

Теория переноса заряда в поликристаллических полупроводниках с глубокими примесными центрами

© К.М. Доцанов

Физико-технический институт Научно-производственного объединения "Физика—Солнце" Академии наук Узбекистана, 700084 Ташкент, Узбекистан

(Получена 11 июня 1996 г. Принята к печати 16 декабря 1997 г.)

Исследуются статические и динамические свойства переноса заряда через электрически активные границы зерен в поликристаллических полупроводниках с глубокими примесными центрами в объеме зерен. Вычисляется адмиттанс границы зерен как функция частоты и приложенного постоянного смещения U_b . При $U_b \neq 0$ адмиттанс контролируется главным образом процессами перезарядки межзеренных пограничных состояний и в незначительной мере перезарядкой глубоких ловушек в объеме полупроводника. Рассматривается приложение этой теории к спектроскопии межзеренных пограничных состояний.

Введение

Теория переноса заряда в поликристаллических полупроводниках разрабатывалась в целом ряде работ [1–14]. Из результатов, полученных в [12], следует, что глубокие уровни (глубокие ловушки) в объеме зерен оказывают заметное влияние на статические и динамические характеристики электропроводности. Однако теория [12] основана на модели термоэлектронной эмиссии [2,3] с довольно ограниченной областью применения (см. по этому поводу работы [6–8]). Значительно более широкую область применения имеет обобщенная теория электропроводности поликристаллов [13], которая объединила ранние модели [1–8] на основе последовательного учета влияния границ зерен на перенос заряда. В данной работе на базе теории [13] развит новый подход к расчету статических и динамических характеристик электропроводности поликристаллических полупроводников с глубокими примесными центрами.

Как известно, спектроскопия межзеренных пограничных состояний (ПС), основанная на измерении адмиттанса, является эффективным методом изучения электронных свойств границ зерен [12]. Теоретическая основа этого метода разрабатывалась в [9–12] в рамках модели термоэлектронной эмиссии. В работе [14] был предложен другой способ расчета адмиттанса поликристалла. На наш взгляд, он позволяет более эффективно решать задачи спектроскопии ПС. В [14] не принимались во внимание глубокие уровни, связанные с фоновыми примесями в объеме зерен, что существенно ограничивает возможности применения полученных там результатов. Одной из целей данной работы является устранение этого ограничения.

1. Основные соотношения

Рассмотрим одномерную модель поликристаллического полупроводника — цепочку одинаковых бикристаллов с проводимостью зерен n -типа и акцепторными ПС. Пусть в объеме зерен наряду с мелкими донорами имеются глубокие центры как донорного, так и акцепторного типа, образующие в запрещенной зоне n -уровней

энергии E_ν ($\nu = 1, 2, 3, \dots, n$; $E_c - E_\nu < E_c - E_{\nu+1}$). Захват электронов на уровни ПС приводит к изгибу зон вблизи границ зерен (к образованию межкристаллитных барьеров). Как и в [12], будем полагать, что размер зерен значительно превосходит ширину межкристаллитного барьера, т. е. исключим возможность полного обеднения зерен [1,13]. На рис. 1 показана энергетическая диаграмма одного из бикристаллов цепочки.

Далее будут исследоваться закономерности переноса заряда в описанном выше модельном поликристалле при приложении к каждому его зерну переменного напряжения вида

$$U(t) = U_0 + \tilde{U} \exp(i\omega t), \quad (1)$$

где U_0 — постоянное смещение; \tilde{U} , ω — амплитуда и частота малого сигнала ($e\tilde{U} \ll kT$, где e — абсолютная величина заряда электрона, T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана). Будем полагать, что $\omega\tau_M \ll 1$, где $\tau_M = \epsilon_0\epsilon / (e\mu_n n_0)$ — максвелловское время релаксации в квазинейтральных областях зерен; n_0 , μ_n — концентрация и подвижность электронов в объеме зерен; $\epsilon_0\epsilon$ — абсолютная диэлектрическая проницаемость материала зерен. Это условие позволяет определить уравнение Пуассона в приближении Шоттки:

$$\frac{\partial \mathcal{E}(x, t)}{\partial x} = \frac{\rho(x, t)}{\epsilon_0\epsilon}, \quad (2)$$

$$\rho(x, t) = \begin{cases} eN_0 + \sum_{\nu=1}^n eN_\nu [1 - f_\nu(x, t)], \\ -l_2(t) < x + \delta < 0, & 0 < x < l_1(t), \\ 0, & x + \delta \leq -l_2(t), \quad x \geq l_1(t), \end{cases}$$

где $\rho(x, t)$ — переменная плотность объемного заряда в бикристаллах; $N_0 = N_d - N_A$, N_d — концентрация полностью ионизированных мелких доноров, N_A — полная плотность глубоких уровней акцепторного типа; N_ν — плотность уровня энергии E_ν ; $f_\nu(x, t)$ — нестационарная функция распределения электронов на уровне E_ν ; $l_1(t)$ — переменная ширина слоя обеднения справа от границы, $l_2(t)$ — слева от границы; δ — ширина границы зерен.

