-/0)/Z_1(-/0)$ dubokih nivoa podržava njihovu identifikaciju. Pri kratkim plusevima (100 ns) ne dolazi do potpunog popunjavanja $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa. Opažanje manjeg omjera amplituda $[Z_2(-/0)]$: $[Z_1(-/0)]$ /0)] spram iznosa $[Z_2(=/0)]:[Z_1(=/0)]$ omjera koncentracija je objašnjeno većim udarnim presjekom za uhvat elektrona u $Z_1(-/0)$ duboki nivo spram uhvata u $Z_2(-/0)$ duboki nivo. Kinetika uhvata elektrona u pripadne duboke nivoe uzrokuje opažanje manjeg omjera amplituda $[Z_2(-/0)]$: $[Z_1(-/0)]$ spram omjera koncentracija $[V_C(k)]$: $[V_C(h)]$. Na navedene rezultate ćemo se nadovezati u nastavku.

Omjeri amplituda $[Z_2(=/0)]:[Z_1(=/0)]$ i $[Z_2(-/0)]:[Z_1(-/0)]$ određeni Laplace DLTS mjerenjima na FN0 Schottky diodi su 3.2 ± 0.2 i 2.2 ± 0.3 (slike 25 i 27), tim redom. Pri usporedbi različitih serija uzoraka, koncentracije dubokih nivoa se mogu razlikovati jer ovise o uvjetima rasta epitaksijalnog sloja. U ovom radu nije navedeno određivanje aktivacijskih energija $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa zbog manjeg broja mjerenja na FN0 Schottky diodi i time veće nepouzdanosti određenih energija spram rezultata prethodne studije. Međutim, očekivano je slaganje kao što se opaža za vrijednosti aktivacijskih energija $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa. Potvrđen je negativan-U poredak dubokih nivoa i njihovo slaganje s modelom vakancije ugljika.



5.2.1. Kinetika uhvata elektrona

Slika 28. Ovisnost amplitude $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa o duljini pulsa t_P. Prikazane su krivulje nelinearne regresije (4.27) i točke određene Laplace DLTS mjerenjima na temperaturi 300 K. Korišten je reverzan napon V_R = -10 V i napon pulsa V_P = -0.1 V.

Ovisnost amplituda $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa o duljini pulsa t_P je prikazana na slici 28. Saturacija obiju njihovih amplituda $\Delta C(t_P)$ se primjećuje pri pulsevima duljim od 10 µs. Budući da pozicija Fermijevog nivoa (~0.27 eV ispod minimuma vodljive vrpce pri neto koncentraciji dopanada 5×10¹⁴ cm⁻³ i temperaturi 300 K) je značajno iznad pozicija dubokih nivoa unutar energijskog procijepa, za dovoljno dugi naponski puls dolazi do potpunog popunjavanja dubokih nivoa. Amplituda $Z_1(=/0)$ signala je blizu saturacijske vrijednosti i pri najmanjim korištenim širinama pulsa (~100 ns). Stoga, iz ovisnosti amplitude ΔC o duljini pulsa t_P nije moguće odrediti udarni presjek $Z_1(=/0)$ dubokog nivoa prilagodbom izraza (4.27). Minimalna duljina pravokutnog naponskog pulsa koju je moguće koristiti ovisi o kapacitetu i otporu Schottky diode te korištenim koaksijalnim kablovima i generatoru pulsa.



Slika 29. Ovisnost (a) amplituda $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa o duljini pulsa t_p te (b) promjene reverznog kapaciteta C_R o duljini pulsa t_p pri temperaturi 210 K. Prije mjerenjima na FN0 Schottky diodi, vakancije ugljika su postavljene u neutralno stanje prema proceduri opisanoj u tekstu. Vrijednosti amplituda i promjene reverznog kapaciteta su određene prilagodbom dvaju eksponencijalnih funkcija uz poznate vjerojatnosti emisije $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa ($e_{n,1} = 0.77 \text{ s}^{-1}$ i $e_{n,2} = 9.9 \text{ s}^{-1}$) te y pomaka. Promjena kapaciteta nakon naponskog pulsa je ilustrirana u umetku slike (b). Reverzan napon, napon pulsa i broj usrednjenih tranzijenata kapaciteta iznose -10 V, -0.1 V i 3, tim redom.
Na slici 29 je prikazan trend smanjenja amplituda $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa i reverznog kapaciteta FN0 Schottky diode pri povećanju duljine pulsa t_P. Prije mjerenja vakancije ugljika su postavljene u neutralno stanje prethodno opisanom procedurom. Prikazana promjena reverznog kapaciteta ΔC_R je proporcionalna koncentraciji vakancija ugljika u dvostruko negativnom stanju, dok amplitude $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ dubokih nivoa su proporcionalne koncentraciji vakancija ugljika u jednostruko negativnom stanju u trenutku završetka naponskog pulsa. Emisija elektrona iz dvostruko negativnog stanja vakancije ugljika je zanemariva na temperaturi mjerenja (210 K), stoga dvostruki uhvat elektrona uzrokuje smanjenje reverznog kapaciteta. Vjerojatnosti uhvata se nisu uspjele pouzdano odrediti prilagodbom modela s negativnim-U poretkom dubokih nivoa (3.9-3.11) zbog malih amplituda signala i vrlo brzog uhvata elektrona u neutralne vakancije ugljika. Međutim, opaženi trend promjena kapaciteta čvrsto potvrđuje negativan-U poredak dubokih nivoa. Koncentracija dvostruko negativnih vakancija ugljika u metastablinom jednostruko negativnom stanju se smanjuje.



Slika 30. Promjena reverznog kapaciteta C_R u ovisnosti o ukupnoj duljini primijenjenog pulsa t_P pri temperaturi 120 K. Prije mjerenja provedena je procedura opisana u tekstu za postavljanje vakancije ugljika u neutralno stanje. Primijenjen reverzan napon je $V_R = -10$ V, a napon pulsa $V_P = -0.1$ V. Prikazane su tri eksponencijalne funkcije čiji zbroj odgovara krivulji nelinearne regresije (5.3).

Za dobivanje informacije o vrlo brzom uhvatu u neutralna stanja vakancije ugljika i $Z_1(=/0)$ duboki nivo, provedena su mjerenja udarnih presjeka na nižim temperaturama (100 K–160 K) pri kojim očekujemo sporiji uhvat elektrona. Vakancije ugljika su postavljene u neutralno stanje primjenom reverznog napona -10 V na temperaturi 320 K te hlađenjem FN0 Schottky diode s primijenjenim naponom na temperaturu mjerenja (kao što je prethodno opisano). Zatim je na Schottky diodu primijenjen niz naponskih pulseva. Duljine pulseva t_P su odabrane tako da njihov ukupan zbroj eksponencijalno raste s rednim brojem pulsa, odnosno tako da su njihove sume jednoliko raspoređene na logaritamskoj skali. Kapacitet FN0 Schottky diode je izmjeren nakon svakog pojedinog pulsa te promatran u ovisnosti o ukupnoj duljini primijenjenih pulseva. Emisije elektrona iz vakancija ugljika su zanemarive tijekom mjerenja u rasponu temperatura 100 K – 160 K, stoga izmjerene promjene kapaciteta potječu isključivo od uhvata elektrona. Uz zanemarivanje λ duljine, promjena kapaciteta za povećanje koncentracije jednostruko n_{q=-1} i dvostruko n_{q=-2} popunjenih vakancija ugljika glasi (4.28):

$$\Delta C_{R}(t_{P}) = \frac{w_{R}^{2} - w_{P}^{2}}{w_{R}^{2}} \frac{C_{R}}{2N_{D}} \left(-n_{q=-1}(t_{P}) - 2n_{q=-2}(t_{P}) \right)$$
(5.2)

Budući da je emisija elektrona iz dubokih nivoa vrlo mala pri vrlo niskim temperaturama, promjena popunjenosti stanja vakancije ugljika tijekom pulsa je opisana rješenjem (3.9-3.11). Uzimajući dodatno u obzir kako uhvat u neutralno stanje je puno brži od uhvata u jednostruko negativno stanje ($c_{q=0} \gg c_{q=-1}$), za promjenu kapaciteta dobivamo:

$$\Delta C_{R}(t_{P}) = \frac{w_{R}^{2} - w_{P}^{2}}{w_{R}^{2}} \frac{C_{R}N_{T}}{2N_{D}} \left(2 - e^{-c_{q=0}t_{P}} - e^{-c_{q=-1}t_{P}}\right)$$
(5.3)

Izmjerena ovisnost reverznog kapaciteta ΔC_R o ukupnoj duljini primijenjenih pulseva t_P je prikazana na slici 30. Njena promjena može se vrlo dobro opisati prilagodbom zbroja triju eksponencijalnih funkcija (crna linija). Prema izrazu (5.3), očekujemo ukupno četiri eksponencijalne funkcije koje odgovaraju (-/0) i (=/-) prijelazima V_C(k) i V_C(h). Međutim, uhvat u Z₁(-/0) i Z₂(-/0) duboke nivoe nije moguće razlučiti u dostupnom rasponu duljina pulseva te stoga zbroj njihovih doprinosa je modeliran jednom eksponencijalnom funkcijom. Druge dvije eksponencijalne funkcije su pridijeljene uhvatu u Z₁(=/-) i Z₂(=/-) duboke nivoe, među kojima manju vjerojatnost uhvata ima Z₂(=/-) duboki nivo (Slika 28). Pri određivanju udarnih presjeka na nižim temperaturama (Slika 30) su korištene oznake (=/-) prijelaza jer pripadne eksponencijalne promjene reverznog kapaciteta su uzrokovane uhvatom jednog elektrona, za razliku metode korištene na višim temperaturama (Slika 28) pri kojoj promatrani tranzijenti kapaciteta su uzrokovani uzastopnom emisijom dva elektrona (=/0). U prethodnom radu Capan et al. [41], mjerenjima u temperaturnom rasponu 300 K – 350 K je određen udarni presjek za uhvat elektrona u $Z_2(=/0)$ duboki nivo (3.15), s visinom barijere $\Delta E_{\sigma} = 0.029 \pm 0.005$ eV i udarnim presjekom u visokotemperaturnoj granici $\sigma_{\infty} = 2 \times 10^{-16}$ cm². Amplituda $Z_2(=/0)$ dubokog nivoa (Slika 28) je proporcionalna koncentraciji vakancija ugljika u dvostruko negativnom stanju koja se prema izrazu (3.11) povećava tijekom popunjavajućih pulseva ovisno o vjerojatnosti uhvata u neutralno i negativno stanje vakancije ugljika. Zbog puno sporijeg uhvata u negativno stanje spram uhvata u neutralno stanje (c_{q=-1} « c_{q=0}), navedene vrijednosti odgovaraju uhvatu elektrona u negativno stanje vakancije ugljika. U ovom radu, mjerenjima pri nižim temperaturama smo uspjeli odrediti udarne presjeke za uhvat elektrona u oba $Z_1(=/-)$ i $Z_2(=/-)$ duboka nivoa.



Slika 31. Temperaturna ovisnost udarnog presjeka za uhvat elektrona u $Z_2(=/-)$ i $Z_1(=/-)$ duboke nivoe. Linijama su označeni rezultati nelinearne regresije za termalno aktiviran udarni presjek (3.15).

Duboki nivo	$\Delta E_{\sigma} (eV)$	$\sigma_{\infty} (cm^2)$
Z ₁ (=/-)	0.034 ± 0.005	3×10 ⁻¹⁵
Z ₂ (=/-)	0.051 ± 0.004	6×10 ⁻¹⁶
Z ₁ (-/0), Z ₂ (-/0)	$\lesssim 0.01$	≥ 3×10 ⁻¹⁵

Tablica 6. Vrijednosti barijera za uhvat E_{σ} i udarnih presjeka za uhvat elektrona σ_{∞} u granici $T \rightarrow \infty$ određenih mjerenjima udarnog presjeka pri niskim temperaturama (100 K-160 K).

