

06

Неравновесные фазовые переходы и S-образные вольт-амперные характеристики в системе полупроводник–металл

© А.В. Мелких, А.А. Повзнер, А.Г. Андреева, И.Н. Сачков

Уральский государственный технический университет, Екатеринбург

Поступило в Редакцию 31 мая 2000 г.

В окончательной редакции 3 ноября 2000 г.

Рассмотрена модель неравновесного фазового перехода в системе полупроводник–металл с использованием метода конечных элементов. Показано, что в гетерофазной системе начиная с определенной доли металлической фазы меняется поведение S-образных вольт-амперных характеристик: при наличии гистерезиса в системе отсутствуют особые точки.

1. Известно, что в достаточно сильных электрических полях наблюдаются N- и S-образные нелинейности вольт-амперных характеристик (ВАХ) в полупроводниках и резистивных пленках на их основе [1–3]. В настоящее время достаточно хорошо установлено, что данные особенности сопровождаются возникновением нелокальностей в распределении электрических токов. Однако причины возникновения этих нелокальностей полностью не изучены. В частности, до сих пор не рассматривались нелокальности в распределении электрических токов в гетерофазных системах с полупроводниковой матрицей и металлическими включениями.

Кроме того, S-образность ВАХ должна привести к неустойчивости в системе, которую можно представить как неравновесный фазовый переход. Причиной неустойчивости в данном случае может стать существование положительной обратной связи между температурой образца и плотностью тока в нем: увеличение тока приводит к нагреву образца, что в свою очередь приводит к увеличению плотности тока (поскольку проводимость полупроводника сильно возрастает при росте температуры).

2. Рассмотрим сначала особенности ВАХ однофазной полупроводниковой пленки. Проводимость полупроводникового образца считаем

зависящей от температуры так, что ВАХ чистого полупроводника определяется следующей формулой:

$$j = \sigma_0 \frac{1}{L} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \Delta\varphi, \quad (1)$$

где j — плотность тока; σ_0 — константа, в первом приближении не зависящая от температуры; L — длина образца; E_g — ширина запрещенной зоны.

Учтем, что выделяемое тепло может приводить к увеличению температуры образца. Такое увеличение температуры будет сопровождаться ростом проводимости, поскольку концентрация свободных электронов в полупроводнике экспоненциально зависит от температуры. При этом и организуется обратная связь, которая приводит к возможности гистерезиса в системе.

Плотность мощности, выделяемая в образце, может быть записана в виде

$$j\Delta\varphi. \quad (2)$$

Плотность потока тепла от образца к подложке можно приближенно записать в виде

$$-2\lambda \frac{T_0 - T}{h}, \quad (3)$$

где λ — коэффициент теплопроводности материала; T — температура образца, установившаяся в результате выделения в нем тепла; T_0 — температура подложки; h — толщина образца.

В стационарном состоянии выражения (2) и (3) должны быть равны. Из этого равенства можно найти температуру образца:

$$T = T_0 + j\Delta\varphi \frac{h}{2\lambda}. \quad (4)$$

Тогда плотность тока нелинейно зависит от $\Delta\varphi$:

$$j = \sigma_0 \frac{1}{L} \exp\left(-\frac{E_g}{k(T_0 + j\Delta\varphi h/2\lambda)}\right) \Delta\varphi. \quad (5)$$

Исследуем полученную зависимость на наличие экстремумов. Приравняв нулю производную

$$\frac{\partial \Delta\varphi}{\partial j} = \frac{L}{\sigma_0} \exp\left(\frac{E_g}{kT}\right) \left[1 - \frac{E_g(j\Delta\varphi + j^2 \frac{\partial \Delta\varphi}{\partial j}) \frac{kh}{2\lambda}}{(kT_0 + \frac{kh}{2\lambda} j\Delta\varphi)^2}\right] = 0, \quad (6)$$

получим уравнение для особых точек системы:

$$\left(kT_0 + \frac{kh}{2\lambda}X\right)^2 = \frac{E_g kh}{2\lambda}X, \quad (7)$$

где $X = (j\Delta\varphi)_s$ (индекс s соответствует особым точкам). Решая это уравнение, находим, что

$$X_{1,2} = \frac{2\lambda}{kh} \frac{E_g - 2kT_0 \pm \sqrt{E_g(E_g - 4kT_0)}}{2}. \quad (8)$$

Тогда критическая точка рассматриваемой системы будет определяться равенством нулю выражения под корнем либо второй производной:

$$\frac{\partial^2 \Delta\varphi}{\partial j^2} = 0. \quad (9)$$

Отсюда находим критические для формирования метастабильных состояний параметры:

$$(E_g)_c = 4kT_0, \quad X_c = \frac{2\lambda T_0}{h}. \quad (10)$$

При значениях $E_g > (E_g)_c$ кривая имеет S-образный вид. В этой области каждому значению разности потенциалов соответствуют три значения плотности тока.

