

©1994 г.

## ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЕ К СПЕКТРОСКОПИИ ПОГРАНИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

*К. М. Доцанов*

Физико-технический институт Научно-производственного объединения «Физика-Солнце» Академии наук Узбекистана, 700084, Ташкент, Узбекистан (Получена 21 января 1994 г. Принята к печати 28 марта 1994 г.)

Получено обобщенное выражение для статической вольт-амперной характеристики цепочки одинаковых полупроводниковых бикристаллов. При этом учитывается зависимость концентрации носителей в объеме зерен от приложенного напряжения, что приводит к некоторым новым выводам относительно нелинейной электропроводности поликристаллов.

Электрофизические свойства поликристаллических полупроводников в значительной мере определяются электронными процессами на границах зерен [1]. Для количественного описания этих процессов необходимо иметь полную информацию о спектре пограничных состояний (ПС). Развита в работе [2] теория адмиттанса границы зерен указывает на принципиальную возможность получения такой информации из анализа динамических характеристик электропроводности поликристалла. Однако использованный в [2] довольно искусственный метод расчета адмиттанса затрудняет применение этой теории для целей спектроскопии ПС. Далее представлена новая теория динамической электропроводности поликристаллических полупроводников, которая позволяет, как мы полагаем, более успешно решать задачи спектроскопии ПС. Данная работа является дальнейшим развитием обобщенной модели переноса заряда в поликристаллах, предложенной в нашей предыдущей работе [3].

### 1. Вывод основных уравнений

Как и в [3], рассмотрим в качестве одномерной модели поликристалла цепочку из  $N$  одинаковых бикристаллов с проводимостью  $n$ -типа и акцепторными ПС. Захват носителей заряда на ПС приводит к изгибу зон в зернах, что ограничивает перенос заряда между зернами.

Эффект рассеяния носителей непосредственно на самой границе зерен будем моделировать потенциальным барьером с высотой  $V_n$  и шириной  $\delta$  ( $\delta$  — толщина границы зерен) (см. рис. 1) [4,5]. При наложении на цепочку переменного напряжения  $NU(t)$ , где  $U(t)$  — напряжение на одном бикристалле, величина изгиба зон определяется выражением

$$V(x, t) = \begin{cases} e \int_{-l_2(t)-\delta}^x \mathcal{E}(x', t) dx', & -l_2(t) < x + \delta < 0, \\ -e \int_x^{l_1(t)} \mathcal{E}(x', t) dx', & 0 < x < l_1(t), \end{cases} \quad (1)$$

где  $e$  — абсолютная величина заряда электрона,  $l_1(t) + l_2(t) = l$ ,  $l$  — размер зерен,  $\mathcal{E}(x, t)$  — напряженность электрического поля. Если пренебречь падением напряжения на границе зерен, то  $V_2(t) - V_1(t) = eU(t)$ , где  $V_1(t) = V(0, t)$  — высота межкристаллического барьера справа от границы зерен,  $V_2(t) = V(-\delta, t)$  — слева от границы зерен. Напряженность  $\mathcal{E}(x, t)$  удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(-l_2 - \delta, t) &= \mathcal{E}(l_1, t) = 0, \\ \mathcal{E}_1(t) - \mathcal{E}_2(t) &= Q_s(t)/\varepsilon_0\varepsilon, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\mathcal{E}_1(t) = \mathcal{E}(0, t)$ ,  $\mathcal{E}_2(t) = \mathcal{E}(-\delta, t)$ ,  $\varepsilon_0\varepsilon$  — абсолютная диэлектрическая проницаемость материала зерен,

$$Q_s(t) = -e \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) f_s(E, t) dE \quad (3)$$

— поверхностная плотность заряда на границе зерен,  $N_s(E)$  — поверхностная плотность ПС [ $N_s(E) = N(E)\delta$ ,  $N(E)$  — объемная плотность ПС],  $f_s(E, t)$  — функция распределения электронов на ПС.

В отсутствие вырождения электронного газа плотность тока  $j(t)$  в объеме зерен определяется выражениями

$$j(t) = j_n(x, t) + \varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}(x, t)}{\partial t}, \quad (4)$$

$$j_n(x, t) = e\mu_n n(x, t)\mathcal{E}(x, t) + \mu_n kT \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}, \quad (5)$$

где  $\mu_n$  и  $n(x, t)$  — подвижность и концентрация электронов в объеме зерен,  $T$  — абсолютная температура,  $k$  — постоянная Больцмана.