Smanjenje koncentracije slobodnih nosioca naboja pri niskim temperaturama je uzeto u obzir pri izračunu udarnih presjeka iz vjerojatnosti uhvata (3.12). Pri niskim temperaturama, koncentracija slobodnih nosioca naboja je manja od neto koncentracije dopanada jer donori u neutralnom području izvan područja osiromašenja nisu potpuno ionizirani. Njihova koncentracija n = [N_C(k, q=+1)] + [N_C(h,q=+1)] je manja od ukupne koncentracije donora [N_C(k)] + [N_C(h)] za faktor (3.1). Pri izračunu koncentracija slobodnih nosioca naboja su korištene koncentracije dopanada određene iz C-V karakteristike na temperaturi mjerenja, pretpostavka podjednakih koncentracija N_C(k) i N_C(h), njihove aktivacijske energije (redom 0.092 eV i 0.052 eV) i faktori degeneracije g = 2 [50, 102]. Vrijednost koncentracije određena iz C-V mjerenja odgovara ukupnoj koncentraciji dopanada budući da električno polje dovodi do potpune ionizacije donora unutar područja osiromašenja. Arrhenius graf udarnih presjeka za uhvat elektrona u Z₁(=/-) i Z₂(=/-) duboke nivoe je prikazan na slici 31. Iz njihove temperaturne ovisnosti (3.15) su određeni iznosi pripadnih barijera E_a i udarnih presjeka u granici visokih temperatura σ_{∞} (Tablica 6).

Koristeći određene aktivacijske energije E_a (Tablica 5), barijere za uhvat ΔE_{σ} (Tablica 6) i izraz (3.22) se mogu izračunat položaji (=/-) prijelaza $V_C(h)$ i $V_C(k)$ unutar energijskog procijepa $E_C - 0.54 \text{ eV}$ i $E_C - 0.62 \text{ eV}$, tim redom. Donji limit udarnog presjeka za uhvat elektrona σ_{∞} u neutralne vakancije ugljika je procijenjen na $3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$. Rezultati predlažu postojanje vrlo male ($\leq 0.01 \text{ eV}$) ili iščezavajuće barijere za uhvat elektrona u neutralno stanje vakancije. Stoga, doprinos barijere za uhvat je zanemariv te energije akceptorskih nivoa $V_C(-/0)$ unutar energijskog procijepa su dane njihovim aktivacijskim energijama. Prema izmjerenim položajima unutar energijskog procijepa, vrijednosti negativnog-U poretka $V_C(h)$ i $V_C(k)$ su - $0.06 \sim^\circ$ -0.11 eV i - $0.21 \sim -0.23 \text{ eV}$, tim redom. Dobivene vrijednosti su u slaganju s prethodnim DFT izračunima koji pokazuju veću negativnu-U vrijednost za $V_C(k)$ spram $V_C(h)$ [42, 103].

Primjećuju se manje barijere i veći udarni presjeci za uhvat elektrona u V_C(h) nego u slučaju V_C(k). Kao što je opisano u radu Capan et al. [41], razlika u udarnim presjecima V_C(h) i V_C(k) može proizlaziti i iz lokalizacije stanja pri dnu vodljive vrpce u 4H-SiC uz svojstva stanja vakancije ugljika. Prema DFT izračunima, valne funkcije stanja pri dnu vodljive vrpce su više lokalizirane na Si(k)-C(k) dimerima spram lokalizacije na Si(h)-C(h) dimeru. Budući da je V_C(h) okružen s tri Si(k) i jednim Si(h) radikalom, očekujemo veće preklapanje između akceptorskih stanja lokaliziranih na V_C (h) i stanja pri minimumu vodljive vrpce spram preklapanja u slučaju V_C (k) koji ima samo jedan Si(k) i tri Si(h) radikala. Veće preklapanje početnih i konačnih stanja pri prijelazu vodi na veće udarne presjeke. Navedeno objašnjenje dodatno podržava identifikaciju Z₁(=/0) i Z₂(=/0) dubokih nivoa kao prijelaza V_C(h) i V_C(k).

5.3. Zamke za većinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC uvedene neutronskim zračenjem



Slika 32. DLTS spektri (a) FN i (b) SN Schottky dioda različitih doza neutronskog ozračivanja. Schottky diode su ohlađene na početnu temperaturu mjerenja bez primijenjenog napona. Mjerenja su provedena u temperaturnim rasponima do (a) 380 K i (b) 450 K. Korišteni reverzan napon, napon pulsa i duljina pulsa redom iznose $V_R = -10 V$, $V_P = -0.1 V$ i $t_p = 10$ ms. Emisija prikazanih spektra je 2.5 s⁻¹.

Tablica 7. Aktivacijske energije E_a i udarni presjeci za uhvat elektrona σ_n dubokih nivoa unesenih neutronskim ozračivanjem. Njihove vrijednosti su određene DLTS mjerenjima na FN1E13 i SN1E13 Schottky diodama. Udarni presjeci za uhvat elektrona su unutar reda veličine izračunatih vrijednosti.

	FN1E13		SN1E13	
Duboki nivo	E _a (eV)	$\sigma_n (cm^2)$	E _a (eV)	$\sigma_n (cm^2)$
EH1	0.43 ± 0.01	1×10 ⁻¹⁴	0.40 ± 0.01	1×10 ⁻¹⁵
EH3	0.71 ± 0.03	1×10 ⁻¹⁵	0.71 ± 0.04	1×10 ⁻¹⁵
EH4			0.89 ± 0.01	3×10 ⁻¹⁵

Na slici 32 su uspoređeni DLTS spektri Schottky dioda ozračenih epitermalnim i brzim neutronima te neozračenih dioda. Unos dubokih nivoa neutronskim ozračivanjem je primijećen pri dozama većim od 10¹² n/cm², dok pri manjim dozama njihove koncentracije su premalene za opažanje DLTS tehnikom. Neutronsko zračenje povećava koncentraciju $Z_{1/2}$ dubokog nivoa te unosi dodatne duboke nivoe označene s EH1, EH3 i EH4. U tablici 7 su navedene njihove aktivacijske energije i udarni presjeci za uhvat elektrona. Prema određenim vrijednostima, EH1 i EH3 duboki nivoi odgovaraju dubokim nivoima opaženim nakon ozračivanja elektronima niske energije (80 - 210 keV) [20, 58] i ionskih implantacija [14, 40, 54, 55]. Energije brzih neutrona su puno veće od potrebnih za pomak ugljikovih i silicijevih atoma u 4H-SiC kristalu tijekom provedenog ozračivanja, stoga očekujemo prisutnost (-3/=) i (=/-) prijelaza vakancija silicija V_{Si} u DLTS spektru na temperaturama EH1 i EH3 dubokih nivoa. U nastavku ćemo detaljnije proučiti EH1 i EH3 duboke nivoe te procedurama koje uključuju zagrijavanje i primjenu napona provjeriti prisutnost dodatnih dubokih nivoa uz navedene duboke nivoe vakancija silicija. EH4 duboki nivo se primjećuje u DLTS spektru izmjerenom u temperaturnom rasponu do 450 K (Slika 32 (b)). U prethodnim studijama [20, 40, 104], EH4 duboki nivo je pridijeljen kompleksu defekata. Nedavno je predložen model za EH4 vrh koji se sastoji od tri (+/0) prijelaza para ugljikovog anti-site defekta i ugljikove vakancije C_{Si}-V_C u tri energijski različite konfiguracije [105]. Međutim, ostavljena je mogućnost da uz prijelaze Csi-V_C širokom EH4 vrhu doprinose i prijelazi drugih defekata, kao što je par vakancija V_{Si}-V_C.

Stope unosa η dubokih nivoa su određene prilagodbom linearne ovisnosti njihovih koncentracija N_T o dozi neutronskog ozračivanja Φ :

$$N_{\rm T} = \eta \Phi + N_{\rm T.0} \tag{5.4}$$

gdje je N_{T,0} koncentracija u neozračenom 4H-SiC. Vrijednosti stopa unosa EH1, $Z_{1/2}$ i EH3 dubokih nivoa (0.08/0.09 cm⁻¹, 0.75/1.58 cm⁻¹ i 1.14/0.47 cm⁻¹ u slučaju FN/SN Schottky dioda, tim redom) su istoga reda veličine kao u slučaju EH1, $Z_{1/2}$ i EH3 dubokih nivoa unesenih ozračivanjem elektronima [54, 55] i red veličine manje nego u slučaju ozračivanja protonima [55, 106]. Opažanje kako ozračivanja i implantacije iona različitih tipova čestica i energija unose iste duboke nivoe sa sličnim omjerima koncentracija ukazuje kako se radi o jednostavnim točkastim defektima.



Slika 33. Laplace DLTS spektri neozračene FN0 Schottky diode te ozračenih FN1E12 i FN1E13 Schottky dioda na temperaturi 300 K. Naponske postavke su: reverzan napon $V_R = -10 V$, napon pulsa $V_P = -0.1 V$ i širina pulsa $t_p = 10 ms$. Spektri su vertikalno pomaknuti radi bolje preglednosti.

U Laplace DLTS spektru na temperaturi $Z_{1/2}$ dubokog nivoa (Slika 33) primjećuje se proširenje dva razlučena vrha i povećanje njihovih koncentracija s povećanjem doze neutronskog ozračivanja. S povećanjem širine vrhova u Laplace DLTS spektru dolazi do povećanja nepouzdanosti određenih emisija. Uzrok povećanju širine $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ vrhova može biti šira raspodjela emisija unesenih vakancija ugljika zbog njihove perturbacije s okolnim defektima ili unos dodatnih nerazlučenih dubokih nivoa s emisijama bliskim emisijama $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa. Izazovno je razlučiti veći broj dubokih nivoa bliskih emisija. Laplace DLTS spektri izračunati FLOG numeričkom metodom sadrže najmanji broj vrhova koji dobro opisuju izmjeren tranzijent kapaciteta uz dani omjer signala i šuma [76].



Slika 34. Koncentracije $Z_1(=/0)$, $Z_2(=/0)$ i $Z_{1/2}$ dubokih nivoa u ovisnosti o dozi neutronskog ozračivanja FN Schottky dioda [107]. $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ koncentracije su određene iz Laplace DLTS i C-V mjerenja na temperaturi 300 K. Koncentracije $Z_{1/2}$ su određene iz amplituda DLTS signala (emisije 50 s⁻¹) i C-V mjerenja na temperaturama maksimuma $Z_{1/2}$ vrha. Efekt λ duljine je uzet u obzir [81]. Koncentracija pomaknutih atoma određena Fluka softwareom [89] je korištena kao procjena ukupne koncentracije vakancija (isprekidana siva linija).

Ovisnost koncentracija $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ dubokih nivoa o dozi ozračivanja FN Schottky dioda je prikazana na slici 34. Prikazane koncentracije $Z_2(=/0)$ i $Z_{1/2}$ dubokih nivoa su približno jednake zbog veće koncentracije $Z_2(=/0)$ spram $Z_1(=/0)$ dubokog nivoa. Određena stopa unosa $Z_2(=/0)$ dubokog nivoa je približno dvostruko veća od stope unosa $Z_1(=/0)$ dubokog nivoa. Premda veća stabilnost $V_C(k)$ spram $V_C(h)$ pogoduje većoj koncentraciji $Z_2(=/0)$ spram $Z_1(=/0)$ dubokog nivoa [41], očekivane su ugrubo podjednake stope unosa $V_C(k)$ i $V_C(h)$ jer razlika energija njihovih osnovnih stanja je puno manja od energija upadnih brzih neutrona. Stoga, veća stopa unosa $Z_2(=/0)$ dubokog nivoa može se objasniti prisutnošću dodatnog nerazlučenog dubokog nivoa koji doprinosi amplitudi $Z_2(=/0)$ vrha u Laplace DLTS spektru ili postojanjem različitih kinetika unosa $V_C(k)$ i $V_C(h)$.



Slika 35. Laplace DLTS spektri FN1E13 Schottky diode (10^{13} n/cm^2) na temperaturama (a) 210 K i (b) 350 K. Naponske postavke su: reverzan napon V_R = -10 V, napon pulsa V_P = -0.1 V i širina pulsa t_p = 10 ms.

Tablica 8. Aktivacijske energije E_a i udarni presjeci σ_n dubokih nivoa razlučenih Laplace DLTS mjerenjima na temperaturi EH1 vrha. Mjerenja su provedena na FN1E13 i SN1E13 Schottky diodama.