Рассмотрим поведение системы при $E_g > (E_g)_c$ в интервале $\Delta\varphi_{S1} < \Delta\varphi < \Delta\varphi_{S2}$.

В этом интервале одна из ветвей S-образной кривой является метастабильной. Среднее значение j очевидно соответствует абсолютно неустойчивому состоянию системы и на практике не реализуется.

Вблизи значения $\Delta\varphi_{S2}$ неустойчивым становится "холодный" ток и система скачком переходит на верхнюю кривую ("тепловой пробой"). Вблизи $\Delta\varphi_{S1}$ неустойчив "горячий" ток и система попадает на нижнюю кривую.

3. Проанализируем теперь ВАХ для двумерной полупроводниковой матрицы с квадратными металлическими включениями (рис. 1) при разных долях металла.

При расчете ВАХ рассматриваемой системы полупроводник-металл используем подход, основанный на использовании вариационной формулировки уравнений переноса и метода конечных элементов. Для его реализации выделим в рассматриваемой гетерогенной системе квадратную

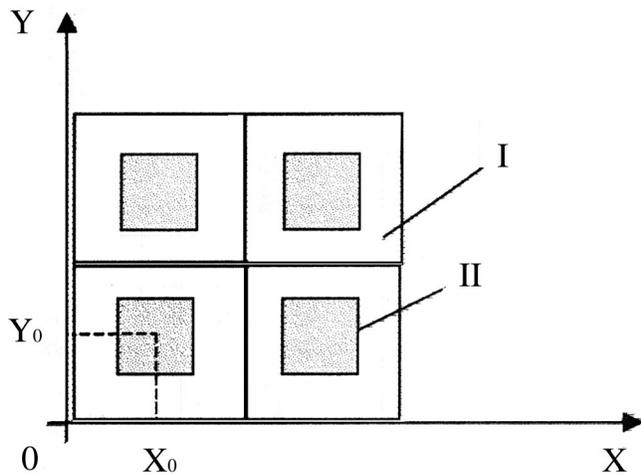


Рис. 1. Схема полупроводниковой матрицы с квадратными металлическими включениями: I — полупроводник, II — металл.

элементарную ячейку, границы которой проходят по линиям зеркальной симметрии обсуждаемой регулярной структуры (штриховая линия на рис. 1). Используем ячейки минимального размера, содержащие одну четверть металлического включения. Выберем в качестве начала отсчета декартовой системы координат (X, Y) одну из вершин ячейки, направив оси вдоль ее сторон. Направим электрическое поле вдоль оси Y . При этом линии $Y = Y_0$, $Y = 0$ являются изопотенциальными, а $X = 0$ и $X = X_0$ непроницаемыми для потока. Распределение электрического потенциала $\varphi(X, Y)$ установим с помощью вариационного подхода, согласно которому в процессах переноса экстремален функционал

$$\chi = \int_{S_c} \sigma (\text{grad} \varphi)^2 dS, \quad (11)$$

где σ — локальная проводимость, S_c — площадь элементарной ячейки.

Нахождение функции φ , минимизирующей величину χ , осуществим методом конечных элементов [4] с дискретизацией двумерного пространства S_c треугольными симплекс-элементами. При этом $\varphi(X, Y)$ аппроксимируется в пределах области S_c непрерывной кусочно-линейной

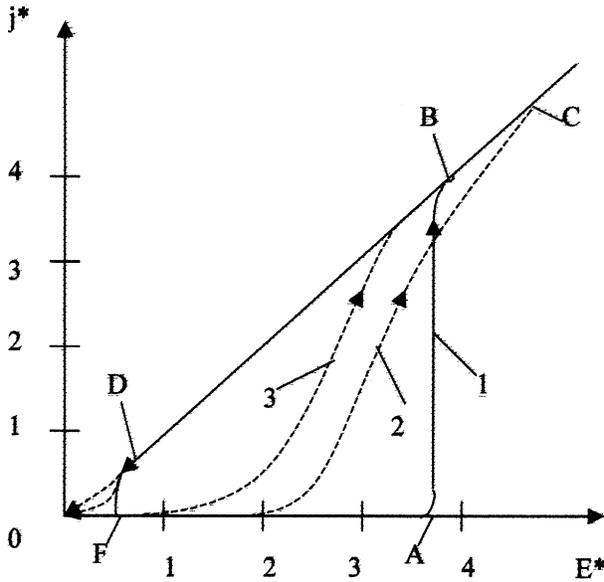


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики системы полупроводник–металл: 1 — $C = 0$; 2 — $C = 0.8$; 3 — $C = 0.6$.