Электронные процессы на границе зерен учитываются с помощью следующих граничных условий [3]:

$$j_n(0, t) = j_T(t) + ev_R(t)n_1(t) - j_{em}(t), \quad (6)$$

$$j_n(-\delta, t) = j_T(t) - ev_R(t)n_2(t) + j_{em}(t), \quad (7)$$

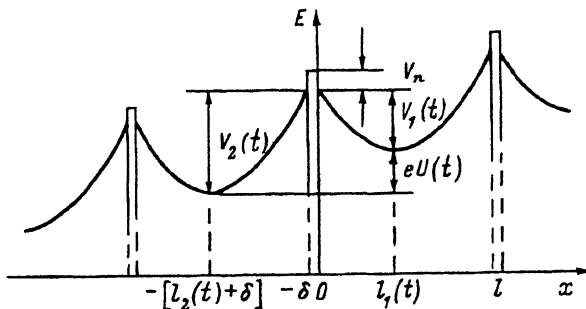


Рис. 1. Энергетическая диаграмма цепочки одинаковых бикристаллов при наложении на нее переменного напряжения.  $V_n$  — высота рассеивающего барьера границы зерен,  $V_1(t)$  и  $V_2(t)$  — высота межкристаллитного барьера справа и слева от границы зерен,  $U(t)$  — переменное напряжение на каждом бикристалле.

где  $j_T(t)$  — плотность туннельного тока через границу зерна,  $n_1(t) = n(0, t)$ ,  $n_2(t) = n(-\delta, t)$ ,

$$v_R(t) = v_0 S \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) [1 - f_s(E, t)] dE \quad (8)$$

— скорость захвата электрона на ПС,  $v_0 = \sqrt{kT/2\pi m^*}$  — средняя тепловая скорость электронов,  $m^*$  — эффективная масса электронов,  $S$  — сечение захвата на ПС (для простоты предполагается, что  $S$  не зависит от  $E$ ),

$$j_{em}(t) = ev_0 N_c S \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) f_s(E, t) \exp\left(-\frac{E_c - E}{kT}\right) dE \quad (9)$$

— плотность тока эмиссии с ПС в каждое из соседних зерен,  $N_c$  — эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

Из (2), (4), (6), (7) находим

$$j(t) = j_T(t) + \frac{1}{2} ev_R(t) [n_1(t) - n_2(t)] + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{2} \frac{d}{dt} [\mathcal{E}_1(t) + \mathcal{E}_2(t)], \quad (10)$$

$$-\frac{dQ_s(t)}{dt} = ev_R(t) [n_1(t) + n_2(t)] - 2j_{em}(t). \quad (11)$$

Решая уравнение (5), имеем

$$n_{1,2}(t) = n_0(t) e^{-z_{1,2}(t)} \mp \frac{1}{ev_{d1,2}} \left[ j(t) - \varepsilon_0 \varepsilon \frac{d\mathcal{E}_{1,2}(t)}{dt} \right], \quad (12)$$

где  $n_0(t) = n(l_1, t) = n(-l_2 - \delta, t)$ ,  $z_{1,2}(t) = V_{1,2}(t)/kT \gg 1$ ,  $v_{d1,2} = \mp \mu_n \mathcal{E}_{1,2}(t)$ .

При  $[\tau_M/U(t)]dU(t)/dt \ll 1$  ( $\tau_M = \varepsilon_0\varepsilon/\mu_n N_d$  — максвелловское время релаксации,  $N_d$  — концентрация полностью ионизованных доноров) величины  $V_{1,2}(t)$ ,  $\mathcal{E}_{1,2}(t)$ ,  $n_0(t)$  связаны с  $U(t)$  и  $Q_s(t)$  такими же соотношениями, какие имеют место при постоянном напряжении на концах пепочки [3]:

$$V_{1,2}(t) = \frac{Q_s^2(t)}{8\varepsilon_0\varepsilon N_d} (1 \mp \beta)^2, \quad \beta = \frac{2eU(t)\varepsilon_0\varepsilon N_d}{Q_s^2(t)}, \quad (13)$$

$$\mathcal{E}_{1,2}(t) = \pm \frac{Q_s(t)}{2\varepsilon_0\varepsilon} (1 \mp \beta), \quad (14)$$

$$n_0(t) = \frac{1}{2} N_d \xi(t) \left[ \sqrt{\xi^2(t) + 4} - \xi(t) \right], \quad (15)$$

$$\xi(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{l}{l_D} \left( 1 + \frac{Q_s(t)}{eN_d l} \right) \left[ \operatorname{erf} \left( \sqrt{z_1(t)} \right) + \operatorname{erf} \left( \sqrt{z_2(t)} \right) \right]^{-1},$$