	FN1E13		SN1E13	
Duboki nivo	$E_a(eV)$	$\sigma_n (cm^2)$	$E_a(eV)$	$\sigma_n (cm^2)$
EH11	0.40 ± 0.03	3×10 ⁻¹⁶	0.41 ± 0.03	5×10 ⁻¹⁶
EH1 ₂	0.397 ± 0.003	2×10 ⁻¹⁵	$0.421{\pm}\ 0.001$	5×10 ⁻¹⁵

Na slici 35 su prikazani Laplace DLTS spektri na temperaturama EH1 i EH3 dubokih nivoa. Laplace DLTS tehnikom su razlučene dvije komponente EH1 vrha u DLTS spektru, označene s EH1₁ i EH1₂ (Slika 35 (a)). Aktivacijske energije i udarni presjeci za uhvat elektrona EH1₁ i EH1₂ dubokih nivoa (Tablica 8) su bliski vrijednostima određenim u radu Bathen et al. [14] za (-3/=) prijelaze $V_{si}(h)$ i $V_{si}(k)$, tim redom. Veća EH1₂ koncentracija spram koncentracije EH1₁ dubokog nivoa može se objasniti preferiranim unosom $V_{si}(k)$ spram $V_{si}(h)$ pri neutronskom ozračivanju [108] i postojanjem dodatnog nerazlučenog dubokog nivoa s emisijom bliskom emisiji EH1₂ dubokog nivoa. Laplace DLTS mjerenjima na temperaturi EH3 vrha nisu razlučene dodatne komponente DLTS signala (Slika 35 (b)).

5.3.1. Doprinosi DLTS signalu na temperaturi EH3 dubokog nivoa

U radu Bathen et al. [14], opažene su podjednake koncentracije dubokih nivoa u DLTS spektru pridijeljenih $V_{Si}(-3/=)$ i $V_{Si}(=/-)$ prijelazima te podjednake koncentracije komponenti u Laplace DLTS spektru pridijeljenih (-3/=) prijelazu vakancija silicija na heksagonalnom $V_{Si}(h)$ i kubičnom $V_{Si}(k)$ mjestu u kristalnoj rešetci. Očekivano je opaziti podjednake koncentracije dubokih nivoa vakancije silicija budući da se pri $V_{Si}(-3/=)$ i $V_{Si}(=/-)$ prijelazima odvija emisija jednog elektrona iz istog defekta. U prethodnim studijama [32,54], korelacije među njihovim podjednakim koncentracija EH3 dubokog nivoa spram EH1 dubokog nivoa ukazuje na prisutnost dodatnog defekta koji doprinosi DLTS signalu na temperaturi EH3 dubokog nivoa. Odnosno, opažana veća koncentracija EH3 dubokog nivoa može se objasniti zbrojem doprinosa $V_{Si}(=/-)$ i prijelaza dodatnih nerazlučenih defekta.

U radu Brodar et al. [63], iznesena je detaljna usporedba dubokih nivoa unesenih neutronskim ozračivanjem s dubokim nivoima unesenih implantacijom 7.5 MeV C i 2 MeV He iona. U ion implantiranom 4H-SiC je primijećen pomak maksimuma profila EH3 koncentracije prema većim dubinama spram maksimuma profila EH1 dubokog nivoa, koji ukazuje kako dodatni defekt odgovara kompleksu defekata koji uključuje međupoložajne atome. Blagi pomak između maksimuma profila vakancija i međupoložajnih atoma postoji zbog prijenosa količine gibanja s upadnih iona na atome 4H-SiC tijekom ionske implantacije [109].



Slika 36. DLTS spektri FN1E13 Schottky diode izmjereni nakon zagrijavanja do temperature 380 K i 450 K. Schottky dioda je ohlađena na početnu temperaturu mjerenja bez primijenjenog napona. Korišteni reverzan napon, napon pulsa i duljina pulsa redom iznose $V_R = -10 \text{ V}, V_P = -0.1 \text{ V}$ i $t_p = 10 \text{ ms}$. Emisija prikazanih spektra je 50 s⁻¹.

Nakon zagrijavanja FN1E13 Schottky diode na temperaturu 450 K u trajanju od 30 min i jednog DLTS mjerenja u temperaturnom rasponu do 450 K, izmjereni DLTS spektri su stabilni. Odnosno, ne primjećuje se značajna promjena koncentracija dubokih nivoa tijekom sljedećih uzastopnih DLTS mjerenja. U DLTS spektru (Slika 36) se primjećuje smanjenje koncentracije EH3 vrha nakon zagrijavanja do temperature 450 K koje može ukazivati na povezanost navedenog dodatnog defekta s međupoložajnim atomima ugljika. Smanjenje koncentracije

može se odviti putem reakcije defekta koja uključuje međupoložajne atome ugljika ili njegovom transformacijom u drugu stabilniju konfiguraciju s drugačijim energijskim nivoima. Međupoložajni atomi ugljika su mobilni u 4H-SiC pri temperaturama iznad ~450 K, dok ostali točkasti defekti (međupoložajni atomi silicija Si_I, vakancije V_C/V_{Si} i anti-site defekti C_{Si}/Si_C) postaju mobilni na višim temperaturama (≥ 650 K) [110]. Doprinos DLTS signalu na temperaturi EH3 dubokog nivoa od strane defekta koji uključuje međupoložajne atome će se odvojeno označavati oznakom X u nastavku.

5.3.2. Duboki nivoi metastabilnog M-centra



Slika 37. (a) DLTS spektri FN1E13 Schottky diode u temperaturnom rasponu do 450 K s Mcentrom u konfiguracijama A i B. (b) Razlika dvaju DLTS signala s M-centrom u konfiguraciji A i konfiguraciji B [63]. Doprinos defekta koji uključuje međupoložajne atome na temperaturi EH3 dubokog nivoa je označen s X. Reverzan napon, napon pulsa i duljina pulsa su $V_R = -10$ $V, V_P = -0.1 V$ i $t_P = 10$ ms, tim redom. Prikazana je emisija 2.5 s⁻¹.

Duboki nivo	E _a (eV)	$\sigma_n (cm^2)$
M1	0.43 ± 0.02	1×10 ⁻¹⁴
M2	0.70 ± 0.06	3×10 ⁻¹⁴
M3	~0.72	~2×10 ⁻¹⁵

Tablica 9. Aktivacijske energije E_a i udarni presjeci za uhvat elektrona σ_n dubokih nivoa Mcentra.

Prisutnost metastabilnog M-centra u n-tipu 4H-SiC nakon neutronskog ozračivanja je ispitana koristeći procedure koje uključuju zagrijavanje i primjenu napona na Schottky diodi. M-centar je transformiran u konfiguraciju B hlađenjem s temperature 450 K na početnu temperaturu DLTS mjerenja (~100 K) bez primijenjenog napona, dok njegova transformacija u konfiguraciju A je postignuta primjenom napona (-30 V) na temperaturi 340 K. DLTS spektri s M-centrom u konfiguracijama A i B su prikazani na slici 37 (a). Doprinosi DLTS signalu od razlučenih dubokih nivoa M-centra su označeni odvojeno od prethodno razlučenih dubokih nivoa. Razlika među prikazanim DLTS spektrima (Slika 37 (b)) je u prvoj aproksimaciji uzrokovana različitim dubokim nivoima M-centra u dvije različite konfiguracije te se iz nje mogu jasno razlučiti duboki nivoi M-centra kao vrhovi u spektru. M1 i M3 duboki nivoi Mcentra u konfiguraciji A su opaženi na temperaturama EH1 i EH3 dubokih nivoa, dok na temperaturi Z_{1/2} dubokog nivoa je opažen M2 duboki nivo u konfiguraciji B. Primijećene su podjednake koncentracije (amplitude) M1 i M2 dubokih nivoa, što je očekivano za prijelaze istog defekta s pozitivnim-U poretkom energijskih nivoa. Opažena amplituda M3 dubokog nivoa je nešto manja zbog djelomičnog prijelaza M-centra u konfiguraciju A tijekom DLTS mjerenja pri temperaturama iznad 300 K. Aktivacijske energije M1 i M2 dubokih nivoa su određene koristeći razliku DLTS signala, dok aktivacijska energija M3 dubokog nivoa je procijenjena iz položaja EH3+M3+X vrha u spektru zbog većeg broja dostupnih točaka za regresiju u Arrhenius grafu. Broj točaka u Arrhenius grafu određenih koristeći razliku DLTS spektra nije bio dovoljan zbog prethodno spomenutog prijelaza M-centra u konfiguraciju A tijekom DLTS mjerenja iznad 300 K. Vrijednosti aktivacijskih energija i udarnih presjeka za uhvat elektrona su navedene u tablici 9. Unos metastabilnog M-centra neutronskim zračenjem je po prvi puta opažen u radu Brodar et al. [63]. Prethodno je njegov unos bio opažen samo u slučaju ozračivanja protonima i elektronima.



Slika 38. Ovisnost EH1 i EH1+M1 amplituda DLTS signala (emisije 50 s⁻¹) o duljini pulsa t_P [63]. Prije mjerenja na temperaturi 210 K, FN1E13 Schottky dioda je ohlađena s temperature 340 K s primijenjenim reverznim naponom -10 V (Konfiguracija A M-centra) ili s temperature 450 K bez primijenjenog napona (Konfiguracija B M-centra). Amplitude M1 dubokog nivoa su određene razlikom EH1+M1 i EH1 amplituda DLTS signala. Korišteni su reverzan napon -10 V i napon pulsa -0.1 V.

Na slici 38 je prikazana ovisnost EH1 i EH1+M1 amplituda DLTS signala o duljini pulsa t_P te njihova razlika koja odgovara amplitudi M1 dubokog nivoa. Prilagodbom eksponencijalnih funkcija (4.27) nije bilo moguće odrediti pripadne vjerojatnosti uhvata. Međutim, primjećuje se brže postizanje saturacije u slučaju M1 dubokog nivoa spram EH1 dubokog nivoa te jasno su opažena dva doprinosa različitih defekata.



Slika 39. Laplace DLTS spektri FN1E13 Schottky diode na temperaturi 210 K pri A i B konfiguracijama M-centra. Prije mjerenja, Schottky dioda je ohlađena s temperature 340 K s primijenjenim naponom -10 V (Konfiguracija A) ili s temperature 450 K bez primijenjenog napona (Konfiguracija B). Reverzan napon, napon pulsa, i širina pulsa su $V_R = -10 V$, $V_P = -0.1 V$ i $t_p = 10 ms$, tim redom.

Laplace DLTS tehnikom nije postignuta dovoljna rezolucija za razlučivanje dubokih nivoa Mcentra. Na slici 39 su prikazani Laplace DLTS spektri na temperaturi EH1 vrha s prisutnim nerazlučenim M1 dubokim nivoom i bez njega. Prema koncentracijama razlučenih komponenti DLTS signala može se zaključiti kako M1 duboki nivo djelomično doprinosi koncentraciji razlučenog vrha na emisiji EH1₂ dubokog nivoa.



Slika 40. Dubinski profili EH1, EH1+M1 i EH3+M3+X koncentracija u FN1E13 Schottky diodi. EH1+M1 dubinski profil je određen mjerenjima na temperaturi 210 K s M-centrom u konfiguraciji A, dok EH1 dubinski profil je određen s M-centrom u konfiguraciji B. Profil izmjeren nakon hlađenja s reverznim naponom -10 V s temperature 340 K na temperaturu mjerenja 210 K sadrži M-centar u konfiguracijama A i B (crvene točke mjerenja i linija). Profili određeni prije zagrijavanja Schottky diode na temperaturu 450 K su prikazani isprekidanim linijama. Doprinos defekta koji uključuje međupoložajne atome na temperaturi EH3 dubokog nivoa je ozračen s X. Lambda efekt je uzet u obzir [79].

