

УДК 621.382/620.9.91

В.А. Бахов¹, А.С. Мазин², канд. техн. наук, Е.А. Наздеркин¹, Л.Д. Писаренко³, д-р техн. наук

Влияние структурной неоднородности на проводимость полупроводниковых материалов

Сложность процессов, определяющих электрические свойства структурированных неоднородных материалов, рассматривается со стороны квантового представления аперидической структуры. Детерминация каждого из вида разупорядоченности аперидической матрицы посредством статистического и энергетического параметров позволила описать температурные зависимости электропроводности аморфных пленок гидрогенизированного кремния.

Complexity in understanding of the processes spotting the electrical properties of structured materials is considered from the side of the quantum representation of aperiodic structure. Determination of each of the view disordered aperiodic matrixes by means of statistical and energy parameters have allowed to describe the temperature dependences of the electroconductivity of the hydrogenated silicon amorphous films.

Ключевые слова: структурированные пленки, полупроводниковые структуры, разупорядоченные материалы.

Введение

Свойства поликристаллических и аморфных материалов выделяются разнообразием, особенностями и шириной диапазона их применения. Интересным примером доступного многообразия являются структурированные материалы, сочетающие беспорядочный атомарный хаос и строго упорядоченную структуру [1,2]. Столь удивительное сочетание фаз твердотельной матрицы в мезоскопическом пространстве позволяет использовать множество вариаций внутренней составляющей материала [3]. Именно существование неперидичности во всех ее проявлениях при однозначном определении ее в кристаллической структуре открывает широкие возможности по созданию электронных схем на основе наноэлементной базы.

Однако, именно наличие неоднозначности и затрудняет описание динамики поведения носителей заряда в подобного рода материалах. Поэтому более детализированная модель разупорядоченной структуры должна опираться на комплексный подход статистических и строго детерминированных методов, в основе которых

лежит квантовое представление твердотельной матрицы.

1. Периодическая составляющая

Отрицательным аспектом в использовании неоднозначно упорядоченных материалах в полупроводниковой электронике, является нестабильность свойств, а точнее сложная предсказуемость и трудная управляемость его электрофизическими характеристиками в процессе получения. Электропроводность здесь является базовым параметром, от которого зависят мощностные, частотные и многие другие характеристики полупроводникового прибора. Именно поэтому нами предпринята попытка описания проводимости разупорядоченных, в том числе и аморфных, структур с точки зрения квантового подхода, опираясь при этом на формализм уравнения Шредингера.

Отклонение от стехиометрической упорядоченности, несомненно, обуславливает наличие энергетических уровней в запрещенной зоне, что в свою очередь позволяет рассматривать резистивную природу наноразмерных полупроводников как сумму электропроводностей, основа которых определена различными механизмами [4]. Первоначально абстрагируясь от детализации энергетического спектра неупорядоченного полупроводника, его проводимость можно представить как сумму:

$$\sigma = \sigma_r + \sigma_T, \quad (1)$$

где σ_r – проводимость упорядоченной, регулярной части структуры, σ_T – проводимость, обусловленная энергетическими центрами, создаваемыми разупорядоченностью.

Аппроксимируя утверждение (1) на концентрацию носителей заряда и воспользовавшись [5]:

$$dn = f(E, T) N(E) dE, \quad (2)$$

мы можем расписать:

$$n = \int_{E_1}^{E_2} f(E, T) N(E) dE = n_r + n_T. \quad (3)$$

Сопоставление с чисто кристаллическим подходом в приводимом описании неупорядоченной структуры выбрано умышленно в силу того, что именно опираясь на хорошо отработанную теорию проводимости кристаллических материалов, возможно, достаточно точно опи-

сать поведение разупорядоченной структуры. Однако, в отличие от кристаллической периодичности, в рассматриваемых нанопорядоченных материалах, где нижний предел интегрирования обнуляется переносом начала системы отсчета в E_c , а верхний устремляется к бесконечности, энергетический промежуток от E_T до E_2 возможно представить как два промежутка $[E_V; E_c]$ и $[E_c; E_\infty]$. И, следовательно, расписать (3) как сумму интегралов:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E, T) N_r(E) dE + \int_{E_V}^{E_c} f(E, T) N_T(E) dE, \quad (4)$$

позволяющую детерминировать равновесную концентрацию носителей упорядоченной и дефектной частей структуры. Для соблюдения точности, в (4) мы также принимаем допущение об отсутствии влияния аperiодического спектра на периодический потенциал [6,7]. В противном случае в данное неравенство необходимо вносить дополнительный интеграл взаимодействия, важность которого ни сколько не занижается, а лишь опускается из-за упрощения первого приближения.