где  $l_D = \sqrt{\varepsilon_0\varepsilon kT/e^2 N_d}$  — дебаевская длина экранирования. Плотность туннельного тока через границу зерен определяется выражениями [3]

$$j_T(t) = ev_0 \bar{D}_n [n_1(t) - n_2(t)], \quad (16)$$

$$\bar{D}_n = (kT)^{-2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE \int_0^E D_n(E, E_{\parallel}) dE_{\parallel},$$

где  $D_n(E, E_{\parallel})$  — прозрачность границы зерен для электронов с энергией  $E$  и поперечным импульсом  $p_{\parallel}$  ( $E_{\parallel} = p_{\parallel}^2/2m^*$ ).

Окончательное выражение для плотности нестационарного тока имеет вид

$$j(t) = \frac{ev_0 n_0(t) \Theta(t)}{1 + \gamma} \left[ e^{-z_1(t)} - e^{-z_2(t)} \right] - \frac{\varepsilon_0\varepsilon e N_d}{Q_s(t)} \frac{dU(t)}{dt} + \frac{\beta(1 + 2\gamma)}{2(1 + \gamma)} \frac{dQ_s(t)}{dt}, \quad (17)$$

где  $\Theta(t) = \bar{D}_n + v_R(t)/2v_0$ ,  $\gamma(t) = v_0(v_{d1}^{-1} + v_{d2}^{-1})\Theta(t)$ . Вычисляя сумму  $n_1(t) + n_2(t)$ , выражение (11) можно переписать в виде

$$- \left[ 1 - \frac{1 + \gamma(1 - \beta^2)}{(1 + \gamma)(1 - \beta^2)} \frac{2ev_R N_d \tau_M}{Q_s(t)} \right] \frac{dQ_s(t)}{dt} = 2ev_R N_d \Phi(t) - 2j_{em}, \quad (18)$$

$$\Phi(t) = \frac{n_0(t)}{2N_d} \left[ e^{-z_1(t)} + e^{-z_2(t)} - \frac{\gamma\beta}{1 + \gamma} \left( e^{-z_1(t)} - e^{-z_2(t)} \right) \right]. \quad (19)$$

Далее будем полагать, что  $eN_d v_R \tau_M / |Q_s| \sim SN_d v_0 \tau_M \ll 1$ , и пренебрегать этим членом в (18). Используя (3), (8) и (9), из (18) находим

$$\tau_0 \frac{\partial f_s(E, t)}{\partial t} = \Phi(t) [1 - f_s(E, t)] - \frac{N_c}{N_d} f_s(E, t) \exp\left(-\frac{E_c - E}{kT}\right), \quad (20)$$

где  $\tau_0 = (2v_0 N_d S)^{-1}$ . Уравнения (17) и (20) полностью определяют перенос заряда в рассматриваемом модельном поликристалле.

## 2. Адмиттанс поликристалла

Рассмотрим уравнения (17), (20) при

$$U(t) = U_0 + U_1 e^{i\omega t}, \quad (21)$$

где  $U_0$  — постоянное смещение,  $U_1$  и  $\omega$  — амплитуда и частота малого сигнала ( $eU_1 \ll kT$ ). Для упрощения формул будем полагать, что  $\gamma \ll 1$ . Обобщение теории на общий случай не вызывает принципиальных затруднений.

Зависимость от времени плотности заряда на границе зерен определяется выражением

$$-Q_s(t) = q_0 + q_1 e^{i\omega t}. \quad (22)$$

Учитывая (21) и (22), имеем

$$\Phi(t) = \Phi_0 + \Phi_1 e^{i\omega t}, \quad (23)$$

$$\Phi_0 = \frac{n_0}{N_d} \exp[-z_0(1 + \beta_0^2)] \operatorname{ch} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right), \quad (24)$$

$$n_0 = \frac{1}{2} N_d \xi_0 \left( \sqrt{\xi_0^2 + 4} - \xi_0 \right), \quad (25)$$

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{l}{l_D} \left( 1 - \frac{C_0}{C_{hf}} \right) \left( \operatorname{erf} \left[ \sqrt{z_0}(1 - \beta_0) \right] + \operatorname{erf} \left[ \sqrt{z_0}(1 + \beta) \right] \right)^{-1}, \quad (26)$$

$$\Phi_1 = \Phi_0 \left[ F(U_0) \frac{eU_1}{2kT} - 2z_0(1 - \beta_0^2 + a) \frac{q_1}{q_0} \right], \quad (27)$$

$$a = \frac{4kTC_{hf}^2}{e^2 N_d l (C_{hf} - C_0)} \left( 1 - \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + 4}} \right), \quad (28)$$