Na slici 40 su prikazani dubinski profili EH1, EH1+M1 i EH3+M3+X koncentracija određeni mjerenjima na temperaturama 210 K i 350 K. Koncentracije su izračunate koristeći jednakost (4.28) uz vrijednosti širina područja osiromašenja W_R i W_P te neto koncentracije donora određenih iz C-V karakteristike na temperaturi mjerenja. Profiliranje je provedeno držeći konstantnu razliku reverznog napona i napona pulsa $V_P - V_R = -1$ V te povećavajući reverzan napon V_R u koracima od 0.5 V. Takve naponske postavke su odabrane za promatranje dubokih nivoa u uskom rasponu dubina. Središnje točke [($W_R - \lambda_R$) - ($W_P - \lambda_P$)]/2 promatranih raspona dubina odgovaraju prikazanim točkama mjerenja.

Profili koncentracija određeni prije zagrijavanja do temperature 450 K su označeni isprekidanim linijama. Opažena je veća EH1 koncentracija pri dubinama manjim od ~5 μm (isprekidana plava linija). Područje s većom EH1 koncentracijom se nalazilo unutar područja

osiromašenja pri reverznom naponu (-10 V) tijekom provedenih DLTS mjerenja u temperaturnom rasponu do 380 K. Kao što je opisano u prethodnim studijama [53, 111], EH1 i EH3 duboki nivoi se opažaju nakon dovoljno dugog zagrijavanja pri temperaturama 350 K–400 K bez primijenjenog napona, dok primjena napona ubrzava proces povezan s njihovim unosom. Stoga, niža EH1 koncentracija je opažena izvan područja osiromašenja budući da proces povezan s njihovim unosom nije dovršen tijekom provedenih DLTS mjerenja pri temperaturama 350 K-380 K. EH3 koncentracija je puno veća od EH1 koncentracije ([EH1]:[EH3]~1:8 na dubini 2 μ m). Njeno smanjenje pri većim dubinama nije izraženo jer sadrži doprinose više dubokih nivoa.

Nakon zagrijavanja do temperature 450 K, primijećene su homogene koncentracije prisutnih dubokih nivoa. Opaža se smanjenje EH3 + M3 + X koncentracije sa zagrijavanjem, kao što je vidljivo na slici 36 iz amplitude pripadnog vrha na temperaturi EH3 dubokog nivoa. Prikazan profil koncentracije izmjeren nakon hlađenja Schottky diode s temperature 340 K na 210 K uz reverzan napon -10 V sadrži područja s M-centrom u konfiguracijama A i B. Dubina između tih dvaju područja (4.5~5 µm) je određena lambda duljinom i širinom područja osiromašenja pri reverznom naponu -10 V u temperaturnom rasponu 290 K-340 K. Iznosi koncentracija doprinosa na temperaturi EH1 dubokog nivoa (210 K) prije (plava isprekidana linija) i nakon zagrijavanja na 450 K (crna i plava linija) ukazuju na djelomičnu prisutnost M1 dubokog nivoa prije zagrijavanja na 450 K. Odnosno, iznosi prethodno izmjerenih koncentracija pri dubinama \lesssim 5 µm su veći od EH1 koncentracije i manji od EH1+M1 koncentracije, što ukazuje na zbroj doprinosa EH1 i M1 dubokih nivoa. Omjeri koncentracija dvaju razlučenih komponenti na temperaturi EH1 dubokog nivoa (Slika 35 (a) i Slika 39) ukazuju na doprinos M1 dubokog nivoa Laplace DLTS signalu na emisiji EH12 dubokog nivoa. Njihov omjer ~1:6 određen prije zagrijavanja do temperature 450 K (Slika 35 (a)) je veći od omjera [EH1₁]:[EH1₂] ~ 1:3 i manji od omjera [EH11]:[EH12+M1] ~ 1:9 (Slika 39). Oznake doprinosa dubokih nivoa M-centra u DLTS i Laplace DLTS spektru su uvedene postupno u ovom radu (u ovom potpotpoglavlju) jer je za njihovo razlučivanje nužno koristiti procedure sa zagrijavanjem na temperaturu 450 K.

Određeni dubinski profili (Slika 40) i kinetika uhvata elektrona (Slika 38) u M1 duboki nivo su konzistentni s rezultatima Martin et al. i Nielsen et al. [62, 64]. Ekvivalentna opažanja u slučaju protonskog i neutronskog ozračivanja te implantacije ugljikovih i helijevih iona potvrđuju opažanje istog tipa defekta i njegovo intrinzično porijeklo.

5.4. Zamke za manjinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC



Slika 41. MCTS spektri SN0 Schottky diode s tri različite vjerojatnosti emisije. MCTS mjerenje je provedeno pri konstantnom reverznom naponu $V_R = -10$ V uz primjenu svjetlosnih pulseva 365nm LED-ice duljine 10 ms. Foto-struja tijekom svjetlosnog pulsa je iznosila oko 184 nA.



Slika 42. Arrhenius graf ovisnosti e_p/T^2 o $1/k_BT$ B i D centra. Prikazane vrijednosti su određene MCTS mjerenjima na SN0 Schottky diodi.

U ovom podpoglavlju je iznesena karakterizacija zamki za manjinske nosioce naboja koristeći MCTS i Laplace MCTS tehnike. U MCTS spektru n-tipa 4H-SiC (Slika 41) se mogu primijetiti dvije zamke za šupljine koje su označene kao B i D centar. Aktivacijske energije za emisiju šupljina B i D centra (0.21 eV i 0.60 eV, tim redom) su određene linearnom regresijom u Arrhenius grafu (Slika 42). Opažene su promjene visina vrhova u MCTS spektru s prikazanom emisijom, stoga pri određivanju pripadnih energija nisu korištene emisije veće od 200 1/s kako bi se smanjio utjecaj promjene njihovih amplituda [80]. B i D centar odgovaraju prethodno opaženim zamkama za šupljine koje su pridijeljene zamjenskoj primjesi bora na silicijevom B_{Si} i ugljikovom B_C mjestu u kristalnoj rešetci [43–46], tim redom. Prema amplitudi vrhova u MCTS spektru je primijećeno kako B centar ima koncentraciju usporedivu s neto koncentracija B centra spram D centra može se objasniti rastom epitaksijalnog 4H-SiC u uvjetima bogatim ugljikom, pri kojim postoji više praznih silicijevih mjesta u kristalnoj rešetci dostupnih za uključivanje atoma bora (i formiranje B_{Si}) spram praznih ugljikovih mjesta (za formiranje B_C).

Duljina i intenzitet svjetlosnih pulseva korištenih tijekom MCTS mjerenja su bili dovoljno veliki kako bi koncentracije popunjenih zamki postigle ravnotežnu vrijednost (4.36). Kada popunjenosti zamki ne bi dostigle ravnotežno stanje, amplitude tranzijenta kapaciteta bi ovisile o koncentraciji popunjenih dubokih nivoa prije primjene svjetlosnog pulsa. Navedeni efekt može imati utjecaj na vrh B centra u MCTS spektru zbog njegove velike koncentracije te ga je važno izbjeći.

Izmjereni tranzijenti kapaciteta na temperaturi B centra u MCTS spektru pokazuju odstupanja od eksponencijalne ovisnosti o vremenu (4.24). Uzrok tom odstupanju može biti velika koncentracija B-centra (usporediva s koncentracijom dopiranja n-tipa $N_T \sim N_D^+ - N_A^-$) ili utjecaj serijskog otpora. Aktivacijska energija B centra određena mjerenjima na SN0 Schottky diodi je nešto niža od očekivane vrijednosti oko 0.27 eV [43–46], što je moguća posljedica navedenih utjecaja. Utjecaj serijskog otpora na mjereni kapacitet je veći pri MCTS mjerenjima spram DLTS mjerenja budući da primjena svjetlosnih pulseva dovodi do povećanja kapaciteta uzorka i time faktora $2\pi f R_s C$ u izrazu (4.15). Povećanje kapaciteta pri osvjetljenju na temperaturi B vrha je zbog njegove velike koncentracije usporedivo s reverznim kapacitetom. Dodatno, koncentracija slobodnih nosioca naboja unutar epitaksijalnog sloja se mijenja s promjenom koncentracije popunjenih B centara i time se mijenja serijski otpor epitaksijalnog sloja. Mjereni kapacitet nije jednostavno korigirati za iznos serijskog otpora jer on ovisi o temperaturi i postavkama mjerenja. Jedan od mogućih načina za provjeru prisutnosti utjecaja serijskog otpora i njegovo smanjenje je mjerenje kapaciteta koristeći nižu frekvenciju oscilatornog signala, npr. f = 100 kHz umjesto f = 1 MHz [112]. Međutim, za analizu tranzijenata kapaciteta je važno zadovoljiti pretpostavku puno veće kutne frekvencije oscilatornog signala od vjerojatnosti emisija prisutnih nivoa, što ograničava iznos najmanje dostupne frekvencije za mjerenja.

U MCTS spektru se također primjećuje proširenje vrha B centra na njegovoj visokotemperaturnoj strani koje može ukazivati na prisutnost dodatnog dubokog nivoa. Prema literaturi, HS1 zamka za šupljine s energijom oko E_v +0.35 eV ima vrh u MCTS spektru na temperaturi navedenog proširenja [43, 113]. Međutim, nije moguće sa sigurnošću donijeti zaključak o porijeklu opaženog proširenja vrha u MCTS spektru zbog nemogućnosti razlučivanja vrha. Također se primjećuje vrh na temperaturi oko 130 K koji je najvjerojatnije artefakt prethodno navedenog odstupanja tranzijenta od dobro definiranih eksponencijalnih funkcija te stoga on ne mora odgovarati dubokom nivou.

Laplace MCTS mjerenjima na temperaturi B centra nisu uspješno razlučene njegove dvije komponente zbog odstupanja tranzijenta kapaciteta od dobro definiranih eksponencijalnih funkcija. Dodatno, razlika aktivacijskih energija prijelaza B_{Si}(k) i B_{Si}(h) može biti premala za razlučivanje Laplace MCTS tehnikom.



Slika 43. Laplace MCTS spektar neozračene SN0 Schottky diode na temperaturi 300 K. Dvije razlučene komponente D-centra su označene s D1 i D2. Mjerenja su provedena pri konstantnom reverznom naponu $V_R = -2V$, uz primjenu svjetlosnih pulseva 365 nm LED-ice duljine 10 ms. Foto-struja tijekom svjetlosnog pulsa je iznosila oko 184 nA.



Slika 44. Arrhenius graf ovisnosti e_p/T^2 o $1/k_BT$ D1 i D2 zamki za šupljine određen Laplace MCTS mjerenjima na SN0 Schottky diodi.

Zamka za šupljine	E _a (eV)	$\sigma_p (cm^2)$	Metoda	
В	0.21 ± 0.01	1×10 ⁻¹⁸	МСТС	
D	0.60 ± 0.02	5×10 ⁻¹⁶	WIC15	
D1	0.491 ± 0.001	5×10 ⁻¹⁸	Laplace MCTS	
D2	0.567 ± 0.005	3×10 ⁻¹⁶	Laplace MC15	

Tablica 10. Aktivacijske energije E_a i udarni presjeci za uhvat šupljina σ_p određeni MCTS i Laplace MCTS mjerenjima na SN0 Schottky diodi.

Na slici 43 je prikazan Laplace MCTS spektar na temperaturi D centra. Primijećene su dvije komponente, označene s D1 i D2, i pridijeljene (-/0) prijelazu zamjenske primjese bora na mjestu ugljikovog atoma s lokalnom heksagonalnom $B_C(h)$ i kubičnom $B_C(k)$ simetrijom [45]. Njihov omjer amplituda [D1]:[D2] = 1:1 pokazuje podjednaku koncentraciju $B_C(h)$ i $B_C(k)$ u neozračenoj SN0 Schottky diodi. Premda D1 i D2 se mogu pridijeliti B_C defektu, za pouzdanu identifikaciju kubične i heksagonalne komponente su potrebne daljnje DFT i foto-EPR studije koje pružaju informaciju o geometriji defekta i njegovim energijskim nivoima. Aktivacijske energije za emisiju šupljina i udarni presjeci za uhvat šupljina od zamki prisutnih u SN0 Schottky diodi su sažeti u tablici 10.