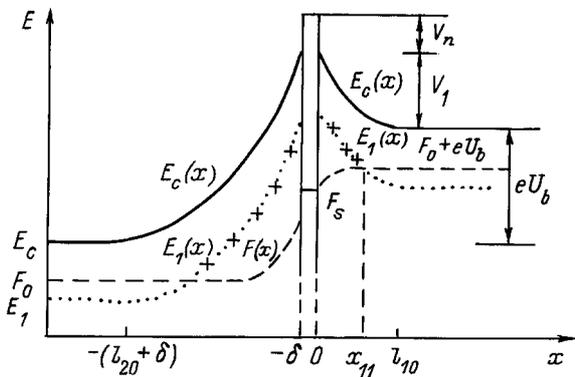


Рис. 1. Энергетическая диаграмма бикристалла. E_1 — глубокий уровень энергии донорного типа, V_n — высота рассеивающего барьера границы зерен [13], V_1 — высота межкристаллитного барьера при наложении на него постоянного смещения U_b .

Напряженность поля $\mathcal{E}(x, t)$ удовлетворяет следующим граничным условиям: $\mathcal{E}(x, t) = j(t)/(e\mu_n n_0)$ при $x \geq l_1(t)$, $x + \delta \leq -l_2(t)$,

$$\int_{-l_2(t)-\delta}^{l_1(t)} \mathcal{E}(x, t) dx = U_b(t), \quad (3)$$

$$\mathcal{E}(0, t) - \mathcal{E}(-\delta, t) = -\frac{en_s(t)}{\epsilon_0 \epsilon}, \quad (4)$$

где $j(t) = j_{dc} + \tilde{j} \exp(i\omega t)$ — переменная плотность тока (j_{dc} и \tilde{j} будут определены далее); $U_b(t) = U(t) - j(t)d/(e\mu_n n_0)$ — падение напряжения на межкристаллитном барьере; d — размер зерен, $d \gg l_1(t) + l_2(t)$; $n_s(t)$ — переменная плотность электронов, локализованных на границе зерен.

Функция распределения $f_\nu(x, t)$ и концентрация электронов проводимости $n(x, t)$ в слоях обеднения определяются из уравнений

$$\frac{\partial f_\nu(x, t)}{\partial t} = v_0 S_\nu \left\{ n(x, t) [1 - f_\nu(x, t)] - g_\nu N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_\nu}{kT}\right) f_\nu(x, t) \right\}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + \frac{e\mathcal{E}(x, t)}{kT} n(x, t) = \frac{j(t)}{\mu_n kT}, \quad (6)$$

где v_0 — средняя тепловая скорость электронов проводимости; S_ν — сечение захвата электрона на уровень E_ν ; g_ν — фактор вырождения уровня E_ν ; N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

Решения уравнений (1), (5), (6) ищутся в виде

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}(x) + \tilde{\mathcal{E}}(x) \exp(i\omega t),$$

$$f_\nu(x, t) = f_\nu(x) + \tilde{f}_\nu(x) \exp(i\omega t),$$

$$n(x, t) = n(x) + \tilde{n}(x) \exp(i\omega t).$$

Обозначим $n(0, t) + n(-\delta, t) = 2N_c [\Phi_0 + \tilde{\Phi} \exp(i\omega t)]$. Нестационарная функция распределения электронов на уровнях ПС определяется выражением [14]

$$f_s(E, t) = f(E - F_s) + \frac{\tilde{\Phi} f(E - F_s) [1 - f(E - F_s)] \exp(i\omega t)}{\Phi_0 [1 + i\omega \tau f(E - F_s)]},$$

где $f(E - F_s)$ — функция распределения Ферми–Дирака; $F_s = E_c(0) + kT \ln \Phi_0$ — положение квазиуровня Ферми на границе зерен; $\tau = [2v_0 S_n N_c \Phi_0]^{-1}$, S_n — сечение захвата электрона на уровни ПС. Для $n_s(t)$ имеем

$$n_s(t) = \int_{E_c(0)}^{E_c(0)} N(E) f_s(E, t) dE = n_s + \tilde{n}_s \exp(i\omega t), \quad (7)$$

где $N(E)$ — плотность ПС.

Приведенные выше соотношения позволяют рассчитать адмиттанс поликристалла. Однако сначала необходимо определить статические характеристики электропроводности.

2. Статическая электропроводность

При приложении к каждому зерну поликристалла постоянного напряжения U_0 величина изгиба зон вблизи границ зерен определяется выражением

$$V(x) = \begin{cases} e \int_{-l_{20}-\delta}^x \mathcal{E}(x') dx', & -l_{20} < x + \delta < 0, \\ -e \int_x^{l_{10}} \mathcal{E}(x') dx', & 0 < x < l_{10}, \end{cases}$$

где l_{10} — стационарная ширина слоя обеднения справа от границы, l_{20} — слева от границы. Из условия (3) следует, что $V_2 - V_1 = eU_b$, где $V_1 = V(0)$ — высота межкристаллитного барьера справа от границы, $V_2 = V(-\delta)$ — слева от границы; $U_b = U_0 - j_{dc}d/(e\mu_n n_0)$, j_{dc} — плотность стационарного тока.