Это упрощение позволяет рассматривать первый интеграл в разбиении (4) в квазиклассическом приближении. При этом плотность состояний N_r определяется числом квантовых состояний электрона, конец волнового вектора \mathbf{k} которого лежит в элементе dk детерминированного k -пространства. Также это дает возможность определить кристаллическую составляющую как систему невырожденного электронного газа и принять допущение $\exp(-F/kT) \gg 1$ при котором функция распределения Ферми-Дирака в условиях термодинамического равновесия упрощается распределением Максвелла-Больцмана с нормировочной константой $A \approx \exp(-F/kT)$ [8]. В результате концентрация n_r , определяемая периодической составляющей, выражается интегралом:

$$n_r = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m^* 3/2}{h^3} \int_0^{\infty} A e^{-\tilde{E}/kT} E^{1/2} dE = \frac{(2\pi m^* kT)^{3/2}}{4\pi^3 h^3} A. \quad (5)$$

2. Аperiодическая структура

Второе слагаемое уравнения (4):

$$n_T = \int_{E_V}^{E_c} f(E, T) N_T(E) dE \quad (6)$$

необходимо рассматривать как интегрирование по детерминированным состояниям, которые обусловлены типом j -го дефекта в «хвостах»

запрещенной зоны. При этом стоит отметить сложность определения плотности состояний и функции распределения для разупорядоченного участка материала. Как один из возможных подходов, предложенный в [9], использование квантового формализма уравнения Шредингера позволяет описать энергетический спектр [10]:

$$E_{Tj} = ((E_a + E_{a-1})/2 + C_{Tj} + \xi_j) \times (1 + \sqrt{\ln(\cos(2\pi \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j))}) \quad (7)$$

исходя из собственных функций рассматриваемой системы. Константы E_a , E_{a-1} , C_T определяются параметрами базовой решетки. Энергетический сдвиг ξ_j в запрещенной зоне задается физикой каждого из дефектов и может быть получен либо расчетом межатомных сил взаимодействия, либо подобран методом моделирования и сравнения экспериментальных данных.

Коэффициент b_j является одновременно и количественным параметром, и энергетической характеристикой каждого типа неоднородности. И хотя при строгом представлении для трехмерных аморфных матриц b_j является векторной величиной, однако в данном упрощенном случае его можно определить отношением дефектных центров N_{dj} к количеству атомов в базовой решетке N_c :

$$b_j = \alpha \frac{N_{dj}}{N_c}, \quad (8)$$

где α – коэффициент пропорциональности, определяющий структурную периодичность базовой решетки. Общая плотность состояний в «хвостах» зон определяется суммой по всем типам неоднородностей:

$$N_T(E) = \sum_{j=1}^z N_{dj}. \quad (9)$$

Таким образом, плотность состояний в (6) определяется суммой:

$$N_T(E) = \sum_{j=1}^z \frac{b_j N_c}{\alpha}. \quad (10)$$

Проведя аналогичные рассуждения [5] и опираясь на экспериментальный факт, что запрещенная зона неупорядоченных материалов больше чем у кристаллов, можно ввести Больцмановское распределение и в (6). Более того, также как и в случае плотности состояний, целесообразным представляется использование энергетического сдвига ξ относительно середины запрещенной зоны, получаемого из энергетического спектра в [10]. Подобная замена также рациональна с точки зрения согласования с экспериментальными результатами. Уходя от трудно определяемого уровня Ферми в функции рас-

пределения неупорядоченной структуры к подобранному путем моделирования [6] экспериментальному сдвигу энергии ξ можно получить распределение в дефектной части материала:

$$f(E, T) = e^{-\frac{E-F}{kT}} = e^{-\frac{V\xi}{kT}}, \quad (11)$$

где дополнительная поправка V определяется взаимодействием детерминированных центров в хвостах запрещенной зоны и возможным ее влиянием на сдвиг по энергиям.

Объединяя (11) и (10) в интеграле (6) получаем:

$$n_T = \int_{E_V}^{E_C} e^{-\frac{V\xi}{kT}} \sum_{j=1}^z \frac{b_j N_c}{\alpha} d\xi. \quad (12)$$

Интегрирование по $d\xi$ легко заменить суммированием по отдельным дефектным центрам ξ_j в силу их пространственно-энергетической дисперсии. Более того, учет их взаимодействия вложен в константу V , которую для уточнения можно определить для каждого из центров, т.е. задав V_j . В этом случае (12) переписывается как:

$$n_T = \sum_{j=1}^z e^{-\frac{V_j \xi_j}{kT}} \sum_{j=1}^z \frac{b_j N_c}{\alpha}. \quad (13)$$

Так как каждому дефекту b_j соответствует свой энергетический уровень ξ_j , причём только один, то из суммы произведений (13) не равны нулю только те слагаемые, в которых $b_j \neq 0$ и $\xi_j \neq 0$, следовательно n_T :

$$n_T = \sum_{j=1}^z \frac{b_j N_c}{\alpha} e^{-\frac{V_j \xi_j}{kT}}. \quad (14)$$

В данной сумме необходимо обговорить параметр плотности состояний N_c который хоть и близок у кристаллическому, но все же отличен. Поэтому для достоверности уточним N_c как N'_c – плотность состояний аperiodической решетки. Тогда окончательно для дефектной части:

$$n_T = \sum_{j=1}^z \frac{1}{\alpha} b_j N'_c e^{-\frac{V_j \xi_j}{kT}}. \quad (15)$$

Следовательно, имея качественный ξ_j и количественный b_j параметры, возможно описать реальную разупорядоченную структуру с локализованными центрами в щели подвижности.