Povećanje vjerojatnosti emisije s povećanjem električnog polja (Poole-Frenkel efekt [29]) je očekivano za akceptorske centre koji su neutralni u početnom trenutku i postaju negativno nabijeni emisijom šupljine. Međutim, nije primijećena promjena emisije B, D1 i D2 zamki za šupljine s promjenom reverznog napona u rasponu do - 10 V. Pri prisutnoj koncentraciji dopanada, povećanje električnog polja unutar područja osiromašenja s povećanjem reverznog napona nije dovoljno veliko za opažanje Poole-Frenkel efekta.



Slika 45. Ovisnost amplitude D1 i D2 zamki za šupljine o foto-struji. Laplace MCTS mjerenja su provedena pri konstantnom reverznom naponu $V_R = -2 V$, uz primjenu svjetlosnih pulseva 365nm LED-ice duljine 1 ms različitih intenziteta. Krivulje nelinearne regresije su prikazane uz točke mjerenja.

Na slici 45 je prikazana ovisnost amplituda D1 i D2 dubokih nivoa o foto-struji pri konstantnoj duljini svjetlosnih pulseva (1 ms). Za procjenu njihovih koncentracija i udarnih presjeka za uhvat šupljina je provedena prilagodba izraza (4.37), pri kojoj su korištene veze između koncentracije šupljina unutar područja osiromašenja te vjerojatnosti uhvata c_p (3.13) i fotostruje (4.30). Procijenjene koncentracije su reda veličine $\sim 2 \times 10^{13}$ cm⁻³. Vrijednosti udarnih presjeka za uhvat šupljina nisu uspješno određene, dobivene vrijednosti se razlikuju za više redova veličine spram vrijednosti određenih iz Arrhenius grafa (Tablica 10). Prevelike vrijednosti ukazuju na prisutnost procesa fotoionizacije zamki (apsorpcije fotona i optičke emisije elektrona iz zamki u vodljivu vrpcu) ili utjecaja geometrije uzorka (nehomogenost koncentracije šupljina). Proces fotoionizacije može povećati vrijednost c_p \rightarrow c_p + e⁰_n za iznos vjerojatnosti optičke emisije elektrona iz zamke. Njegova prisutnost se može provjeriti promatrajući brzinu promjene c_p + e⁰_n u ovisnosti o valnoj duljini svjetlosti pri konstantnoj fotostruji (koncentraciji šupljina) budući da je vjerojatnost optičke emisije e⁰_n proporcionalna toku fotona (4.38), a vjerojatnost uhvata šupljina c_p koncentraciji šupljina [82]. Pri izračunu koncentracije šupljina (4.30) je pretpostavljeno da koncentracije i brzine šupljina imaju konstantan iznos, što može dovesti do podcjenjivanja vrijednosti koncentracije šupljina i precjenjivanja udarnog presjeka za šupljine. Numeričkim izračunom (4.31-4.34) je moguće preciznije odrediti profil koncentracije šupljina. Međutim, važno je osigurati homogenost koncentracije šupljina p odabirom parametara mjerenja i geometrije uzorka kako bi mjerena vjerojatnost uhvata $c_p = \sigma_p v_{th,p} p$ (3.13) imala jedan određen iznos. U sklopu budućih studija je planirana provjera prisutnosti procesa fotoionizacije i utjecaja geometrije uzorka.

5.5. Zamke za manjinske nosioce naboja u n-tip 4H-SiC unesene neutronskim ozračivanjem



Slika 46. MCTS spektri polupropusnih SN Schottky dioda ozračenih neutronima s različitim dozama i neozračene SN0 Schottky diode [45]. Mjerenja su provedena pri konstantnom reverznom naponu $V_R = -10$ V, uz primjenu svjetlosnih pulseva 365 nm LED-ice duljine 10 ms. Emisija prikazanih spektra je 2.5 s⁻¹. Spektri su pomaknuti vertikalno radi bolje preglednosti.

MCTS spektri SN Schottky dioda ozračenih neutronima i neozračene SN0 Schottky diode su uspoređeni na slici 46. Primjećuje se pomak vrhova B i D centra prema nižim temperaturama u MCTS spektru s povećanjem doze neutronskog zračenja, pri čemu njihove koncentracije ostaju istog reda veličine. Njihov pomak može biti uzrokovan povećanim naprezanjem u epitaksijalnom sloju 4H-SiC Schottky dioda zbog unosa defekata u materijal. Rezultati DFT izračuna su pokazali kako prisutnost međupoložajnih atoma osjetno povećava volumen ćelije, dok prisutnost vakancije neznatno mijenja njen volumen [114, 115]. Povećanje naprezanja u SiC s neutronskim ozračivanjem je opisano u prethodnim studijama [114, 116]. Naprezanje može promijeniti vjerojatnost emisije nosioca naboja iz dubokog nivoa te dovesti do cijepanja energijskih nivoa ovisno o točkastoj simetriji defekta [30, 76, 117].

U MCTS spektru je primijećeno povećanje signala u temperaturnom rasponu 160 K-240 K (emisije 2.5 s^{-1}) s povećanjem doze neutronskog ozračivanja. Prema autorovom znanju, zamke za šupljine unesene neutronskim ozračivanjem nisu istražene u prethodnim studijama. U slučaju ozračivanja elektronima i protonima, poznata je prisutnost dviju zamki za šupljine u razmatranom temperaturnom rasponu s oznakama HS1 i HS2 te energijama 0.39-0.44 eV i 0.35 eV iznad maksimuma valentne vrpce [20, 43, 56, 118], tim redom. Prethodno je predloženo pridjeljivanje HS1 zamke prijelazu silicijevog anti-site defekta Si_C(0/+) [119, 120], dok identitet HS2 zamke za šupljine nije poznat. Međutim, zamke za šupljine uvedene neutronskim ozračivanjem nismo uspjeli razlučiti i identificirati zbog širine izmjerenog MCTS signala. Opažen širok MCTS signal se može objasniti prisutnošću većeg broja defekata s preklapajućim vrhovima u spektru, koji ne moraju nužno biti točkasti defekti.

6. Zaključak

Iznesena je karakterizacija električki aktivnih defekata unesenih u n-tip 4H-SiC tijekom epitaksijalnog rasta te ozračivanja epitermalnim i brzim neutronima koristeći metode tranzijentne spektroskopije. Postignuto je razlučivanje defekata na dvama različitim položajima u kristalnoj rešetci 4H-SiC te određivanje njihovih parametara vezanih uz uhvat i emisiju nosioca naboja koristeći Laplace DLTS i Laplace MCTS tehnike. Navedene su identifikacije dubokih nivoa u skladu s rezultatima njihove karakterizacije.

Istražen je negativan-U poredak nivoa dominantnog rekombinacijskog centra u n-tipu 4H-SiC. Razlučeni su $Z_1(=/0)$ i $Z_2(=/0)$ duboki nivoi na temperaturi $Z_{1/2}$ vrha u DLTS spektru koji su zatim pridijeljeni prijelazima vakancije ugljika na heksagonalnim $V_C(h)$ i kubičnom $V_C(k)$ mjestu u kristalnoj rešetci, tim redom. Opaženi prijelazi između dvostruko negativnog i neutralnog stanja vakancije ugljika (=/0) se odvijaju uzastopnom emisijom dvaju elektrona zbog negativnog-U poretka energijskih nivoa. Razlučeni $Z_1(-/0)$ i $Z_2(-/0)$ duboki nivoi su pridijeljeni prijelazima između negativnog i neutralnog stanja vakancija ugljika. Uhvat elektrona na neutralnim i negativnim vakancijama ugljika je ispitan na niskim temperaturama (100 K – 160 K). Iznesene su vrijednosti barijera i udarnih presjeka za uhvat elektrona u negativne vakancije ugljika te opažanje vrlo male barijere za uhvat elektrona u neutralne vakancije ugljika. Izmjereni iznosi udarnih presjeka, negativnih-U vrijednosti, te omjera koncentracija se izvrsno nadovezuju na rezultate prethodnih DFT studija, što dodatno potvrđuje njihovu identifikaciju modelom vakancije ugljika.

Proučena su dva duboka nivoa energija 0.4 eV (EH1) i 0.7 eV (EH3) ispod vodljive vrpce koji su uneseni ozračivanjem epitermalnim i brzim neutronima. Uz (-3/=) i (=/-) prijelaze vakancije silicija, opaženi su i doprinosi dodatna dva različita defekta na njihovim temperaturama u DLTS spektru. Omjeri njihovih amplituda i smanjenje EH3 koncentracije pri zagrijavanju ukazuju na doprinos dodatnog defekta DLTS signalu na temperaturi EH3 dubokog nivoa, najvjerojatnije kompleksnom defektu koji uključuje međupoložajne atome ugljika. Dodatno, prijelazi između dviju konfiguracija metastabilnog M-centra i njegov unos neutronskim ozračivanjem su opaženi koristeći procedure koje uključuju zagrijavanje i primjenu napona. M1 i M3 duboki nivoi M-centra u konfiguraciji A doprinose DLTS signalu na temperaturama EH1 i EH3 dubokih nivoa, dok u konfiguraciji B M2 duboki nivo doprinosi DLTS signalu na temperaturi Z_{1/2} dubokog nivoa. Opažanje kako ozračivanja različitim tipovima čestica i energija unose iste tipove defekta

ukazuje na njihovo intrinzično podrijetlo. Laplace DLTS tehnikom su razlučene dvije komponente DLTS signala na temperaturi EH1 dubokog nivoa u DLTS spektru, dok na temperaturi EH3 dubokog nivoa nisu razlučene dodatne komponente. U konfiguraciji A Mcentra, M1 duboki nivo doprinosi jednoj od razlučenih komponenti u Laplace DLTS spektru na emisiji EH1₂ dubokog nivoa. U konfiguraciji B, razlučeni EH1₁ i EH1₂ duboki nivoi su pridijeljeni (-3/=) prijelazu vakancija silicija s lokalnom heksagonalnom i kubičnom simetrijom, tim redom. Otkrivanje doprinosa dubokih nivoa M-centra i defekta povezanog s međupoložajnim atomima je od koristi u području inženjerstva materijala 4H-SiC, u kojem je identifikacija defekata od velike važnosti.

Dvije zamke za šupljine prisutne u n-tipu 4H-SiC, oznaka B i D centar u MCTS spektru, su pridijeljene (-/0) prijelazima zamjenske primjese bora na silicijevom B_{Si} i ugljikovom B_C mjestu u kristalu, tim redom. Laplace MCTS tehnikom su razlučene dvije komponente D centra, koje su u skladu s njegovom identifikacijom pripisane prijelazima zamjenske primjese bora s lokalnom heksagonalnom $B_C(h)$ i kubičnom $B_C(k)$ simetrijom. Dvije komponente B-centra nisu uspješno razlučene jer koncentracija B centra i/ili utjecaj serijskog otpora nisu bili dovoljno mali za primjenu Laplace MCTS tehnike. Daljnje studije su potrebne za razlučivanje dviju komponenti B centra i mjerenja kinetike uhvata šupljina na primjesi bora, uz odabir optimalnije geometrije uzoraka i postavki mjerenja.

Ispitan je utjecaj neutronskog zračenja na zamke za manjinske nosioce naboja u 4H-SiC. Pomak položaja vrhova B i D centra prema nižim temperaturama u MCTS spektru s povećanjem doze neutronskog ozračivanja je opažen i objašnjen povećanjem naprezanja u epitaksijalnom 4H-SiC. Neutronsko ozračivanje je unijelo dodatne zamke za šupljine, no nije bilo moguće sa sigurnošću provesti njihovu karakterizaciju i pridjeljivanje zbog širine pripadnih MCTS signala.

Komponente $Z_{1/2}$ i D centra su razlučene po prvi puta tijekom provedenog istraživačkog rada. Razlučivanje akceptorskih nivoa vakancije ugljika je omogućilo njihovu pojedinačnu karakterizaciju, usporedbu s rezultatima DFT izračuna te identifikaciju. Opažanje dvaju komponenti D centra potvrđuje njegovu identifikaciju kao dubokog nivoa zamjenske primjese bora na ugljikovom mjestu u kristalnoj rešetci. Dodatno, unos M-centra u 4H-SiC neutronskim ozračivanjem je uočen po prvi puta. Identifikacija unesenih zamki za šupljine, M-centra i defekta koji uključuje međupoložajne atome ostaju otvorena pitanja za buduće studije. Proučavanje kinetike uhvata šupljina u negativne i dvostruko negativne vakancije ugljika je također jedna od nadovezujućih tema istraživanja od važnosti za inženjerstvo materijala 4H-SiC.

