

УДК 621.382/620.9.91

В.А. Бахов¹, А.С. Мазинов¹, канд. техн. наук, Л.Д. Писаренко², д-р техн. наук

Детализация локализованных уровней неупорядоченных полупроводниковых структур

Приведен способ описания степени неупорядоченности активных слоев полупроводниковых приборов. На основе упрощенного представления построения дефектной решетки материала, вводится функциональная зависимость энергетического спектра, дающая распределения локальных уровней в хвостах запрещенной зоны. Показана возможность объяснения структурных построений аморфной матрицы исходя из технологических режимов получения полупроводникового слоя. Предложены параметры, определяющие степень разупорядоченности материала.

The way for description the degree disorder active layers of semiconductor devices is displayed. By mean of the simplified representation for defective construction a lattice solid-state we is entered the functional dependence in energy spectrum, which giving local levels distribution for tail band gap. Possibility to explain the specific construction in amorphous matrix from technological modes of precipitation semiconductor layer is shown. We are offered the parameters that define scale of disorder in material.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, гирогенизированный кремний, собственные функции, локализованные уровни, колебательные моды.

Введение

Построение полупроводниковых приборов на основе кристаллического кремния достигает своего апогея. Многочисленные теоретические предсказания финального этапа развития интегральных микросхем на базе только классической структуры подталкивают к поиску веществ, атомный остов которых не вписывается в обычное понимание и представление твердотельной электроники. Как отдельное направление в физике приборов выделяют функциональные поликристаллические и аморфные материалы. Обладая более сложной решеткой с практически бесконечным многообразием форм, они позволяют получить принципиально новые электронные схемы.

Свойства, проявляемые немонотонными кристаллическими или неупорядоченными системами, по-

зволяют усовершенствовать существующие, и создавать абсолютно новые приборы, например, гибкие дисплеи, тачпанели, солнечные батареи и т. д., разнообразие свойств которых можно задавать технологическими приемами построения атомной матрицы [1, 2]. Однако сегодня устройства на основе подобных слоёв не получили широкого распространения. Из многих причин недостаточно широкого применения некристаллических приборов можно выделить две. Первая – неотработанные технологические приёмы получения активных слоев с заданными характеристиками как с помощью метода термоактивированного химического осаждения из газовой фазы, так и осаждения из плазмы тлеющего разряда. Вторая – недостаточно развитая теоретическая база неупорядоченных субстанций, которая не позволяет описать разупорядоченное состояние материала.

Целью работы является создание такого модельного представления дефектности в неупорядоченных полупроводниках, которое дает возможность использования детализации квантового подхода для изучения динамики изменения свойств аморфных пленок.

1. Теоретические предпосылки

Указанные выше причины ограниченного применения некристаллических материалов взаимосвязаны. Поэтому технологические успехи в построении приборов по отработанному алгоритму, с наперед заданными электрическими и оптическими свойствами, позволят выстроить четкую теорию описания нестандартной атомарной цепочки. И, соответственно, понимание внутренней структуры поликристаллической или аморфной матрицы позволит задавать нужные технологические условия выращивания рабочих пленок полупроводниковых приборов. И если одним из основных параметров, который характеризует полупроводниковый материал, является его запрещенная зона, то для аморфной решетки также важен энергетический спектр дефектных центров.

Подход к описанию аморфных материалов имеет много методик, которые можно разделить на два направления. Первое направление условно можно назвать движением от «хаоса». Оно базируется на статистических методах:

численная диагонализация, метод уравнений движения, рекуррентный метод и т. д. [3, 4]. Второе – движение от идеальной упорядоченности [5, 6], где ввод локальных неоднородностей не будет менять картины в общем, но в частном случае вносит вклад в энергетический спектр. Каждое из двух направлений имеет свои преимущества и недостатки и по-своему требуются в физике твердотельных приборов.

Преимущество второго метода позволяет воспользоваться квантовыми соотношениями построения кристаллической решетки [7, 8], что особенно важно при переходе от микронных приборов к наноразмерным элементам. Неупорядоченность же можно ввести посредством ухудшения периодичности, тем самым детализировать некристаллическую решетку через описание конкретных дефектных состояний. Из предположения слабого влияния локализованного дефекта на базовую кристаллическую решетку, т. е. практического отсутствия изменения в периодичности атомного потенциала \mathcal{H} , следует, возможность разделения на периодический \mathcal{H}_c и локальный \mathcal{H}_a операторы уравнения Шредингера [9]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_a.$$

При этом само уравнение можно записать в виде

$$(\mathcal{H}_c + \mathcal{H}_a)\psi = E\psi,$$

где E – собственная энергия; ψ – собственная функция.