где  $z_0 = V_0/kT$ ,  $V_0 = q_0^2/8\varepsilon_0\varepsilon N_d$ ,  $\beta_0 = eU_0/4V_0$ ,  $C_0 = \varepsilon_0\varepsilon/l$  — геометрическая емкость зерна,  $C_{hf} = \varepsilon_0\varepsilon e N_d/q_0$  — высокочастотная емкость бикристалла (см. далее),  $F(U_0) = \operatorname{th}(eU_0/2kT) - \beta_0$ .

Решение уравнения (20) имеет вид

$$f_s(E, t) = f(E, F_s) + \frac{\Phi_1 f(E, F_s) [1 - f(E, F_s)] e^{i\omega t}}{\Phi_0 [1 + i\omega\tau f(E, F_s)]}, \quad (29)$$

где  $f(E, F_s)$  — функция распределения Ферми-Дирака,  $F_s = E_c + kT \ln(N_d \Phi_0/N_c)$  — положение квазиуровня Ферми на границе зерен при постоянном смещении  $U_0$ ,  $\tau = \tau_0/\Phi_0$ . Из соотношений (3), (22), (27), (29) находим

$$q_0 = e \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) f(E, F_s) dE, \quad (30)$$

$$q_1 = \frac{q_0 F(U_0) \alpha}{1 + 2z_0(1 - \beta_0^2 + a) \alpha} \cdot \frac{eU_1}{2kT}, \quad (31)$$

$$\alpha = \frac{e}{q_0} \int_{E_v}^{E_c} \frac{N_s(E) f(E, F_s) [1 - f(E, F_s)] dE}{1 + i\omega\tau f(E, F_s)}. \quad (32)$$

Для плотности тока имеем

$$j(t) = j_{dc} + j_1 e^{i\omega t}, \quad (33)$$

$$j_{dc} = 2ev_0 n_0 \Theta_0 \exp \left[ -z_0(1 + \beta_0^2) \right] \text{sh}(eU_0/2kT), \quad (34)$$

$$j_1 = (G_0 + i\omega C_{hf}) U_1 - \left[ 2z_0 \left( 1 - \beta_0^2 + a + \frac{C_{hf}}{C_1} \right) j_{dc} + i\omega \frac{\beta_0 q_0}{2} \right] \frac{q_1}{q_0}, \quad (35)$$

$$G_0 = \frac{ej_{dc}}{2kT} \left[ \text{cth} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right) - \beta_0 \right], \quad (36)$$

где  $\Theta_0 = \bar{D}_n + S \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) [1 - f(E, F_s)] dE/2$ ,  $C_1 = e^2 \Theta_0 / 2kTS$ . Подставляя (31) в (35) и учитывая соотношение

$$\frac{ej_{dc}\tau}{2kT} = C_1 \text{th} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right), \quad (37)$$

находим выражение для адмиттанса каждого из бикристаллов цепочки:

$$Y = j_1/U_1 = G_0 + i\omega C_{hf} - F(U_0) \left( \frac{ej_{dc}}{2kT} + \frac{C_{hf}}{\tau(1 - \beta_0^2 + a)} \left[ \text{th} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right) + i\omega\tau\beta_0 \right] \right) \frac{2z_0(1 - \beta_0^2 + a)\alpha}{1 + 2z_0(1 - \beta_0^2 + a)\alpha}. \quad (38)$$

Определим проводимость  $G = \text{Re}Y$  и емкость  $C = \text{Im}Y/\omega$  для двух конкретных распределений плотности ПС.