При $\partial f_\nu(x, t)/\partial t = 0$ из уравнения (5) имеем

$$f_\nu(x) = \frac{n(x)}{n(x) + g_\nu N_c \exp[-(E_c - E_\nu)/kT]}. \quad (8)$$

Стационарная концентрация электронов $n(x)$ с достаточной точностью аппроксимируется выражением

$$\frac{n(x)}{n_0} = \begin{cases} (1 - b_2) \exp[-z(x)] + b_2, & -l_{20} < x + \delta < 0, \\ (1 + b_1) \exp[-z(x)] - b_1, & 0 < x < l_{10}, \end{cases} \quad (9)$$

где $b_{1,2} = j_{dc}/(ev_{d1,2}n_0)$; $v_{d1} = -\mu_n \mathcal{E}(0)$ — эффективная скорость диффузии носителей справа от границы зерен, $v_{d2} = \mu_n \mathcal{E}(-\delta)$ — слева от границы [13], $z(x) = V(x)/kT$.

С учетом (8), (9) решение уравнения (2) приводит к следующим выражениям:

$$\mathcal{E}(0) = \frac{j_{dc}}{e\mu_n n_0} - \frac{kT}{eL_D} [2z_1 + 2\Psi_1(z_1)]^{1/2}, \quad (10)$$

$$\mathcal{E}(-\delta) = \frac{j_{dc}}{e\mu_n n_0} + \frac{kT}{eL_D} [2z_2 + 2\Psi_2(z_2)]^{1/2}, \quad (11)$$

$$\Psi_{1,2}(z) = \sum_{\nu=1}^n \frac{a_\nu N_\nu}{(a_\nu \mp b_{1,2}) N_0} \times \ln \left[\frac{1 \pm b_{1,2} + (a_\nu \mp b_{1,2}) e^z}{1 + a_\nu} \right], \quad (12)$$

где $L_D = \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon kT / e^2 N_0}$ — дебаевская длина экранирования; $z_{1,2} = V_{1,2} / kT$, $a_\nu = g_\nu \exp(-\xi_\nu)$, $\xi_\nu = (F_0 - E_\nu) / kT$, $F_0 = E_c - kT \ln(N_c / n_0)$. Из граничного условия (4) следует соотношение

$$\sqrt{z_1 + \Psi_1(z_1)} + \sqrt{z_2 + \Psi_2(z_2)} = 2\sqrt{z_b}, \quad (13)$$

где $z_b = V_b / kT$, $V_b = e^2 n_s^2 / (8\varepsilon_0 \varepsilon N_0)$.

В частном случае, когда выполняются условия $b_1 \ll a_\nu \ll 1$, $a_\nu \exp(z_1) \gg 1$, из (13) находим

$$V_1 = \frac{V_b}{1 + p_0} \left[1 - (1 + p_0) \frac{eU_b}{4V_b} \right]^2 + \frac{pkT}{1 + p_0}, \quad (14)$$

$$p_0 = \sum_{\nu=1}^n \frac{N_\nu}{N_0}, \quad p = \sum_{\nu=1}^n \frac{N_\nu \xi_\nu}{N_0}.$$

Отметим, что выражение (14) в других обозначениях получено в [12] в результате довольно сложных расчетов и рассматривается в качестве основной формулы для высоты межкристаллитных барьеров.

Для плотности тока имеем [13]

$$j_{dc} = \frac{ev_0 n_0 \theta_0}{1 + \gamma} e^{-z_1} \left[1 - \exp\left(-\frac{eU_b}{kT}\right) \right], \quad (15)$$

где $\theta_0 = \bar{D}_n + S_n(N_s - n_s) / 2$, \bar{D}_n — интегральная прозрачность границы зерен для электронов; N_s — полная плотность ПС; $\gamma = v_0(1/v_{d1} + 1/v_{d2})\theta_0$.

Стационарная плотность электронов на уровнях ПС

$$n_s = \int_{E_c(0)}^{E_s(0)} N(E) f(E - F_s) dE. \quad (16)$$

Величина Φ_0 , входящая в выражение для квазиуровня F_s , определяется из соотношений (9), (15). Для нее имеем

$$\Phi_0 = \frac{j_{dc}(1 + \gamma)}{2ev_0 \theta_0 N_c} \left[\operatorname{cth}\left(\frac{eU_b}{2kT}\right) - \frac{\beta\gamma}{1 + \gamma} \right], \quad (17)$$

где $\beta = (v_{d2} - v_{d1}) / (v_{d2} + v_{d1})$.