В первом приближении, исходя из предположения слабого взаимодействия дефекта с упорядоченной цепочкой для многоэлектронной задачи, разбиваем уравнение на два:

$$\begin{cases} \mathcal{H}_c\psi_1 = E_1\psi_1; \\ \mathcal{H}_a\psi_2 = E_2\psi_2, \end{cases}$$

где E_1 и E_2 , ψ_1 и ψ_2 – соответствующие компоненты E и ψ .

Собственные энергии для данной системы так же можно разделить на две составные части. Первая – для периодической системы [9]. Вторая часть обусловлена ближним взаимодействием и наличием точечной неоднородности потенциала. Следовательно, ввод случайного дефектного энергетического центра с энергией E_d , даст общий спектр вида:

$$\begin{cases} E_c = E_a + C_- + 2A_- \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}); \\ E_d = (E_a + E_{a-1})/2 + C_d + \xi, \end{cases}$$

где \mathbf{k} – волновой вектор; \mathbf{a} – период решетки.

Решение для E_c схоже с решением для кристаллической структуры [8], но с константами C_- и A_- присущими рассматриваемой решетке. Второе уравнение относительно E_d является встроенным энергетическим состоянием в запрещенной зоне. В нем энергии E_a и E_{a-1} определяются энергетическими уровнями в изолированном атоме. Константа C_d отвечает за смещение энергетического уровня в структуре, которое связано с взаимодействием периодической решетки и дефекта [9]. Эти два поправочных коэффициента, в общем случае, зависят друг от друга. Именно в них заложена физика взаимодействия локальной неоднородности с базовой периодичностью. Эту взаимосвязь необходимо рассматривать при более строгом описании неоднородной структуры, а при условии слабого взаимодействия их можно считать константами. Смещение по энергии ξ отвечает за детализацию выбранного локализованного центра в щели подвижности.

Другой вид неоднородности, который дает отличное от предыдущего разупорядоченное состояние, задается по аналогии, но со своим энергетическим смещением. Последовательное увеличение количества типов дефектов до m позволяет задать нужную гамму энергий, которую можно описать как:

$$\begin{cases} E_{d1} = (E_a + E_{a-1})/2 + C_{d1} + \xi_1; \\ E_{d2} = (E_a + E_{a-1})/2 + C_{d2} + \xi_2; \\ \mathbf{L} \\ E_{dm} = (E_a + E_{a-1})/2 + C_{dm} + \xi_m. \end{cases}$$

Принимая единый подход к описанию всех дефектов, общее энергетическое распределение всей структуры можно записать в виде:

$$\begin{cases} E_c = E_a + C_- + 2A_- \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}); \\ E_{dj} = (E_a + E_{a-1})/2 + C_{dj} + \xi_j, \end{cases} \quad (1)$$

где j – номер типа дефекта, который меняется от 1 до m .

Количественную оценку каждого типа дефекта можно задать из предложения равномерности распределения его составляющих по объему материала. Это в свою очередь дает возможность ввода псевдо периодичности дефектов. Кроме того, необходимо учитывать локализацию каждого объекта в запрещенной зоне кристалла. Поэтому векторную форму системы (1) в пространстве волнового вектора \mathbf{k} можно записать как:

$$\begin{cases} E_c = E_a + C_- + 2A_- \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}); \\ E_{dj} = \left(\frac{E_a + E_{a-1}}{2} + C_{dj} + \xi_j \right) \Theta_j, \end{cases} \quad (2)$$

где $\Theta_j = (1 + \sqrt{\ln(\cos(2\pi \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j))})$.

Коэффициент b_j определяется отношением дефектных центров N_{dj} к количеству атомов в базовой решетке N_c :

$$b_j = \alpha \frac{N_{dj}}{N_c},$$

а коэффициент пропорциональности α определяется структурой периодической решетки и, в общем случае, также является векторной величиной.