1. Моноэнергетические ПС:  $N_s(E) = N_s \delta(E - E_s)$ . В этом случае  $q_0 = eN_s f(E_s, F_s)$ ,

$$\alpha = \frac{1 - f(E_s, F_s)}{1 + i\omega\tau f(E_s, F_s)}. \quad (39)$$

Подставляя (39) в (38), находим

$$G = G_{dc} + \frac{\omega^2 \tau_1 C_d}{1 + \omega^2 \tau_1^2}, \quad (40)$$

$$C = C_{hf} + \frac{C_d}{1 + \omega^2 \tau_1^2}, \quad (41)$$

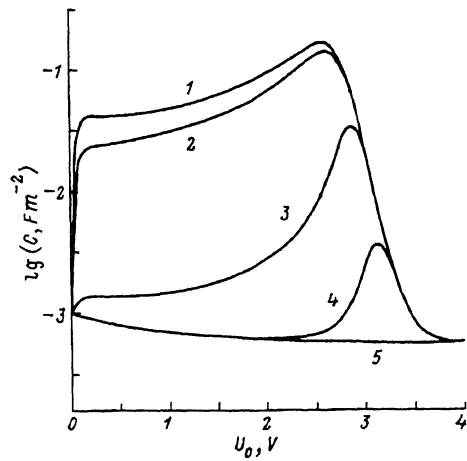
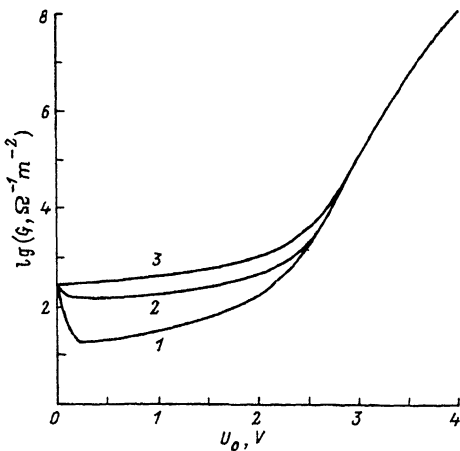


Рис. 2. Зависимость проводимости  $G$  каждого бикристалла цепочки от постоянного смещения  $U_0$  в случае моноэнергетических пограничных состояний. 1 —  $G_{dc}(\omega = 0)$ , 2 —  $\omega = 2\pi \cdot 10^3$  с $^{-1}$ , 3 —  $G_{hf}$  — высокочастотная проводимость.

Рис. 3. Зависимость емкости  $C$  каждого бикристалла цепочки от постоянного смещения  $U_0$  при различных частотах  $\omega$  в случае моноэнергетических пограничных состояний. 1 —  $C_{dc}(\omega = 0)$ ;  $\omega$ , с $^{-1}$ : 2 —  $2\pi \cdot 10^3$ , 3 —  $2\pi \cdot 10^4$ , 4 —  $2\pi \cdot 10^5$ ; 5 —  $C_{hf}$ .

$$G_{dc} = G_0 - \left[ \frac{e j_{dc}}{2kT} + \frac{C_{hf}}{\tau(1 - \beta_0^2 + a)} \operatorname{th} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right) \right] \frac{A_0 F(U_0)}{1 + A_0}, \quad (42)$$

$$C_d = \left( \frac{e j_{dc} \tau_1}{2kT} + \frac{C_{hf}}{1 - \beta_0^2 + a} \left[ \frac{\tau_1}{\tau} \operatorname{th} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right) - \beta_0 \right] \right) \frac{A_0 F(U_0)}{1 + A_0}, \quad (43)$$

где  $A_0 = 2z_0(1 - \beta_0^2 + a)[1 - f(E_s, F_s)]$ ,  $\tau_1 = \tau f(E_s, F_s)/(1 + A_0)$ . Как и в [2], соотношения (40) и (41) имеют дебаевскую форму. Однако  $G_{dc}$ ,  $C_d$  и  $\tau_1$  определены иначе, чем в работе [2].

На рис. 2 и 3 представлены результаты численных расчетов  $G$  и  $C$  для бикристалла ZnO со значениями параметров:  $N_d = 3 \cdot 10^{17}$  см $^{-3}$ ,  $\epsilon = 8.5$ ,  $s = 2.5 \cdot 10^{-14}$  см $^2$ ,  $E_c - E_s = 0.6$  эВ,  $N_s = 4 \cdot 10^{12}$  см $^{-2}$  (см. [2]),  $N_c = 4.54 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $v_0 = 4.75 \cdot 10^6$  см/с,  $a \ll 1$  ( $l \gg l_D$ ),  $\bar{D}_n = 1$ . Отметим, что кривые 2 и 3 на рис. 3 значительно отличаются от соответствующих кривых работы [2].

## 2. Ступенчатое распределение плотности ПС:

$$N_s(E) = \begin{cases} N_1, & E_v < E < E_c - E_1, \\ N_2, & E_c - E_1 < E < E_c, \end{cases} \quad (44)$$

где  $N_1$  и  $N_2$  — постоянные величины. В этом случае имеем

$$\alpha = \frac{ekTN_1}{i\omega\tau q_0} \ln \left[ \frac{(1 + i\omega\tau)(1 + i\omega\tau f_1)^{p-1}}{(1 + i\omega\tau f_c)^p} \right], \quad (45)$$

где  $f_1 = f(E_c - E_1, F_s)$ ,  $f_c = f(E_c, F_s)$ ,  $p = N_2/N_1$ .