Введем функцию

$$\mathcal{L}_m(z) = L_D \int_0^z [2z' + 2\Psi_m(z')]^{-1/2} dz', \quad (18)$$

где $m = 0, 1, 2$; функция $\Psi_1(z)$, $\Psi_2(z)$ определяются выражением (12),

$$\Psi_0(z) = \sum_{\nu=1}^n \frac{N_\nu}{N_0} \ln \left(\frac{1 + a_\nu e^z}{1 + a_\nu} \right).$$

Тогда $l_{m0} = \mathcal{L}_m(z_m)$, где $m = 0, 1, 2$; l_0 — ширина слоя обеднения при нулевом смещении; $z_0 = V_0 / kT$, V_0 — равновесная высота межкристаллитного барьера. Величины l_0, l_{10}, l_{20} будут необходимы далее при расчете адмиттанса поликристалла.

Выражения (13), (15), (16) образуют систему самосогласованных уравнений, из которой определяются n_s, V_1, j_{dc} как функции U_b . На рис. 2, 3 представлены результаты численного расчета этих величин в поликристаллическом кремнии с примесью кислорода, образующей в запрещенной зоне два глубоких уровня: $E_c - E_1 = 0.31$ эВ (донор) и $E_c - E_2 = 0.38$ эВ (акцептор) [15]. Предполагалось гауссово распределение плотности ПС:

$$N(E) = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\Delta E} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E - F_s}{\Delta E} \right)^2 \right].$$

Использовались следующие значения параметров: $\varepsilon = 11.8$, $E_g = 1.12$ эВ, $v_0 = 10^7$ см/с, $\mu_n = 521$ см²/(В·с), $N_d = 6 \cdot 10^{15}$ см⁻², $N_s = 10^{12}$ см⁻², $\Delta E = 0.15$ эВ, $F_s - E_v = 0.66$ эВ, $S_n = 10^{-15}$ см², $N_1 = N_2 = 10^{15}$ см⁻³, $\bar{D}_n = 0.1$, $T = 300$ К, $N_c = 2.8 \cdot 10^{19}$ см⁻³. Концентрация электронов в квазинейтральных областях $n_0 \approx N_0 = N_d - N_2$.

Из рис. 2 видно, что с увеличением падения напряжения на межкристаллитном барьере растет плотность электронов на границе зерен. Этот дополнительный захват электронов на уровни ПС ослабляет зависимость

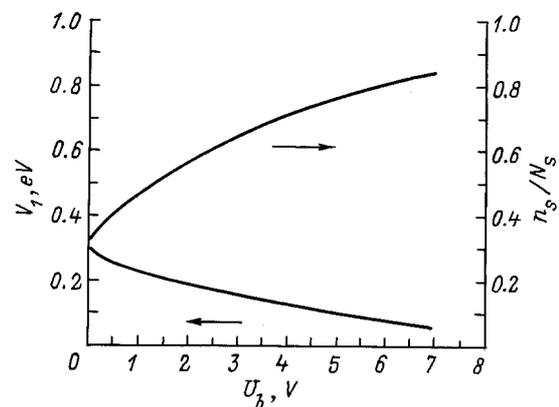


Рис. 2. Зависимость высоты межкристаллитного барьера и отношения n_s/N_s от U_b . n_s — плотность электронов на границе зерен, N_s — полная плотность ПС.

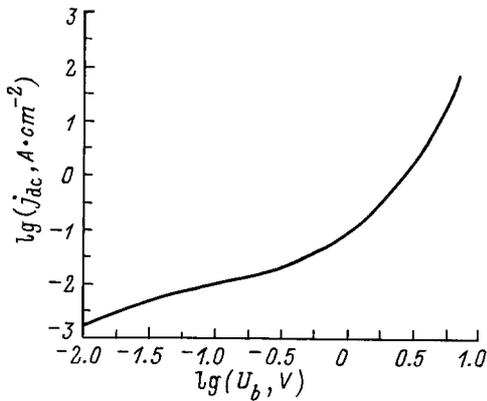


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика границы зерен.

высоты барьера V_1 от U_b . Для полного снятия межкристаллитного барьера к нему необходимо приложить довольно значительное напряжение.

Вольт-амперная характеристика (рис. 3) имеет три участка: линейный, сублинейный и суперлинейный. Сублинейному участку соответствует режим компенсации [5,13], при котором понижение межкристаллитного барьера продольным электрическим полем частично компенсируется дополнительным захватом электронов на уровне ПС. По мере заполнения ПС рост плотности электронов на границе зерен замедляется, при этом сублинейная зависимость переходит в суперлинейную.