Popis literature

- Hedayati R, Lanni L, Rodriguez S, Malm BG, Rusu A, Zetterling CM (2014) A monolithic, 500 °c operational amplifier in 4H-SiC bipolar technology. IEEE Electron Device Lett 35:693–695. doi: 10.1109/LED.2014.2322335
- Sei-Hyung Ryu, Krishnaswami S, Hull B, Heath B, Das M, Richmond J, Fatima H, Jon Zhang, Agarwal A, Palmour J, Lelis A, Geil B, Katsis D, Scozzie C, Scofield J (2005) High Speed Switching Devices in 4H-SiC - Performance and Reliability. In: 2005 International Semiconductor Device Research Symposium. IEEE, pp 162–163
- Sellin PJ, Vaitkus J (2006) New materials for radiation hard semiconductor dectectors. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect A Accel Spectrometers, Detect Assoc Equip 557:479–489. doi: 10.1016/j.nima.2005.10.128
- Moscatelli F (2007) Silicon carbide for UV, alpha, beta and X-ray detectors: Results and perspectives. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect A Accel Spectrometers, Detect Assoc Equip 583:157–161. doi: 10.1016/j.nima.2007.08.212
- Radulović V, Ambrožič K, Snoj L, Capan I, Brodar T, Ereš Z, Pastuović Ž, Sarbutt A, Ohshima T, Yamazaki Y, Coutinho J (2020) E-SiCure Collaboration Project: Silicon Carbide Material Studies and Detector Prototype Testing at the JSI TRIGA Reactor. EPJ Web Conf 225:07007 . doi: 10.1051/epjconf/202022507007
- Kimoto T, Danno K, Suda J (2008) Lifetime-killing defects in 4H-SiC epilayers and lifetime control by low-energy electron irradiation. Phys status solidi 245:1327–1336. doi: 10.1002/pssb.200844076
- Hazdra P, Popelka S, Schöner A (2018) Local Lifetime Control in 4H-SiC by Proton Irradiation. Mater Sci Forum 924:436–439. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.924.436
- Saito E, Suda J, Kimoto T (2016) Control of carrier lifetime of thick n-type 4H-SiC epilayers by high-temperature Ar annealing. Appl Phys Express 9: . doi: 10.7567/APEX.9.061303
- 9. Hiyoshi T, Kimoto T (2009) Reduction of deep levels and improvement of carrier lifetime in n-type 4H-SiC by thermal oxidation. Appl Phys Express 2:0411011–

0411013 . doi: 10.1143/APEX.2.041101

- Løvlie LS, Svensson BG (2012) Oxidation-enhanced annealing of implantationinduced Z 1/2 centers in 4H-SiC: Reaction kinetics and modeling. Phys Rev B -Condens Matter Mater Phys 86:1–8. doi: 10.1103/PhysRevB.86.075205
- Storasta L, Tsuchida H (2007) Reduction of traps and improvement of carrier lifetime in 4H-SiC epilayers by ion implantation. Appl Phys Lett 90:062116 . doi: 10.1063/1.2472530
- Ayedh HM, Nipoti R, Hallén A, Svensson BG (2015) Elimination of carbon vacancies in 4H-SiC employing thermodynamic equilibrium conditions at moderate temperatures. Appl Phys Lett 107:252102 . doi: 10.1063/1.4938242
- Iwamoto N, Johnson BC, Hoshino N, Ito M, Tsuchida H, Kojima K, Ohshima T (2013) Defect-induced performance degradation of 4H-SiC Schottky barrier diode particle detectors. J Appl Phys 113:143714 . doi: 10.1063/1.4801797
- Bathen ME, Galeckas A, Müting J, Ayedh HM, Grossner U, Coutinho J, Frodason YK, Vines L (2019) Electrical charge state identification and control for the silicon vacancy in 4H-SiC. npj Quantum Inf 5: . doi: 10.1038/s41534-019-0227-y
- Son NT, Anderson CP, Bourassa A, Miao KC, Babin C, Niethammer M, Hassan JU, Morioka N, Ivanov IG, Kaiser F, Awschalom DD (2020) Developing silicon carbide for quantum spintronics. 190501:1–7. doi: 10.1063/5.0004454
- Kimoto T, Cooper JA (2014) Fundamentals of Silicon Carbide Technology. John Wiley & Sons Singapore Pte. Ltd, Singapore
- Iwamoto N, Svensson BG (2015) Semiconductors and Semimetals (Volume 91)
 Defects in Semiconductors, 1st ed. Elsevier Ltd
- Devanathan R, Weber WJ (2000) Displacement energy surface in 3C and 6H SiC. J Nucl Mater 278:258–265. doi: 10.1016/S0022-3115(99)00266-4
- Li W, Wang L, Bian L, Dong F, Song M, Shao J, Jiang S, Guo H (2019) Threshold displacement energies and displacement cascades in 4H-SiC: Molecular dynamic simulations. AIP Adv 9:8–13 . doi: 10.1063/1.5093576
- 20. Storasta L, Bergman JP, Janzén E, Henry A, Lu J (2004) Deep levels created by low

energy electron irradiation in 4H-SiC. J Appl Phys 96:4909–4915 . doi: 10.1063/1.1778819

- Cha H-Y, Sandvik PM (2008) Electrical and Optical Modeling of 4H-SiC Avalanche Photodiodes. Jpn J Appl Phys 47:5423–5425. doi: 10.1143/JJAP.47.5423
- 22. Coutinho J, Markevich VP, Peaker AR (2020) Characterisation of negative-U defects in semiconductors. J Phys Condens Matter. doi: 10.1088/1361-648X/ab8091
- Watkins GD (1984) Negative-U properties for defects in solids. In: Advances in Solid State Physics. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp 163–189
- Schroder DK, Rubin LG (1991) Semiconductor Material and Device Characterization.
 Phys Today 44:107–108 . doi: 10.1063/1.2810086
- Sze SM, Ng KK (2006) Physics of Semiconductor Devices. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA
- 26. Henry CH, Lang D V. (1977) Nonradiative capture and recombination by multiphonon emission in GaAs and GaP. Phys Rev B 15:989–1016 . doi: 10.1103/PhysRevB.15.989
- 27. Gibb RM, Rees GJ, Thomas BW, Wilson BLH, Hamilton B, Wight DR, Mott NF (1977) V. A two stage model for deep level capture. Philos Mag 36:1021–1034 . doi: 10.1080/14786437708239776
- Andersen O, Dobaczewski L, Peaker A., Bonde Nielsen K, Hourahine B, Jones R, Briddon P., Öberg S (2001) Piezospectroscopic analysis of the hydrogen–carbon complexes in silicon. Phys B Condens Matter 308–310:139–142 . doi: 10.1016/S0921-4526(01)00672-X
- 29. Buchwald WR, Johnson NM (1988) Revised role for the Poole–Frenkel effect in deeplevel characterization. J Appl Phys 64:958–961 . doi: 10.1063/1.341907
- Coutinho J, Andersen O, Dobaczewski L, Bonde Nielsen K, Peaker R, Jones R, Öberg S, Briddon R (2003) Effect of stress on the energy levels of the vacancy-oxygenhydrogen complex in Si. Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys 68:1–11 . doi: 10.1103/PhysRevB.68.184106
- Alfieri G, Kimoto T (2013) Resolving the EH6/7 level in 4H-SiC by Laplace-transform deep level transient spectroscopy. Appl Phys Lett 102:152108. doi: 10.1063/1.4802248

- 32. Son NT, Trinh XT, Løvlie LS, Svensson BG, Kawahara K, Suda J, Kimoto T, Umeda T, Isoya J, Makino T, Ohshima T, Janzén E (2012) Negative-U System of Carbon Vacancy in 4H-SiC. Phys Rev Lett 109:187603 . doi: 10.1103/PhysRevLett.109.187603
- 33. Trinh XT, Szász K, Hornos T, Kawahara K, Suda J, Kimoto T, Gali A, Janzén E, Son NT (2013) Negative- U carbon vacancy in 4 H -SiC: Assessment of charge correction schemes and identification of the negative carbon vacancy at the quasicubic site. Phys Rev B Condens Matter Mater Phys 88:1–13 . doi: 10.1103/PhysRevB.88.235209
- Kawahara K, Thang Trinh X, Tien Son N, Janzén E, Suda J, Kimoto T (2014)
 Quantitative comparison between Z1/2 center and carbon vacancy in 4H-SiC. J Appl Phys 115:143705 . doi: 10.1063/1.4871076
- 35. Kawahara K, Thang Trinh X, Tien Son N, Janzén E, Suda J, Kimoto T (2013) Investigation on origin of Z1/2 center in SiC by deep level transient spectroscopy and electron paramagnetic resonance. Appl Phys Lett 102:112106 . doi: 10.1063/1.4796141
- 36. Hemmingsson CG, Son NT, Ellison A, Zhang J, Janzén E (1998) Negative-U centers in 4H silicon carbide. Phys Rev B 58:R10119–R10122 . doi: 10.1103/PhysRevB.58.R10119
- Kawahara K, Thang Trinh X, Tien Son N, Janzén E, Suda J, Kimoto T (2014)
 Quantitative comparison between Z 1/2 center and carbon vacancy in 4H-SiC. J Appl Phys 115:143705 . doi: 10.1063/1.4871076
- 38. Danno K, Kimoto T (2006) Investigation of deep levels in n -type 4H-SiC epilayers irradiated with low-energy electrons. J Appl Phys 100:1–7 . doi: 10.1063/1.2401658
- Klein PB (2008) Carrier lifetime measurement in n- 4H-SiC epilayers. J Appl Phys 103: . doi: 10.1063/1.2837105
- 40. Alfieri G, Monakhov E V., Svensson BG, Linnarsson MK (2005) Annealing behavior between room temperature and 2000 °C of deep level defects in electron-irradiated ntype 4H silicon carbide. J Appl Phys 98:043518. doi: 10.1063/1.2009816
- Capan I, Brodar T, Coutinho J, Ohshima T, Markevich VP, Peaker AR (2018) Acceptor levels of the carbon vacancy in 4 H -SiC: Combining Laplace deep level transient spectroscopy with density functional modeling. J Appl Phys 124:245701. doi:

10.1063/1.5063773

- 42. Coutinho J, Torres VJB, Demmouche K, Öberg S (2017) Theory of the carbon vacancy in 4H -SiC: Crystal field and pseudo-Jahn-Teller effects. Phys Rev B 96:1–16. doi: 10.1103/PhysRevB.96.174105
- 43. Zhang J, Storasta L, Bergman JP, Son NT, Janzén E (2003) Electrically active defects in n -type 4H–silicon carbide grown in a vertical hot-wall reactor. J Appl Phys 93:4708–4714. doi: 10.1063/1.1543240
- 44. Beyer FC, Hemmingsson CG, Leone S, Lin Y-C, Gällström A, Henry A, Janzén E
 (2011) Deep levels in iron doped n- and p-type 4H-SiC. J Appl Phys 110:123701. doi: 10.1063/1.3669401
- Capan I, Yamazaki Y, Oki Y, Brodar T, Makino T, Ohshima T (2019) Minority Carrier Trap in n-Type 4H–SiC Schottky Barrier Diodes. Crystals 9:328. doi: 10.3390/cryst9070328
- 46. Yang A, Murata K, Miyazawa T, Tawara T, Tsuchida H (2019) Analysis of carrier lifetimes in N + B-doped n -type 4H-SiC epilayers. J Appl Phys 126:055103 . doi: 10.1063/1.5097718
- 47. Bockstedte M, Mattausch A, Pankratov O (2001) Boron in SiC: Structure and Kinetics. Mater Sci Forum 353–356:447–450. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.353-356.447
- Bockstedte M, Mattausch A, Pankratov O (2004) Different roles of carbon and silicon interstitials in the interstitial-mediated boron diffusion in SiC. 115203:1–13. doi: 10.1103/PhysRevB.70.115203
- 49. Deák P, Aradi B, Gali A, Gerstmann U (2003) "Some like it shallower" p-type doping in SiC. Phys Status Solidi Basic Res 235:139–145. doi: 10.1002/pssb.200301522
- Lebedev AA (1999) Deep level centers in silicon carbide: A review. Semiconductors 33:107–130. doi: 10.1134/1.1187657
- Baranov PG, Il'in I V., Mokhov EN (1998) Electron paramagnetic resonance of deep boron acceptors in 4H-SiC and 3C-SiC crystals. Phys Solid State 40:31–34. doi: 10.1134/1.1130226