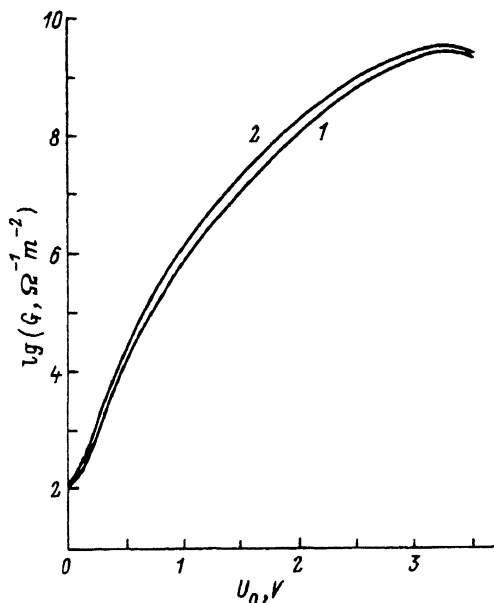


Рис. 4. Зависимость проводимости  $G$  каждого бикристалла цепочки от постоянного смещения  $U_0$  в случае ступенчатого распределения пограничных состояний. 1 —  $G_{dc}$  ( $\omega = 0$ ), 2 —  $G_{hf}$ .

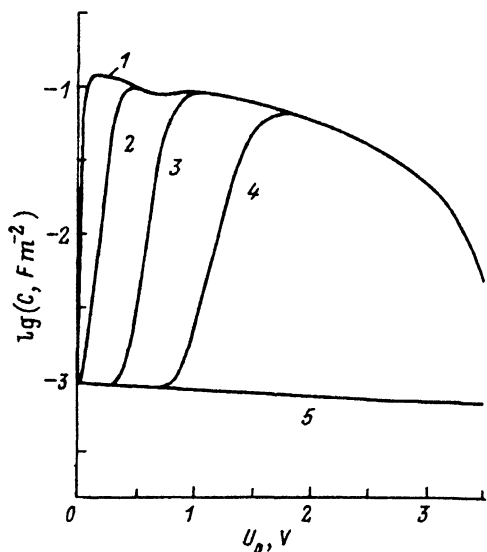


Рис. 5. Зависимость емкости  $C$  каждого бикристалла цепочки от постоянного смещения  $U_0$  при различных частотах  $\omega$  в случае ступенчатого распределения пограничных состояний. 1 —  $C_{dc}$  ( $\omega = 0$ );  $\omega$ , с<sup>-1</sup>: 2 —  $2\pi \cdot 10^3$ , 3 —  $2\pi \cdot 10^5$ , 4 —  $2\pi \cdot 10^7$ ; 5 —  $C_{hf}$ .

На рис. 4 и 5 представлены результаты численных расчетов  $G$  и  $C$  при ступенчатом распределении плотности ПС (аналитические выражения для  $G$  и  $C$  не приводятся из-за их громоздкости). Использовались следующие значения параметров ПС:  $N_1 = 0.94 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>эВ<sup>-1</sup>,  $N_2 = 2 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>эВ<sup>-1</sup>,  $E_c - E_1 = 0.4$  эВ. Значения других параметров те же, что и в случае моноэнергетических ПС. На рис. 5 обращает на себя внимание небольшой провал на кривых 1 и 2 вблизи  $U_0 = 0.55$  В. Он обусловлен ступенчатым распределением плотности ПС, при этом  $E_c - F_s = 0.4$  эВ при  $U_0 = 0.55$  эВ, т.е. провал на кривой зависимости  $C(U_0)$  возникает при переходе квазиуровня Ферми через скачок в распределении плотности ПС.

Представленные на рис. 2-5 результаты показывают, что при низких частотах, когда малый сигнал вызывает перезарядку ПС, характер зависимостей  $G(U_0)$  и  $C(U_0)$  существенно зависит от вида  $N_s(E)$ .

### 3. Спектроскопия пограничных состояний

Выражения (32) и (38) позволяют вычислить  $G$  и  $C$  при любом конкретном виде  $N_s(E)$ . Однако для целей спектроскопии ПС значительно важнее обратная задача: определение функции  $N_s(E)$  по измеренным значениям  $G(U_0, \omega)$  и  $C(U_0, \omega)$ . С этой точки зрения более плодотворным оказывается приведенный далее приближенный расчет проводимости и емкости.