3. Адмиттанс поликристалла

Рассмотрим теперь решение системы уравнений (2), (5), (6) при переменном напряжении (1). Чтобы избежать слишком громоздких выражений, ограничимся случаем $\gamma \ll 1$. Тогда можно считать, что квазиуровень Ферми $F(x)$ постоянный при $z(x) < z_1$, а при $z_1 < z(x) < z_2$ он отслеживает дно зоны проводимости (см. рис. 1). В этом приближении из уравнений (6) имеем

$$\tilde{n}(x) = -\frac{\tilde{V}(x)}{kT} n_0 \exp[-z(x)], \quad (20)$$

где $\tilde{V}(x)$ определяется выражением

$$\tilde{V}(x) = \begin{cases} e \int_{-l_{20}-\delta}^x \tilde{\mathcal{E}}(x') dx', & -l_{20} < x + \delta < 0, \\ -e \int_x^{l_{10}} \tilde{\mathcal{E}}(x') dx', & 0 < x < l_{10}. \end{cases}$$

С учетом (20) из уравнений (2), (5) находим

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}(x)}{dx} = \begin{cases} \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon} \sum_{\nu=1}^n \frac{N_\nu \delta[z(x) - \xi_\nu]}{1 + i\omega\tau_\nu} \frac{\tilde{V}(x_\nu)}{kT}, & z(x) < z_1, \\ 0, & z_1 < z(x) < z_2, \end{cases} \quad (21)$$

где $\tau_\nu = \exp(\xi_\nu)/[(1 + g_\nu)v_0 n_0 S_\nu]$ — время релаксации части объемного заряда, связанной с электронами на

уровне E_ν ; x_ν удовлетворяет уравнению $z(x_\nu) = \xi_\nu$. Заметим, что τ_ν не зависит от постоянного смещения U_b . При выводе уравнения (21) использована аппроксимация $f_\nu(x)[1 - f_\nu(x)] = \delta[z(x) - \xi_\nu]$. Из граничных условий (3), (4) имеем

$$\tilde{U}_2 - \tilde{U}_1 = e\tilde{U}_b, \quad \tilde{\mathcal{E}}_1 - \tilde{\mathcal{E}}_1 - \tilde{\mathcal{E}}_2 = -\frac{e\tilde{n}_s}{\varepsilon_0 \varepsilon}, \quad (22)$$

где $\tilde{U}_1 = \tilde{U}(0)$, $\tilde{U}_2 = \tilde{U}(-\delta)$, $\tilde{U}_b = \tilde{U} - \tilde{j}d/(e\mu_n n_0)$, $\tilde{\mathcal{E}}_1 = \tilde{\mathcal{E}}(0)$, $\tilde{\mathcal{E}}_2 = \tilde{\mathcal{E}}(-\delta)$; \tilde{n}_s — комплексная амплитуда колебаний плотности электронов на уровнях ПС (см. соотношение (7)).

Решая уравнение (21) с граничными условиями (22), находим

$$\tilde{\mathcal{E}}_m = \frac{\tilde{U}_b}{L} + (-1)^m \frac{e\tilde{n}_s L_m}{\varepsilon_0 \varepsilon L}, \quad (23)$$

$$\tilde{V}_m = (-1)^m \frac{e\tilde{U}_b L_m}{L} + kTA \frac{\tilde{n}_s}{n_s}. \quad (24)$$

Здесь $m = 1, 2$; $L = L_1 + L_2$; $A = e^2 n_s L_1 L_2 / (\varepsilon_0 \varepsilon k T L)$. Для комплексных величин L_1, L_2 с размерностью длины имеем

$$L_m = l_{m0} - \frac{1}{1 + \varkappa} \sum_{\nu=1}^n \frac{r_\nu l_\nu \theta(z_1 - \xi_\nu)}{R_\nu (1 + i\omega\tau_\nu)}, \quad (25)$$

$$\varkappa = \sum_{\nu=1}^n \frac{r_\nu \theta(z_1 - \xi_\nu)}{R_\nu (1 + i\omega\tau_\nu)}, \quad (26)$$

где $l_\nu = \mathcal{L}_0(\xi_\nu)$; $R_\nu = L_D \sqrt{2\xi_\nu + 2\Psi_0(\xi_\nu)} N_0 / N_\nu$; $\theta(\xi)$ — ступенчатая функция; величины r_ν удовлетворяют рекуррентной формуле

$$r_\nu = l_\nu + \sum_{\mu=1}^{\nu-1} \frac{r_\mu (l_\nu - l_\mu)}{R_\mu (1 + i\omega\tau_\mu)}.$$

Используя (20) и (24) легко рассчитать $\tilde{\Phi} = [\tilde{n}(0) + \tilde{n}(-\delta)]/2N_c$, а затем из соотношения (7) определить \tilde{n}_s . В результате имеем

$$\frac{\tilde{n}_s}{n_s} = \frac{\alpha L_1}{(1 + \alpha A)L} \frac{e\tilde{U}_b}{kT} \text{th} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right), \quad (27)$$

$$\alpha = \frac{1}{n_s} \int_{E_i(0)}^{E_c(0)} \frac{N(E) f(E - F_s) [1 - f(E - F_s)] dE}{1 + i\omega\tau f(E - F_s)}. \quad (28)$$