функцией, параметры которой однозначно заданы совокупностью узловых значений $\{\varphi_j\}$. Алгоритм отыскания $\varphi(X, Y)$ подробно описан в [5]. Далее, используя аппроксимированные значения потенциала, нетрудно было рассчитать поля значений градиента потенциала, плотности тока и плотности тепловыделений.

Компьютерный эксперимент по определению зависимостей ВАХ от концентрации включений осуществлялся в настоящей работе с помощью ЭВМ серии IBM PC. При этом использовались сетки, характеризуемые плотностью разбиений 50×100 , адаптированные к форме включений. Типичные ВАХ, установленные с помощью метода конечных элементов, изображены на рис. 2. На нем $j^* = \langle j \rangle / \langle j \rangle_0$ и $E^* = \langle E \rangle / \langle E \rangle_0$ — усредненные по площади элементарной ячейки S_c значения относительных значений плотности тока j и модуля напряженности поля $E = \text{grad}\varphi$ соответственно. Значения $\langle j \rangle_0$ и $\langle E \rangle_0$ — средние величины

j и E , реализующиеся в гомогенном металлическом проводнике при температуре, равной температуре подложки T_0 . Сплошная линия соответствует однофазной полупроводниковой пленке, пунктирные — гетерофазным структурам с различной концентрацией C металлической фазы. При расчете представленных зависимостей было принято $E_g = 10kT_0$. Проводимость металлической фазы считается не зависящей от температуры и равной проводимости полупроводника, рассчитанной при температуре T_0 .

Систематизация результатов численного эксперимента позволяет прийти к следующим выводам. В однофазной системе, то есть при $C = 0$, наблюдаются гистерезисные явления, аналогичные обсуждавшимся выше. Холодная ветвь ВАХ соответствует очень малой проводимости, так что ход этой ветви на рис. 2 от точки 0 до точки А сливается с осью абсцисс. Переход от холодной к горячей ветви ВАХ (изображаемый кривой А–В) происходит очень резко. При дальнейшем повышении напряжения вдоль ВС имеет место линейная металлическая зависимость $j^*(E^*)$. При снижении напряжения наблюдается значительный гистерезис, обратный переход к холодной ветви также осуществляется практически скачкообразно от точки D к F.

При введении металлических включений переход между ветвями ВАХ происходит затянuto. При этом чем выше содержание металла, тем меньше разница значений тока холодной и горячей ветвей и тем уже петля гистерезиса. Анализ топограмм пространственного распределения температур в пределах элементарной ячейки обсуждаемой гетерогенной системы показывает, что характер неравновесного перехода в однофазной и гетерофазной системах различается. При этом в чистой полупроводниковой пленке переход от холодного состояния к разогретому происходит практически одновременно по всему пространству. В случае же матричной системы полупроводник–металл разогретые области возникают в полупроводнике сначала в областях наибольшей концентрации токовых линий и постепенно расширяются по мере увеличения напряжения. Подобная же закономерность имеет место при обратном переходе. Такая пространственная неоднородность приводит к исчезновению точек потери устойчивости, определенных в виде (6).

Таким образом, получено, что в системе полупроводник–металл при определенных значениях разности потенциалов должно наблюдаться резкое изменение тока, которое можно трактовать как неравновесный

фазовый переход. Обращает внимание, что в гетерогенной системе переход: холодное состояние — разогретое осуществляется при значительно меньших значениях напряжения, чем в однофазной. Подобное снижение порога перехода объясняется неравномерностью распределения тока, имеющей место в неоднородной системе. Рассматриваемое явление во многом аналогично, например, явлениям воспламенения и потухания [6].

В настоящей работе рассматривалась упрощенная, но достаточно характерная ситуация. В дальнейших публикациях предполагается обсудить трансформации ВАХ подобных гетерофазных систем в зависимости от формы включений, соотношений величин E_g , λ и L , а также параметров, описывающих теплообмен в системе. Можно ожидать, что существуют такие структуры, в которых распределение плотности тока еще более неравномерно. Поэтому в дальнейшем представило бы интерес изучить особенности перехода, связанные также и с геометрией гетерофазной системы и закономерностями процессов распада метастабильных проводящих состояний. Последнее представляется весьма важным и с точки зрения поиска новых путей повышения стабильности работы резисторов на основе композиционных систем, содержащих смеси полупроводниковых и металлических фаз.

Список литературы

- [1] Кроткус А., Добровольский З. Электропроводность узкощелевых полупроводников, Вильнюс: Мокслас, 1988. 172 с.
- [2] Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 416 с.
- [3] Левинштейн М.Е., Пожела К.Ю., Шур М.С. Эффект Ганна. М.: Сов. радио, 1975. 288 с.
- [4] Сегерлинд Л.Дж. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 392 с.
- [5] Сачков И.Н. // ЖТФ. 1996. Т. 66. В. 12. С. 48–58.
- [6] Мержанов А.Г., Столин А.М. // ПМТФ. 1974. № 1. С. 65–74.