Выводы

Таким образом, объединяя генерацию электронов в зоне проводимости как псевдокристаллической, так и дефектной частями, получаем общую концентрацию:

$$n = \frac{(2\pi m^* kT)^{3/2}}{4\pi^3 h^3} A + \sum_{j=1}^z \frac{1}{\alpha} b_j N'_c e^{-\frac{V_j \xi_j}{kT}} \quad (16)$$

При введении (16) в зависимость проводимости структуры получаем параметр, легко проверяемый экспериментальным измерением:

$$\sigma = e\mu_n \frac{(2\pi m^* kT)^{3/2}}{4\pi^3 h^3} A + \frac{e\mu'_n}{\alpha} \sum_{j=1}^z b_j N'_c e^{-\frac{V_j \xi_j}{qkT}}, \quad (17)$$

где подвижность носителей μ_n и μ'_n , также как N_c и N'_c , детерминируется в зависимости от частоты структуры. Константа q , носящая поправочный характер, необходима при внесении в (17) экспериментальных параметров для моделирования теоретической проводимости и сравнения ее с экспериментом.

Одним из важных свойств (17) является возможность экспериментального «зондирования конструктива» внутренней структуры [11] рабочих слоев приборов в зависимости от методов их получения. Другими словами, расписывая экспериментальную проводимость посредством моделирования (17) можно расшифровать энергетический спектр в «хвостах» запрещенной зоны.

Как пример, была рассмотрена проводимость для кремниевых пленочных структур, полученных магнетронным распылением кристаллической мишени на постоянном токе [11]. Варьируемым параметром было парциальное давления водорода в смеси рабочих газов (рис.2: 40% - кривая 1 и 30% - кривая 2), которое и обуславливало насыщение растущей пленки одновалентным элементом. Что в свою очередь влияло на морфологию растущей пленки.

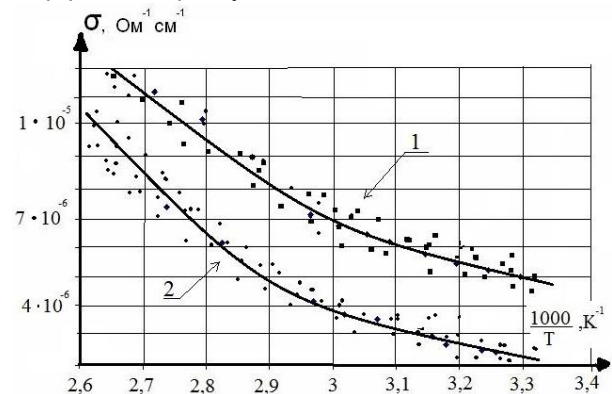


Рис.1. Сопоставление экспериментальной и моделируемой проводимости

Сопоставление модельной сплошной кривой и экспериментальных точек проводимости (рис. 1) показало возможность дешифрации атомарной матрицы на основе (17).

Литература

1. *Шмырева А.Н.* Мельниченко Н.Н. Фотоэлектрические свойства нанопористого кремния и оптоэлектронные сенсоры на его основе // *Электроника и связь*. – 2010. – №1(54). – С. 17-24.
2. *Голикова О.А.*, Казанин М.М. Влияние нанокристаллических включений на фоточувствительность пленок аморфного гидрированного кремния // *Физика техника полупроводников*. – 2000. – Т. 34, № 6. – С. 762-765.
3. *Имри Й.* Введение в мезоскопическую физику. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. - 304 с.
4. *Хамакава Й.* Аморфные полупроводники и приборы на их основе. – М.: Металлургия, 1986. – 188 с.
5. *Бонч-Бруевич В.Л.*, Калашников С.Г. Физика полупроводников. –М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1987. – Т.3. – 679 с.
6. *Бахов В.А.*, Мазинов А.С., Писаренко Л.Д. Детализация локализованных уровней неупорядоченных полупроводниковых структур // *Электроника и связь*. – 2010. – №1(54). – С. 12-16.
7. *Ridley B.K.* Quantum processes in semiconductor. – Oxford University Press, 1982. – 302 p.
8. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, 1978. – 616 с.
9. *Маделунг О.* Физика твердого тела. Локализованные состояния. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1985. – 184 с.
10. *Мазинов А.С.*, Бахов В.А., Каравайников А.В. Влияние аперидичности нанопорядоченных структур на сопротивление // *КрыМиКо*. – 2010. – №20. – С. 840-841.
11. *Мазинов А.С.*, Лисовец Е.В., Каравайников А.В. Влияние концентрации водорода в магнетронной камере на гидрирование кремниевой аморфной пленки // *Вестник СумГУ*. – 2004. – Т.10(69). – С.101–106.

¹Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского

²Крымский научный центр НАН Украины и МОН Украины

³Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»