Комплексная амплитуда колебаний плотности тока определяется выражением [14]

$$\tilde{j} = ev_0 \theta_0 [\tilde{n}(0) - \tilde{n}(-\delta)] + \frac{i\omega\varepsilon_0 \varepsilon}{2} (\tilde{\mathcal{E}}_1 + \tilde{\mathcal{E}}_2). \quad (29)$$

Видно, что полученные соотношения позволяют определить адмиттанс границы зерен $Y_b = \tilde{j}/\tilde{U}_b$. Расчеты приводят к следующим выражениям:

$$Y_b = G_1 + \frac{i\omega\varepsilon_0 \varepsilon}{L} - \frac{ej_{dc}}{kT} \frac{\alpha AL_1}{(1 + \alpha A)L} \text{th} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right), \quad (30)$$

$$G_1 = \frac{ej_{dc}}{kT} \frac{L_1}{L} \text{cth} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right). \quad (31)$$

Адмиттанс поликристалла, рассчитанный на единицу площади поперечного сечения, определяется выражением

$$Y = \frac{Y_b d}{(1 + Y_b d / e \mu_n n_0) D}, \quad (32)$$

где D — длина поликристалла.

В качестве иллюстраций к полученным соотношениям на рис. 4–6 представлены результаты численного расчета проводимости $G(\omega, U_b) = \text{Re } Y_b$ и емкости $C(\omega, U_b) = \text{Im } Y_b / \omega$ границы зерен в поликристаллическом кремнии с двумя глубокими уровнями в объеме зерен. Использовались следующие значения для сечений захвата электрона на глубокие уровни: $S_1 = 10^{-14} \text{ см}^2$, $S_2 = 10^{-15} \text{ см}^2$. Значения остальных параметров приведены выше.

На рис. 4, 5 представлены зависимости проводимости и емкости от частоты при различных значениях U_b . Видно, что при $U_b \neq 0$ преобладает дисперсия, обусловленная релаксацией плотности заряда на границе зерен. На ее фоне дисперсия, связанная с перезарядкой глубоких примесных центров, практически не заметна.

На рис. 6 показаны зависимости $G(\omega, 0)$ и $C(\omega, 0)$ в увеличенном масштабе. На кривой зависимости

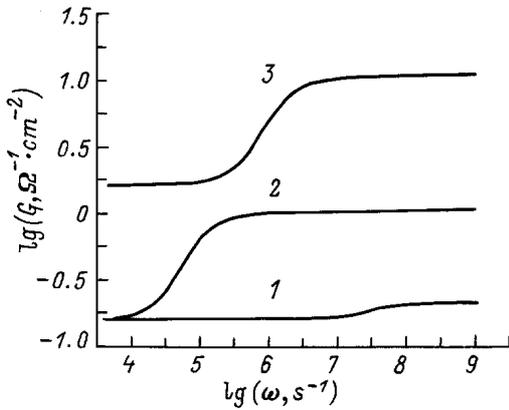


Рис. 4. Зависимость проводимости границы зерен G от частоты ω при различных U_b , В: 1 — 0, 2 — 1, 3 — 3.

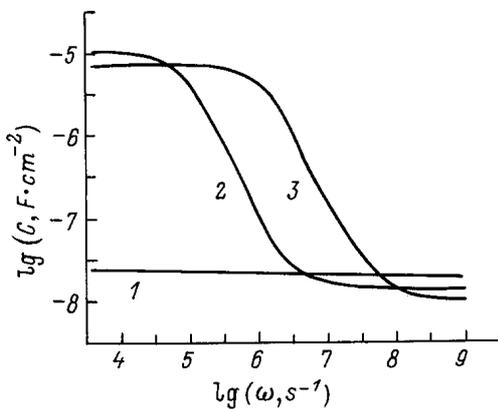


Рис. 5. Зависимость емкости границы зерен C от частоты ω при различных U_b , В: 1 — 0, 2 — 1, 3 — 3.

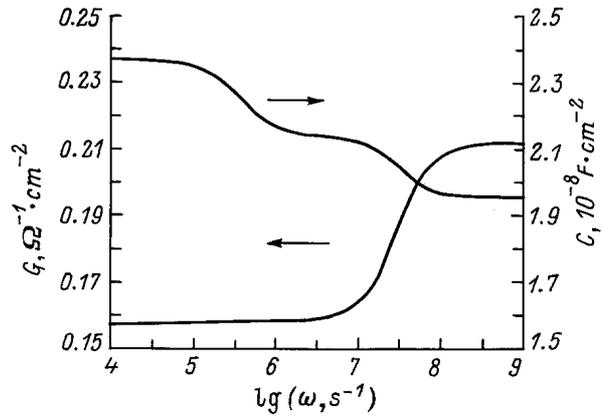


Рис. 6. Зависимость проводимости G и емкости C границы зерен от частоты ω при $U_b = 0$ (в увеличенном масштабе).