Подобное распределение позволяет, в первом приближении, описать энергетическую структуру разупорядоченного материала с конечным числом неоднородностей. Первое уравнение характеризует положение зоны проводимости и фактически дает оптическую ширину запрещенной зоны некристаллического полупроводника. Второе уравнение описывает как количественную, так и качественную оценку дефектных центров.

Последовательное смещение по $E_{dj} = \frac{E_a + E_{a-1}}{2} + C_{dj} + \xi_j$ в запрещенной зоне E_g для j -типа дефекта дает спектр локализованных центров. Количественную характеристику каждого типа неоднородности обуславливает его периодичность, а, следовательно, во втором уравнении системы (2) $|\mathbf{b}_j| = b_j$.

Таким образом, задавая качественный ξ_j и количественный b_j параметры, можно, посредством системы (2), с заданной точностью описать неупорядоченную структуру с локализованными центрами в щели подвижности [10].

Однако, полное описание поликристаллического, а тем более аморфного состояния, является сложным и громоздким формализмом. Система (2) не намного упрощает описание подобных структур в сравнении с другими моделями, например, определением плотностей состояний через функции Грина [8, 9]. Но отдельные фрагменты дефектности вещества можно наглядно представить через собственные функции электронной составляющей, задав их энергетический спектр зависимостями (2). При этом важным аспектом является согласование теоретической модели с экспериментальными параметрами рассматриваемых материалов.

2. Результаты экспериментальных исследований

Моделирование выделенного частотного диапазона водородной части дефектной составляющей аморфного гидрогенизированного кремния [11] (рис. 1) в диапазоне смещения энергии 0,07...0,3 эВ осуществлялось путем подбора ξ_j и b_j системы (2).

Моногидридная группа Si-H была представлена двумя модами. Валентная задавалась через параметры $\xi_1 = 0,652$ эВ и $b_1 = 5,1 \cdot 10^{-4}$ см, качание – $\xi_2 = 0,821$ эВ и $b_2 = 5,1 \cdot 10^{-4}$ см.

Двухводородный комплекс H-Si-H описывался следующими значениями параметров ξ и b : валентные колебания – $\xi_3 = 0,640$ эВ и $b_3 = 5,2 \cdot 10^{-3}$ см, осевые колебания для «ножниц» – $\xi_4 = 0,791$ эВ и $b_4 = 5,2 \cdot 10^{-3}$ см, для Y-качаний $\xi_5 = 0,795$ эВ и $b_5 = 5,2 \cdot 10^{-3}$ см.

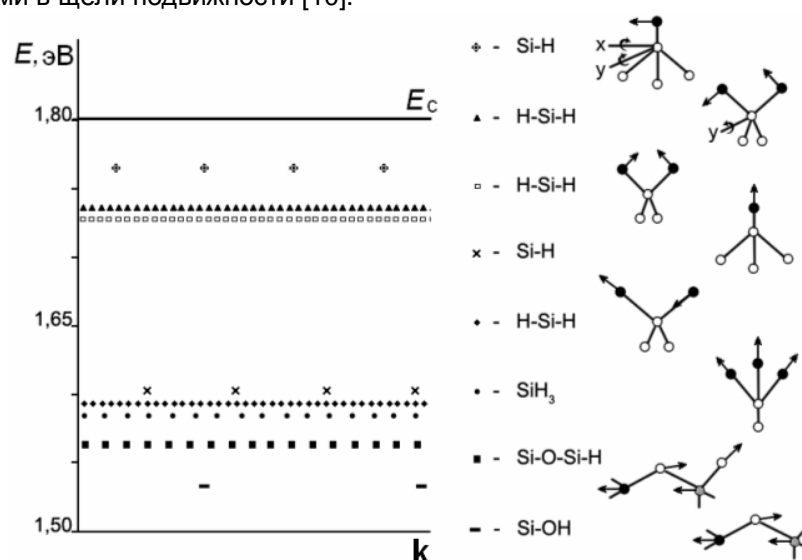


Рис. 1. Распределение водородной составляющей энергетического спектра

Энергетическое описание валентной SiH_3 моды задавалось как $\xi_6 = 0,637$ эВ и $b_6 = 2,1 \cdot 10^{-3}$ см.