При низких температурах справедливы приближения

$$f(E, F_s) = \begin{cases} 1, & E < F_s, \\ 0, & E > F_s, \end{cases}$$

$$f(E, F_s)[1 - f(E, F_s)] = -kT \frac{\partial f(E, F_s)}{\partial E} = kT \delta(E - F_s).$$

Используя последнее соотношение из (32), находим

$$\alpha = \frac{eN_s(F_s)kT}{q_0} \frac{2}{2 + i\omega\tau}, \quad (46)$$

где  $N_s(F_s)$  — плотность ПС на квазиуровне Ферми. В этом приближении выражения для  $G$  и  $C$  имеют дебаевскую форму:

$$G = G_{dc} + \frac{\omega^2 \tau_2 C'_d}{1 + \omega^2 \tau_2^2}, \quad (47)$$

$$C = C_{hf} + \frac{C'_d}{1 + \omega^2 \tau_2^2}, \quad (48)$$

где  $\tau_2 = \tau/2(1 + A)$ ,  $A = eN_s(F_s)(1 - \beta_0^2 + a)/4C_{hf}$ ,  $\beta_0 = 2C_{hf}^2 U_0 / \epsilon_0 \epsilon e N_d$ ,  $G_{dc}$  — дифференциальная проводимость каждого из бикристаллов цепочки при  $\omega = 0$ ,

$$C'_d = \frac{e j_{dc} \tau_2}{2kT} \left[ 1 + \frac{C_{hf}}{C_1(1 - \beta_0^2 + a)} \left( 1 - \frac{2(1 + A)\beta_0}{\text{th} \left( \frac{eU_0}{2kT} \right)} \right) \right] \frac{AF(U_0)}{1 + A}.$$

Можно показать, что при  $z_0 \gg 1$  выполняется условие  $C_{hf}/C_1 \ll \ll 1$  (например, при значениях параметров, использованных выше,  $C_{hf}/C_1 \approx 10^{-3}$ ). Поэтому приближенно имеем

$$C'_d = \frac{e j_{dc} \tau_2 F(U_0) A}{2kT(1 + A)}. \quad (49)$$

Соотношения (47)–(49) позволяют явно выразить  $N_s(F_s)$  через экспериментально определяемые величины. Из (47), (48) имеем

$$\tau_2 = \frac{G - G_{dc}}{\omega^2(C - C_{hf})}. \quad (50)$$

Подставляя (50) в (48), находим

$$N_s(F_s) = \frac{4C_{hf}}{e(1 - \beta_0^2 + a)} \frac{(G - G_{dc})^2 + \omega^2(C - C_{hf})^2}{\frac{e j_{dc}}{2kT}(G - G_{dc})F(U_0) - (G - G_{dc})^2 - \omega^2(C - C_{hf})^2}, \quad (51)$$

где  $G$  и  $C$  — проводимость и емкость каждого из бикристаллов цепочки при постоянном смещении  $U_0$  и частоте сигнала  $\omega$ .

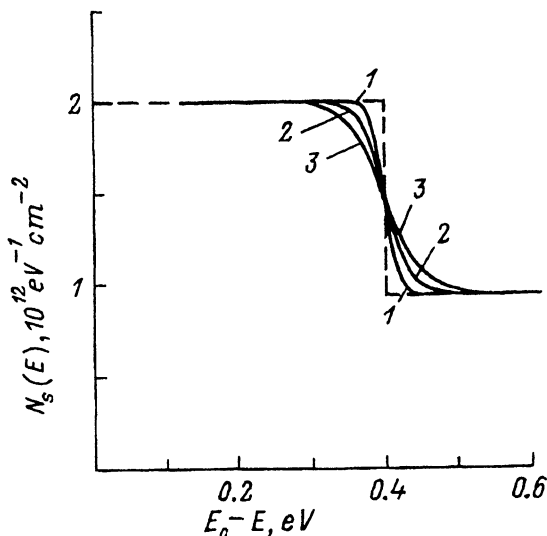


Рис. 6. Распределение плотности пограничных состояний  $N_s(E)$ , рассчитанное по формуле (52) при различных температурах  $T$ . Пунктир — заданное распределение плотности ПС вида (44).  
 $T$ , К: 1 — 100, 2 — 200, 3 — 300.