$C(\omega, 0)$ ясно различимы две резонансные частоты: $\omega_1 = \tau_1^{-1} \simeq 3 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$, $\omega_2 = \tau_2^{-1} \simeq 3 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$. Однако на кривой зависимости $G(\omega, 0)$ различима только одна резонансная частота ω_1 . Это связано с тем, что при $\omega < 10^7 \text{ с}^{-1}$ статическая проводимость $G_1(U_b = 0) \gg \omega \text{ Im}(\epsilon_0 \epsilon / L)$.

Таким образом, из полученных результатов следует, что при $U_b \neq 0$ адмиттанс границы зерен контролируется главным образом процессами перезарядки ПС. Эффекты, связанные с перезарядкой глубоких уровней в объеме зерен, относительно малы и становятся заметными лишь при $U_b = 0$, когда перезарядка ПС отсутствует. Однако следует указать на одно важное обстоятельство. Последний член в (30), определяющий влияние перезарядки ПС на адмиттанс границы зерен, сам зависит (через величину A) от перезарядки глубоких ловушек в объеме зерен, т.е. происходит "перемешивание" этих процессов [12]. Поэтому при определении спектра ПС из измерений адмиттанса необходимо учитывать как перезарядку ПС, так и перезарядку глубоких ловушек в объеме зерен.

4. Спектроскопия пограничных состояний

Найдем соотношения, позволяющие определить плотность ПС по измеренным статическим и динамическим характеристикам электропроводности поликристаллического полупроводника с глубокими примесными центрами в объеме зерен. При этом мы будем полагать, что известны значения параметров d , n_0 , μ_n . Тогда с помощью выражения (32) легко рассчитать проводимость и емкость границы зерен по измеренным значениям $\text{Re } Y$, $\text{Im } Y$. Поэтому достаточно найти соотношения, которые определяют явную зависимость $N(E)$ от $G(\omega, U_b)$, $C(\omega, U_b)$, j_{ac} и $U_b = U_0 - j_{ac} d / (e \mu_n n_0)$.

Как и в [14], для вычисления интеграла в (28) воспользуемся приближением $f(E - F_s)[1 - f(E - F_s)] = kT\delta(E - F_s)$. Тогда

$$\alpha = \frac{N(F_s)kT}{n_s} \frac{2}{2 + i\omega\tau},$$

где $N(F_s)$ — плотность ПС на квазиуровне Ферми.

Из (25), (26) следует, что при $\omega\tau_\nu \ll 1$ можно положить $L_1 = l_{10} - \Delta l$, $L_2 = l_{20} - \Delta l$, где Δl — действительная величина. Если при изменении U_b сохраняется число глубоких уровней, пересекающих квазиуровень Ферми $F(x)$, то Δl не зависит от постоянного смещения. При $U_b = 0$ низкочастотная емкость границы зерен есть $C_0 = \varepsilon_0\varepsilon/2(l_0 - \Delta l)$. Отсюда имеем

$$\Delta l = \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{2} \left[\frac{1}{C_{HF}(0)} - \frac{1}{C_0} \right], \quad (33)$$

где $C_{HF}(0) = \varepsilon_0\varepsilon/2l_0$ — высокочастотная емкость границы зерен при $U_b = 0$.

Полагая в (30) $\omega = 0$, находим

$$P_{dc} = \frac{l_{10} - \Delta l}{l_{10} + l_{20} - 2\Delta l} \times \left[\text{cth} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right) - \frac{A_1}{1 + A_1} \text{th} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right) \right], \quad (34)$$

$$A_1 = \frac{e^2 N(F_s)}{\varepsilon_0\varepsilon} \frac{(l_{10} - \Delta l)(l_{20} - \Delta l)}{l_{10} + l_{20} - 2\Delta l}, \quad (35)$$

где $P_{dc} = kTG_{dc}(U_b)/ej_{dc}$; $G_{dc}(U_b)$ — низкочастотная ($\omega\tau_\nu \ll 1$, $\omega\tau \ll 1$) проводимость границы зерен.

Обозначим

$$P_{HF} = \frac{kT}{ej_{dc}} \left\{ G_{HF}(U_b) - \frac{C_{HF}^2(U_b)}{C_{HF}^2(0)} [G_{HF}(0) - G_{dc}(0)] \right\},$$

где $G_{HF}(U_b)$ — высокочастотная проводимость границы зерен, $C_{HF}(U_b) = \varepsilon_0\varepsilon/(l_{10} + l_{20})$ — высокочастотная емкость границы зерен. При $\omega\tau_\nu \gg 1$, $\omega\tau \gg 1$ из (30) находим

$$P_{HF} = \frac{l_{10}}{l_{10} + l_{20}} \text{cth} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right).$$

Последнее соотношение позволяет выразить l_{10} и l_{20} через экспериментально определяемые величины:

$$l_{10} = \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{C_{HF}(U_b)} P_{HF} \text{th} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right), \quad (36)$$

$$l_{20} = \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{C_{HF}(U_b)} \left[1 - P_{HF} \text{th} \left(\frac{eU_b}{2kT} \right) \right]. \quad (37)$$