Кислородные комплексы с водородом в расчете, который приведен на рис. 1, описывались следующими коэффициентами. Для Si-HO принято $\xi_7 = 0,572$ эВ и $b_7 = 2,2 \cdot 10^{-4}$ см. Моногбридная четырехатомная группа Si-O-Si-H определялась параметрами $\xi_8 = 0,608$ эВ и $b_8 = 2,3 \cdot 10^{-3}$ см, хотя ее подбор достаточно проблематичен в виду широкого спектра данной моды. Однако, именно предлагаемый модельный подход позволяет методом последовательных приближений по ξ подобрать расположение энергетического уровня в хвосте зоны.

Дальнейшее интегрирование по каждому типу дефектов позволяет определить относительный показатель количества неоднородностей. Сопоставляя эти значения с экспериментальными спектрами, можно судить о дефектности исследуемого материала, отслеживая при этом изменение его свойств в зависимости от технологических операций и условий его получения.

Динамика изменения энергетического спектра локализованных состояний в зависимости от технологических условий получения образцов рассмотрена на пленках гидрированного кремния. Экспериментальные образцы получены методом магнетронного распыления на постоянном токе кристаллической мишени монокристаллического кремния в аргоноводородной

плазме [12]. Низкоэнергетический спектр рассматриваемых центров был определен из зависимостей коэффициентов пропускания и отражения в длинноволновом ИК-диапазоне. Результаты моделирования интенсивности I пиков поглощения в частотном диапазоне f от 1700 до 2600 см^{-1} и их сравнение с экспериментальными данными представлены на рис. 2. Сплошными линиями изображены экспериментальные кривые центров взаимодействия для образцов, полученных при различных парциальных давлениях водорода: кривая 1 – 0 %, 2 – 30 %, 3 – 40 %. Точками обозначены рассчитанные по системе (2) концентрации водородосодержащих мод выбранного частотного диапазона.

Рассчитанные значения параметров ξ_j и b_j для каждой серии эксперимента приведены в таблице. Анализ динамики ξ_j и b_j при изменении условий осаждения показал значительную модификацию моногбридной группы Si-O-Si-H с $\xi_8 = 0,608$ эВ и валентных Si-H и SiH_3 с $\xi_1 = 0,652$ эВ и $\xi_6 = 0,637$ эВ соответственно. А это, в свою очередь, приводит к выводу, что изменение дефектного спектра гидрогенизированного кремния обусловлено возрастанием валентных энергетических центров, что совпадает с результатами [12]. Дальнейший анализ динамики изменения значений b_j с увеличением концентрации водорода в аргоноводородной плазме показывает значительное возрастание всей гаммы водородосодержащих дефектов именно при повышении парциального давления H_2 с 30 до 40 %.

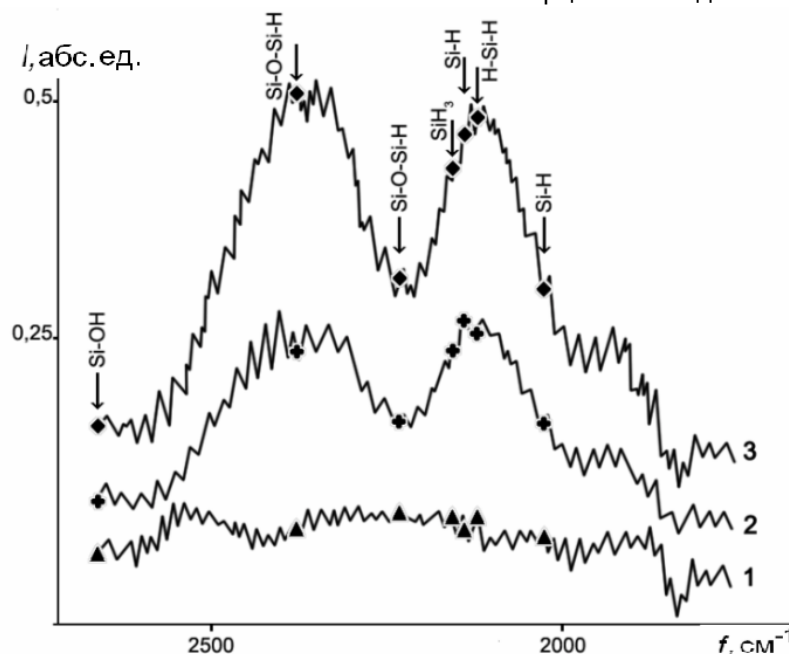


Рис. 2. Экспериментальные кривые и теоретические точки энергетических центров

Это, в первую очередь, обусловлено увеличением вероятности взаимодействия атомов твердой фазы с газообразной компонентой, что в результате дает уменьшение оборванных Si-связей и оптической ширины запрещенной зоны [12]. Однако следует отметить, что содержание водорода в самой пленке при этом не контролировалось.