- Aradi B, Gali A, Deák P, Rauls E, Frauenheim T, Son NT (2009) Boron Centers in 4H-SiC. Mater Sci Forum 353–356:455–458 . doi: 10.4028/www.scientific.net/msf.353-356.455
- David ML, Alfieri G, Monakhov EM, Hallén A, Blanchard C, Svensson BG, Barbot JF (2004) Electrically active defects in irradiated 4H-SiC. J Appl Phys 95:4728–4733 . doi: 10.1063/1.1689731
- Castaldini A, Cavallini A, Rigutti L, Nava F (2004) Low temperature annealing of electron irradiation induced defects in 4H-SiC. Appl Phys Lett 85:3780–3782. doi: 10.1063/1.1810627
- 55. Castaldini A, Cavallini A, Rigutti L, Nava F, Ferrero S, Giorgis F (2005) Deep levels by proton and electron irradiation in 4H–SiC. J Appl Phys 98:053706 . doi: 10.1063/1.2014941
- 56. Hemmingsson C, Son NT, Kordina O, Bergman JP, Janzén E, Lindström JL, Savage S, Nordell N (1997) Deep level defects in electron-irradiated 4H SiC epitaxial layers. J Appl Phys 81:6155–6159. doi: 10.1063/1.364397
- 57. Bockstedte M, Mattausch A, Pankratov O (2004) Ab initio study of the annealing of vacancies and interstitials in cubic SiC: Vacancy-interstitial recombination and aggregation of carbon interstitials. Phys Rev B Condens Matter Mater Phys 69:1–13. doi: 10.1103/PhysRevB.69.235202
- Alfieri G, Mihaila A (2020) Isothermal annealing study of the EH1 and EH3 levels in n-type 4H-SiC. J Phys Condens Matter in press:0–31. doi: 10.1088/1361-648X/abaeaf
- Steeds JW, Furkert SA, Hayes JM, Sullivan W (2004) Low Temperature Annealing of Optical Centres in 4H SiC. Mater Sci Forum 457–460:637–640. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.457-460.637
- 60. Devynck F, Alkauskas A, Broqvist P, Pasquarello A, Caldas M, Studart N (2010) Energy levels of candidate defects at SiC/SiO2 interfaces. In: Energy. pp 108–109
- Gali A, Son NT, Janzén E (2006) Electrical characterization of metastable carbon clusters in SiC : A theoretical study. Phys Rev B 73:033204 . doi: 10.1103/PhysRevB.73.033204
- 62. Martin DM, Kortegaard Nielsen H, Lévêque P, Hallén A, Alfieri G, Svensson BG
(2004) Bistable defect in mega-electron-volt proton implanted 4H silicon carbide. Appl Phys Lett 84:1704–1706 . doi: 10.1063/1.1651656

- Brodar T, Bakrač L, Capan I, Ohshima T, Snoj L, Radulović V, Pastuović Ž (2020)
 Depth Profile Analysis of Deep Level Defects in 4H-SiC Introduced by Radiation.
 Crystals 10:845 . doi: 10.3390/cryst10090845
- Nielsen HK, Hallén A, Svensson BG (2005) Capacitance transient study of the metastable M center in n -type 4H-SiC. Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys 72:085208. doi: 10.1103/PhysRevB.72.085208
- Nielsen HK, Hallén A, Martin DM, Svensson BG (2005) M-center in low-dose proton implanted 4H-SiC; Bistability and change in emission rate. Mater Sci Forum 483– 485:497–500. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.483-485.497
- 66. Beyer FC, Hemmingsson C, Pedersen H, Henry A, Janzén E, Isoya J, Morishita N, Ohshima T (2011) Annealing behavior of the EB-centers and M-center in low-energy electron irradiated n -type 4H-SiC. J Appl Phys 109:103703 . doi: 10.1063/1.3586042
- Beyer FC, Hemmingsson CG, Pedersen H, Henry A, Isoya J, Morishita N, Ohshima T, Janzén E (2010) Bistable defects in low-energy electron irradiated n-type 4H-SiC. Phys status solidi - Rapid Res Lett 4:227–229. doi: 10.1002/pssr.201004249
- Brotherton SD (1983) The width of the non-steady state transition region in deep level impurity measurements. Solid State Electron 26:987–990. doi: 10.1016/0038-1101(83)90073-4
- Reshanov SA, Pensl G, Danno K, Kimoto T, Hishiki S, Ohshima T, Itoh H, Yan F, Devaty RP, Choyke WJ (2007) Effect of the Schottky barrier height on the detection of midgap levels in 4H-SiC by deep level transient spectroscopy. J Appl Phys 102:0–5. doi: 10.1063/1.2818050
- Man SY, Kim KH, Kim JK, Jang HW, Lee KH, Kim NK, Kim ED, Lee JL (2001)
 Ohmic contact formation mechanism of Ni on n-type 4H-SiC. Appl Phys Lett 79:1816– 1818. doi: 10.1063/1.1404998
- 71. Ito M, Storasta L, Tsuchida H (2008) Development of 4H–SiC Epitaxial Growth Technique Achieving High Growth Rate and Large-Area Uniformity. Appl Phys Express 1:015001. doi: 10.1143/APEX.1.015001

- 72. Norde H (1979) A modified forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance. J Appl Phys 50:5052–5053 . doi: 10.1063/1.325607
- Cheung SK, Cheung NW (1986) Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics. Appl Phys Lett 49:85–87. doi: 10.1063/1.97359
- 74. Goodman AM (1963) Metal—Semiconductor Barrier Height Measurement by the Differential Capacitance Method—One Carrier System. J Appl Phys 34:329–338. doi: 10.1063/1.1702608
- Peaker AR, Markevich VP, Coutinho J (2018) Tutorial: Junction spectroscopy techniques and deep-level defects in semiconductors. J Appl Phys 123:161559. doi: 10.1063/1.5011327
- 76. Dobaczewski L, Peaker AR, Bonde Nielsen K (2004) Laplace-transform deep-level spectroscopy: The technique and its applications to the study of point defects in semiconductors. J Appl Phys 96:4689–4728. doi: 10.1063/1.1794897
- Pons D (1984) Accurate determination of the free carrier capture kinetics of deep traps by space-charge methods. J Appl Phys 55:3644–3657. doi: 10.1063/1.332914
- Lang D V. (1974) Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors. J Appl Phys 45:3023–3032. doi: 10.1063/1.1663719
- Zohta Y, Watanabe MO (1982) On the determination of the spatial distribution of deep centers in semiconducting thin films from capacitance transient spectroscopy. J Appl Phys 53:1809–1811. doi: 10.1063/1.330683
- Davidson JA, Evans JH (1997) Detection statistics of deep levels in minority carrier transient spectroscopy. J Appl Phys 81:251–259. doi: 10.1063/1.363991
- 81. Blood P., Orton J. W. The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States. Academic Press Inc., London
- Hamilton B, Peaker AR, Wight DR (1979) Deep-state-controlled minority-carrier lifetime in n-type gallium phosphide. J Appl Phys 50:6373–6385 . doi: 10.1063/1.325728
- Brunwin R, Hamilton B, Jordan P, Peaker AR (1979) Detection of minority-carrier traps using transient spectroscopy. Electron Lett 15:349. doi: 10.1049/el:19790248

- 84. Snoj L, Ambrožič K, Čufar A, Goričanec T, Jazbec A, Lengar I, Pungerčič A, Radulović V, Rupnik S, Štancar Ž, Žerovnik G, Žohar A, Cindro V, Kramberger G, Mandić I, Mikuž M, Barbot L, Carcreff H, Destouches C, Fourmentel D, Gruel A, Villard JF (2020) Radiation hardness studies and detector characterisation at the JSI TRIGA reactor. EPJ Web Conf 225:04031 . doi: 10.1051/epjconf/202022504031
- Snoj L, Žerovnik G, Trkov A (2012) Computational analysis of irradiation facilities at the JSI TRIGA reactor. Appl Radiat Isot 70:483–488. doi: 10.1016/j.apradiso.2011.11.042
- 86. Goorley T, James M, Booth T, Brown F, Bull J, Cox LJ, Durkee J, Elson J, Fensin M, Forster RA, Hendricks J, Hughes HG, Johns R, Kiedrowski B, Martz R, Mashnik S, McKinney G, Pelowitz D, Prael R, Sweezy J, Waters L, Wilcox T, Zukaitis T (2012) Initial MCNP6 Release Overview. Nucl Technol 180:298–315 . doi: 10.13182/NT11-135
- 87. Trkov A, Radulović V, Snoj L The GRUPINT neutron spectrum adjustment code general features and characterization of the spectra in three irradiation channels of the JSI TRIGA reactor. In: 16th International Symposium on Reactor Dosimetry. Program and Book of abstracts, Santa Fe, USA
- Heissenstein H, Sadowski H, Helbig R (2001) Defect correlated emmission and electrical properties of 4H- and 6H-SiC epitaxial layers doped by nuclear transmutation doping (NTD). Phys B Condens Matter 308–310:702–705 . doi: 10.1016/S0921-4526(01)00874-2
- Battistoni G, Cerutti F, Fassò A, Ferrari A, Muraro S, Ranft J, Roesler S, Sala PR (2007) The FLUKA code: Description and benchmarking. AIP Conf Proc 896:31–49. doi: 10.1063/1.2720455
- Meredith WJ (1970) Neutron fluence measurements. Int J Radiat Biol 18:602–602.
 doi: 10.1080/09553007014551571
- 91. Menichelli D, Scaringella M, Moscatelli F, Bruzzi M, Nipoti R (2007) Characterization of energy levels related to impurities in epitaxial 4H-SiC ion implanted p+n junctions. Diam Relat Mater 16:6–11 . doi: 10.1016/j.diamond.2006.03.008
- 92. Ben Karoui M, Gharbi R, Alzaied N, Fathallah M, Tresso E, Scaltrito L, Ferrero S (2008) Influence of inhomogeneous contact in electrical properties of 4H–SiC based

Schottky diode. Solid State Electron 52:1232-1236 . doi: 10.1016/j.sse.2008.05.013

- 93. Gora VE, Auret FD, Danga HT, Tunhuma S., Nyamhere C, Igumbor E, Chawanda A (2019) Barrier height inhomogeneities on Pd/n-4H-SiC Schottky diodes in a wide temperature range. Mater Sci Eng B 247:114370. doi: 10.1016/j.mseb.2019.06.001
- 94. Tung RT (1992) Electron transport at metal-semiconductor interfaces: General theory.
 Phys Rev B 45:13509–13523 . doi: 10.1103/PhysRevB.45.13509
- 95. Barrier S, Sbds D, Nearly W, Brezeanu G, Badila M, Tudor B, Millan J, Godignon P, Udrea F, Amaratunga GAJ, Mihaila A (2001) Accurate Modeling and Parameter Extraction for Ideal Breakdown Voltage. IEEE Trans Electron Devices 48:2148–2153 . doi: 10.1109/16.944209
- 96. Zhang L, Zhang Y, Zhang Y, Han C (2010) Neutron radiation effect on 4H-SiC
 MESFETs and SBDs. J Semicond 31:114006 . doi: 10.1088/1674-4926/31/11/114006
- 97. Nava F, Castaldini A, Cavallini A, Errani P, Cindro V (2006) Radiation detection properties of 4H-SiC schottky diodes irradiated up to 1016 n/cm2 by 1 MeV neutrons. IEEE Trans Nucl Sci 53:2977–2982 . doi: 10.1109/TNS.2006.882777
- 98. Novoselnik B, Pilipovic M, Jacimovic R, Pivac B, Slunjski R, Capan I (2010) Capacitance changes in neutron irradiated n-type silicon: The flux effect. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms 268:2400– 2402 . doi: 10.1016/j.nimb.2010.04.017
- 99. Hazdra P, Popelka S, Zahlava V (2015) The Influence of Neutron Irradiation on Electrical Characteristics of 4H-SiC Power Devices. Mater Sci Forum 821–823:785– 788. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.821-823.785
- Istratov AA, Hieslmair H, Flink C, Weber ER (1998) Determination of parameters of deep level defects from numerical fit of deep level transient spectroscopy spectra: Analysis of accuracy and sensitivity to noise. Rev Sci Instrum 69:244–250. doi: 10.1063/1.1148503
- 101. Koizumi A, Markevich VP, Iwamoto N, Sasaki S, Ohshima T, Kojima K, Kimoto T, Uchida K, Nozaki S, Hamilton B, Peaker AR (2013) E1/E2 traps in 6H-SiC studied with Laplace deep level transient spectroscopy. Appl Phys Lett 102:032104 . doi: 10.1063/1.4788814