Видно, что соотношения (34), (35) связывают плотность ПС на квазиуровне Ферми с экспериментально определяемыми величинами, т.е. являются искомыми соотношениями. При $eU_b \gg kT$ из (33)–(37) находим

$$N(F_s) = \frac{C_{HF}(U_b)}{e^2} \frac{P_{HF} - \varphi - (1 - 2\varphi)P_{dc}}{P_{dc}(P_{HF} - \varphi)(1 - \varphi - P_{HF})}, \quad (38)$$

где $\varphi = C_{HF}(U_b)[C_{HF}^{-1}(0) - C_0^{-1}]/2$. Положение квазиуровня Ферми на границе зерен можно выразить через плотность стационарного тока:

$F_s = E_c(0) - kT \ln(2ev_0N_c\theta_0/j_{dc})$ при $eU_b \gg kT$ (см. соотношение (17) при $\gamma \ll 1$). Численное значение параметра θ_0 можно определить, исследуя статическую электропроводность.

Из (30) можно также получить следующее соотношение для сечения захвата электрона на уровни ПС:

$$S_n = \frac{e^2\theta_0(1 - 2\varphi)P_{dc} [P_{HF} - \varphi - (1 - 2\varphi)P_{dc}]}{2kT [(1 - 2\varphi)C(0, U_b) - C_{HF}(U_b)] (P_{HF} - \varphi)}, \quad (39)$$

где $C(0, U_b)$ — емкость границы зерен при $\omega\tau \ll 1$, $\omega\tau_\nu \ll 1$.

Точность соотношений (38), (39) можно оценить, используя приведенные выше результаты численного расчета j_{dc} , $G(\omega, U_b)$ и $C(\omega, U_b)$. Такая оценка показывает, что при $U_b < 3$ В пренебрежение перезарядкой глубоких ловушек в объеме зерен приводит к заметной ошибке в определении $N(F_s)$ и S_n . При $U_b > 3$ В эта ошибка незначительна, т.е. в (38), (39) можно положить $P_{HF} = kTG_{HF}(U_b)/(ej_{dc})$, $\varphi = 0$.

Заключение

В данной работе развита наиболее полная теория статической и динамической электропроводности поликристаллических полупроводников, которая учитывает не только особенности переноса заряда через границы зерен, но и влияние на этот процесс глубоких ловушек в объеме зерен. Приложение этой теории к спектроскопии межзеренных пограничных состояний дает весьма простые соотношения, связывающие плотность ПС на квазиуровне Ферми и сечение захвата основных носителей на уровни ПС с измеряемыми статическими и динамическими характеристиками электропроводности.

Список литературы

- [1] J.Y.W. Seto. J. Appl. Phys., **46**, 5247 (1975).
- [2] C.H. Seager, T.G. Castner. J. Appl. Phys., **49**, 3879 (1978).
- [3] G.E. Pike, C.H. Seager. J. Appl. Phys., **50**, 3414 (1979).
- [4] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан. ФТП, **10**, 1839 (1976).
- [5] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, В.Н. Неменуший. ФТП, **12**, 833 (1978).
- [6] N.C.C. Lu, L. Gergberg, C.Y. Lu, J.D. Meindl. IEEE Trans. Electron. Dev., **ED-30**, 137 (1983).
- [7] G.C. McGonigal, D.J.S. Thomson, J.G. Shaw, H.C. Gard. Phys. Rev. B, **28**, 5908 (1983).
- [8] S.N. Singh, R. Kishore, P.K. Singh. J. Appl. Phys., **57**, 2793 (1985).
- [9] C.H. Seager, G.E. Pike. Appl. Phys. Lett., **37**, 747 (1980).
- [10] G.E. Pike. Phys. Rev. B, **30**, 795 (1984).
- [11] J. Werner, H. Strunk. J. Phys. C, **1**, 89 (1982).
- [12] G. Blatter, F. Greuter. Phys. Rev. B, **33**, 3952 (1987).
- [13] К.М. Дошанов. ФТП, **28**, 692 (1994).
- [14] К.М. Дошанов. ФТП, **28**, 1645 (1994).
- [15] А. Милнс. *Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках* (М., Мир. 1977) с. 44.

Редактор Л.В. Шаронова

Theory of charge transport in polycrystalline semiconductors with deep impurities

K.M. Doshchanov

Physicotechnical Institute,
Scientific-Production Union "Physics–Sun",
Academy of Sciences of Uzbekistan,
700084 Tashkent, Uzbekistan

Abstract Static and dynamic properties of the charge transport through electrically active grain boundaries in polycrystalline semiconductors with deep bulk impurities have been investigated. The admittance of a grain boundary is calculated as a function of frequency and applied *dc* voltage U_b . At $U_b \neq 0$ the admittance is controlled mainly by charge trapping at the grain boundary and in part by charge trapping at the deep bulk traps. The application of this theory to the spectroscopy of grain boundary interface states is considered.