Таблица. Расчетные параметры

Моды	ξ_j , эВ	$b_j \cdot 10^4$ см		
		0 %	30 %	40 %
Si-OH	0,572	0,7	1,1	1,8
Si-O-Si-H	0,608	1,0	2,5	4,8
Si-O-Si-H	0,627	0,9	1,9	3,1
(SiH ₂) _n	0,634	0,9	2,4	4,0
SiH ₃	0,638	0,8	2,5	4,3
Si-H	0,639	0,8	2,8	4,7
H-Si-H	0,641	0,8	2,6	4,7
Si-H	0,653	0,7	1,8	3,2

Относительно высокие показатели b_8 для ξ_8 и наличие b_7 при ξ_7 дает основание говорить о недостаточно хороших условиях водородной пассивации образцов и большой концентрации кислорода в рабочем объеме. Подтверждением этого могут служить температурные зависимости проводимости и малые энергии активации рассматриваемых образцов [12].

Выводы

Предложенный модельный подход к описанию дефектности в неупорядоченных полупроводниковых структурах позволяет использовать детализацию квантового подхода для неупорядоченной структуры. На основе предположения о периодичности дефектов в матрице базовой решетки кристалла вводятся качественные ξ_j и количественные b_j параметры, которые позволяют проследить изменения внутренней структуры полупроводника в зависимости от его состояния и условий получения. На наш взгляд магнетронный метод не позволяет получить достаточную степень гидрирования получаемых пленок кремния, поскольку обусловлен слабым взаимодействием нейтральных кремниевых атомов и их наноагломератов с нейтральными атомами водорода. Таким образом, количественное изменение состава водорода в растущей пленке не обеспечивается.

На основе предложенной модели рассмотрена динамика изменения свойств пленок гидрогенизированного кремния, полученных методом магне-

тронного распыления в аргоноводородной плазме. Показано, что основное увеличение всей гаммы водородосодержащих дефектов происходит при возрастании парциального давления водорода с 30 до 40 %. А относительно высокие показатели b_8 для ξ_8 , приводят к выводу о плохих условиях гидрирования образцов и большой концентрации кислорода в исходной смеси рабочих газов.

Литература

1. Сазонов А., Мейтин М., Страхилев Д., Nathan A. Низкотемпературные материалы и тонкопленочные транзисторы для электроники на гибких подложках // Физика техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, № 8. – С. 986–994.
2. Jyi-Tsong Lin, Kuo-Dong Huang. A High-Performance Polysilicon Thin-Film Transistor Built on a Trenched Body // Electron Devices, IEEE Transactions on. – 2008. – Vol.55, № 9. – P. 2417–2422.
3. Займан Дж. Модели беспорядка. – М.: Мир, 1982. – 591 с.
4. Аморфные полупроводники / Под ред. М. Бродски. – М.: Мир, 1982. – 420 с.
5. Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1985. – 184 с.
6. Physics of Structurally Disordered Solids / Edited by S.S. Mitra – N. Y.: Plenum Press, 1976. – 351 p.
7. Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И. Квантовая физика твердого тела. – М.: Наука, 1983. – 336 с.
8. Ridley B.K. Quantum processes in semiconductor. – Oxford University Press, 1982. – 302 p.
9. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1987. – Т.3. – 679 с.
10. Модель фотогенерации и переноса носителей в структуре a-Si:H/c-Si / М.А. Быков, А.М. Быков, С.А. Зуев, А.С. Мазинов, Н.И. Слипенченко, Д.А. Унжаков // Прикладная радиоэлектроника. – 2008. – № 7. – С. 71–76.
11. Онищук А.А., Панфилов В.Н. Механизм термического разложения силанов // Успехи химии. – 2001. – Т.70, вып. 4. – С. 368–379.
12. 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, г. Симферополь

²Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»