- 102. Götz W, Schöner A, Pensl G, Suttrop W, Choyke WJ, Stein R, Leibenzeder S (1993) Nitrogen donors in 4H-silicon carbide. J Appl Phys 73:3332–3338. doi: 10.1063/1.352983
- 103. Hornos T, Gali A, Svensson BG (2011) Large-Scale Electronic Structure Calculations of Vacancies in 4H-SiC Using the Heyd-Scuseria-Ernzerhof Screened Hybrid Density Functional. Mater Sci Forum 679–680:261–264 . doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.679-680.261
- 104. Pastuović Ž, Siegele R, Capan I, Brodar T, Sato S, Ohshima T (2017) Deep level defects in 4H-SiC introduced by ion implantation: the role of single ion regime. J Phys Condens Matter 29:475701. doi: 10.1088/1361-648X/aa908c
- 105. Karsthof R, Bathen ME, Galeckas A, Vines L (2020) Conversion pathways of primary defects by annealing in proton-irradiated n-type 4H-SiC
- 106. Search H, Journals C, Contact A, Iopscience M, Address IP Assessment of the intrinsic nature of deep level Z1/Z2 by compensation effects in. 724:2–7 . doi: 10.1088/0268-1242/21/6/002
- 107. Brodar T, Capan I, Radulović V, Snoj L, Pastuović Ž, Coutinho J, Ohshima T (2018) Laplace DLTS study of deep defects created in neutron-irradiated n-type 4H-SiC. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms 437:27–31. doi: 10.1016/j.nimb.2018.10.030
- 108. Capan I, Brodar T, Yamazaki Y, Oki Y, Ohshima T, Chiba Y, Hijikata Y, Snoj L, Radulović V (2020) Influence of neutron radiation on majority and minority carrier traps in n-type 4H-SiC. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms 478:224–228. doi: 10.1016/j.nimb.2020.07.005
- 109. Pellegrino P, Lévêque P, Wong-Leung J, Jagadish C, Svensson BG (2001) Separation of vacancy and interstitial depth profiles in ion-implanted silicon: Experimental observation. Appl Phys Lett 78:3442–3444. doi: 10.1063/1.1374960
- Gao F, Weber WJ, Posselt M, Belko V (2004) Atomic Computer Simulations of Defect Migration in 3C and 4H-SiC. Mater Sci Forum 457–460:457–460 . doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.457-460.457
- 111. Doyle JP, Linnarsson MK, Pellegrino P, Keskitalo N, Svensson BG, Schöner A,

Nordell N, Lindström JL (1998) Electrically active point defects in n-type 4H–SiC. J Appl Phys 84:1354–1357 . doi: 10.1063/1.368247

- Simoen E, Clauws P, Vennik J (1985) The determination of deep level concentrations in high resistivity semiconductors by DLTS, with special reference to germanium. J
 Phys D Appl Phys 18:2041–2058 . doi: 10.1088/0022-3727/18/10/015
- 113. Beyer FC, Pedersen H, Henry A, Janzén E (2009) Defects in 4H-SiC Layers Grown by Chloride-Based Epitaxy. Mater Sci Forum 615–617:373–376. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.615-617.373
- 114. Chen X, Zhou W, Feng Q, Zheng J, Liu X, Tang B, Li J, Xue J, Peng S (2016)
 Irradiation effects in 6H–SiC induced by neutron and heavy ions: Raman spectroscopy and high-resolution XRD analysis. J Nucl Mater 478:215–221 . doi: 10.1016/j.jnucmat.2016.06.020
- 115. Sawabe T, Akiyoshi M, Yoshida K, Yano T (2011) Estimation of neutron-irradiationinduced defect in 3C-SiC from change in XRD peak shift and DFT study. J Nucl Mater 417:430–434 . doi: 10.1016/j.jnucmat.2010.12.180
- 116. Abdullah Y, Che Hak CR, Megat Ahmad MHAR, Hasbullah NF, Yusof MR, Mahat S, Ee Abdullah N (2016) Effects of Neutron and Electron Irradiation on 4H-SiC Diodes. Mater Sci Forum 840:281–286 . doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.840.281
- 117. Gelczuk Ł, Dąbrowska-Szata M, Kolkovsky V, Sochacki M, Szmidt J, Gotszalk T (2020) Origin and anomalous behavior of dominant defects in 4H-SiC studied by conventional and Laplace deep level transient spectroscopy. J Appl Phys 127:064503 . doi: 10.1063/1.5140731
- Storasta L, Carlsson FHC, Sridhara SG, Formanek B, Bergman JP, Hallén A, Janzén E (2001) Proton Irradiation Induced Defects in 4H-SiC. Mater Sci Forum 353–356:431–434. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.353-356.431
- 119. Eberlein TAG, Jones R, Öberg S, Briddon PR (2006) Density functional theory calculation of the DI optical center in SiC. Phys Rev B Condens Matter Mater Phys 74:1–5. doi: 10.1103/PhysRevB.74.144106
- 120. Torpo L, Marlo M, Staab TEM, Nieminen RM (2001) Comprehensive ab initio study of properties of monovacancies and antisites in 4H-SiC. J Phys Condens Matter

13:6203-6231. doi: 10.1088/0953-8984/13/28/305

Životopis autora s popisom objavljenih radova

Tomislav Brodar završava Prirodoslovno-matematičku gimnaziju u Našicama 2012. godine. Potom upisuje integrirani preddiplomski i diplomski sveučilišni studij Fizike (smjer: istraživački) na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu, koji završava 2017. godine s najvećim pohvalama (summa cum laude) te iste godine upisuje poslijediplomski sveučilišni studij fizike. Tijekom izrade svog diplomskog rada i zatim tijekom rada na Institutu Ruđer Bošković u Laboratoriju za poluvodiče sudjeluje u znanstvenom radu pod mentorstvom dr. sc. Ivane Capan. Koautor je na dvanaest znanstvenih radova, među kojima je prvi autor na dva rada.

E-mail: tbrodar@irb.hr

Znanstveno usavršavanje:

19.4.2018. –	Istraživački posjet, Sveučilište u Aveiru, Aveiro, Portugal
18.5.2018.	
27.7.2019 -	Istraživački posjet, Sveučilište u Manchesteru, Manchester, Ujedinjeno
24.8.2019	Kraljevstvo

Konferencije:

18.5.2017 -	24. međunarodni znanstveni sastanak Vakuumska znanost i tehnika, Zadar,
19.5.2017	Hrvatska
	Poster: Study of radiation induced deep levels in n-type 4H-SiC Schottky
	barrier diodes
16.5.2019. –	26. međunarodni znanstveni sastanak Vakuumska znanost i tehnika,
17.5.2019.	Njivice, Hrvatska
	Poster: Deep defects created in neutron-irradiated n-type 4H-SiC

Radno iskustvo:

2018. – danas	Asistent, Laboratorij za poluvodiče, Institut Ruđer Bošković, Hrvatska
2016. – 2017.	Studentski rad, Laboratorij za poluvodiče, Institut Ruđer Bošković, Hrvatska
	Izrada seminara i diplomskog rada (<i>Električki aktivni defekti u 4H-SiC</i> uvedeni zračenjem)
10.2013. – 1.2014.	Demonstrator na kolegiju Računarstvo i praktikum, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, Hrvatska

Popis objavljenih radova

- Pastuović Ž, Siegele R, Capan I, Brodar T, Sato S, Ohshima T (2017) Deep level defects in 4H-SiC introduced by ion implantation: the role of single ion regime. J Phys Condens Matter 29:475701. doi: 10.1088/1361-648X/aa908c
- Capan I, Brodar T, Pastuović Z, Siegele R, Ohshima T, Sato SI, Makino T, Snoj L, Radulović V, Coutinho J, Torres VJB, Demmouche K (2018) Double negatively charged carbon vacancy at the h- and k-sites in 4H-SiC: Combined Laplace-DLTS and DFT study. J Appl Phys 123: . doi: 10.1063/1.5011124
- Brodar T, Capan I, Radulović V, Snoj L, Pastuović Ž, Coutinho J, Ohshima T (2018) Laplace DLTS study of deep defects created in neutron-irradiated n-type 4H-SiC. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms 437:27–31. doi: 10.1016/j.nimb.2018.10.030
- Capan I, Brodar T, Coutinho J, Ohshima T, Markevich VP, Peaker AR (2018) Acceptor levels of the carbon vacancy in 4H-SiC: combining Laplace deep level transient spectroscopy with density functional modeling. 245701: . doi: 10.1063/1.5063773
- Capan I, Yamazaki Y, Oki Y, Brodar T, Makino T, Ohshima T (2019) Minority Carrier Trap in n-Type 4H–SiC Schottky Barrier Diodes. Crystals 9:328. doi: 10.3390/cryst9070328

- Kovačić M, Perović K, Papac J, Tomić A, Matoh L, Žener B, Brodar T, Capan I, Surca AK, Kušić H, Štangar UL, Lončarić Božić A (2020) One-Pot Synthesis of Sulfur-Doped TiO2/Reduced Graphene Oxide Composite (S-TiO2/rGO) with Improved Photocatalytic Activity for the Removal of Diclofenac from Water. Materials (Basel) 13:1621. doi: 10.3390/ma13071621
- Capan I, Brodar T, Yamazaki Y, Oki Y, Ohshima T, Chiba Y, Hijikata Y, Snoj L, Radulović V (2020) Influence of neutron radiation on majority and minority carrier traps in n-type 4H-SiC. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms 478:224–228. doi: 10.1016/j.nimb.2020.07.005
- Brodar T, Bakrač L, Capan I, Ohshima T, Snoj L, Radulović V, Pastuović Ž (2020) Depth Profile Analysis of Deep Level Defects in 4H-SiC Introduced by Radiation. Crystals 10:845 . doi: 10.3390/cryst10090845
- Coutinho J, Torres VJB, Capan I, Brodar T, Ereš Z, Bernat R, Radulović V, Ambrožič K, Snoj L, Pastuović Ž, Sarbutt A, Ohshima T, Yamazaki Y, Makino T (2020) Silicon carbide diodes for neutron detection. Nucl Instrum Methods Phys Res A (prihvaćen za objavljivanje)

Zbornik radova s konferencije:

 Capan I, Brodar T, Ohshima T, Sato SI, Makino T, Pastuović Ž, Siegele R, Snoj L, Radulović V, Coutinho J, Torres VJB, Demmouche K (2018) Deep level defects in 4H-SiC epitaxial layers. Mater Sci Forum 924 MSF:225–228 . doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.924.225

2. Radulović V, Ambrožič K, Snoj L, Capan I, Brodar T, Ereš Z, Pastuović Ž, Sarbutt A, Ohshima T, Yamazaki Y, Coutinho J (2020) E-SiCure Collaboration Project: Silicon Carbide Material Studies and Detector Prototype Testing at the JSI TRIGA Reactor. EPJ Web Conf 225:07007 . doi: 10.1051/epjconf/202022507007

3. Radulović V, Klemen A, Snoj L, Capan I, Brodar T, Ereš Z, Pastuović Ž, Sarbutt A, Ohshima T, Yamazaki Y, Coutinho J (2018) E-SiCure Collaboration Project: Silicon Carbide Material Studies and Detector Prototype Testing at the JSI TRIGA Reactor. International Conference "Nuclear Energy for New Europe 2018," Portorož