При высоких частотах ( $\tau_2^{-1} \ll \omega \ll \tau_M^{-1}$ )  $\omega(C - C_{hf}) \approx 0$  и формула (51) приобретает более простой вид

$$N_s(F_s) = \frac{4C_{hf}}{e(1 - \beta_0^2 + a)} \frac{G_{hf} - G_{dc}}{\frac{e j_{dc}}{2kT} F(U_0) - G_{hf} + G_{dc}}, \quad (52)$$

где  $G_{hf}$  — высокочастотная проводимость бикристаллов.

Если определено значение  $N_s(F_s)$ , то можно определить также отношение  $\Theta_0/S$ . Из (37), (50) имеем

$$\frac{\Theta_0}{S} = \frac{2(1 + A)j_{dc}(G - G_{dc})}{e\omega^2(C - C_{hf}) \operatorname{th}\left(\frac{eU_0}{2kT}\right)}. \quad (53)$$

Точность формул (51) и (52) при различных  $T$  и  $\omega$  можно оценить следующим образом. Задается конкретное распределение плотности ПС и с помощью соотношений (32), (38) вычисляются  $G(U_0, \omega)$  и  $C(U_0, \omega)$ . Эти точные значения проводимости и емкости используются для определения  $N_s(F_s)$  по одной из формул (51), (52). Затем полученные значения  $N_s(F_s)$  сравниваются с заданным распределением плотности ПС.

Проведенные расчеты показывают, что формула (51) определяет  $N_s(E)$  с высокой степенью точности только при достаточно низких температурах ( $T < 100$  К). Однако формула (52) дает вполне приемлемые результаты и при комнатной температуре. Это видно на рис. 6, где сравниваются результаты расчета  $N_s(E)$  по формуле (52) с заданным распределением плотности ПС вида (44).

Выраженный соотношениями (51)–(53) метод спектроскопии ПС предполагает, что из независимых экспериментальных исследований определены средний размер зерен и концентрация мелкой примеси в объеме зерен. Однако если измерения проводятся на одном бикристалле ( $a = 0$ ) и если они ограничиваются малыми смещениями ( $\beta_0 \ll 1$ ), то эти соотношения связывают параметры ПС только с измеряемыми статическими и динамическими характеристиками электропроводности.

#### 4. Заключение

В данной работе развит новый подход к расчету динамических характеристик электропроводности применительно к достаточно простой модели поликристаллического полупроводника. Поэтому здесь не приняты во внимание некоторые факторы, в той или иной мере влияющие на характер динамической электропроводности поликристаллов. Например, такие как наличие глубоких примесных центров в объеме зерен [6], эффект ударной генерации неосновных носителей заряда при больших по сравнению с равновесным изгибом зон постоянных смещениях [7], термоавтоэмиссионный перенос заряда через межкристаллитный барьер [8] и др. Пренебрежение этими факторами в рассматриваемой модели накладывает соответствующие ограничения на область применимости полученных результатов. Для целей спектроскопии ПС, по-видимому, наиболее важным является учет влияния на динамические характеристики электропроводности глубоких примесных центров в объеме зерен. В наших дальнейших исследованиях мы надеемся обобщить полученные в данной работе результаты, включив в рассмотрение этот фактор.

Автор выражает благодарность Узбекскому Фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку данного исследования.

#### Список литературы

- [1] *Поликристаллические полупроводники. Физические свойства и применение*, под ред. Г. Харбеке (М., 1989).
- [2] G.E. Pike. Phys. Rev. B, **30**, 795 (1984).
- [3] К.М. Дошчанов. ФТП, **28**, 692 (1994).
- [4] C.Y. Lu, N.C.C. Lu. Sol. St. Electron., **26**, 549 (1983).
- [5] M.M. Mandurah, K.C. Saraswat, C. Helms, T. Kamins. IEEE Trans. ED, **28**, 1163 (1981).
- [6] G. Blatter, F. Greuter, Phys. Rev. B, **33**, 3952 (1986).
- [7] G. Blatter, F. Greuter. Phys. Rev. B, **33**, 8555 (1986).
- [8] Е.И. Гольдман. ФТП, **21**, 95 (1987).

Редактор Т.А. Полянская

### The Generalized Model of Electroconductivity in Polycrystalline Semiconductors

*K.M. Doshchanov*

The generalized expression for steady-state I-V characteristics of a chain with identical semiconductor bicrystals was obtained. The dependance of carriers concentration in the grain volume on applied voltage is taken into account. This results in some new conclusions about nonlinear conductivity in polycrystals.