

©1994 г.

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

К.М. Дощанов

Физико-технический институт им. С.В. Стародубцева, Академии наук
Узбекистана, 700084, Ташкент, Узбекистан
(Получена 30 сентября 1993 г. Принята к печати 18 ноября 1993 г.)

При последовательном учете влияния границ зерен на перенос заряда получено обобщенное выражение для статической вольт-амперной характеристики цепочки одинаковых бикристаллов, рассматриваемой в качестве одномерной модели поликристаллического полупроводника. В предельных случаях обобщенное выражение переходит в известные формулы для вольт-амперной характеристики в диффузионной модели и модели термоэлектронной эмиссии. Существенно новым в предлагаемой обобщенной модели является учет зависимости концентрации носителей в объеме зерен от приложенного напряжения U , что приводит к некоторым новым выводам относительно электропроводности поликристаллов.

Представлены результаты численных расчетов, иллюстрирующие зависимость вольт-амперной характеристики поликристалла n -типа проводимости от внутренних свойств (размер зерен, параметры пограничных состояний).

Для количественного описания барьерного механизма электропроводности поликристаллических полупроводников обычно используют или диффузионную модель [1-4], или модель термоэлектронной эмиссии [5-8]. В [9,10] предпринята попытка объединения этих моделей на основе термоэмиссионно-диффузионной теории, разработанной Кроуэллом и Зи для описания переноса заряда через контакт металл-полупроводник [11]. На наш взгляд, непосредственное применение теории [11] для описания переноса заряда через границу зерен (ГЗ) в поликристаллическом полупроводнике требует более строгого обоснования, чем это сделано в [9,10].

Как известно, ГЗ представляет собой переходный слой толщиной в несколько десятков \AA , в котором происходит сопряжение двух разориентированных монокристаллических зерен, т.е. ГЗ имеет, по видимому, разупорядоченную атомную структуру [10,12]. Это обуславливает двоякую роль ГЗ в процессе электропереноса. Во-первых, ненасыщенные связи ГЗ создают уровни энергии в запрещенной зоне, так называемые пограничные состояния (ПС). Захват на ПС носителей заряда приводит к изгибу зон в зернах (к образованию межкри-

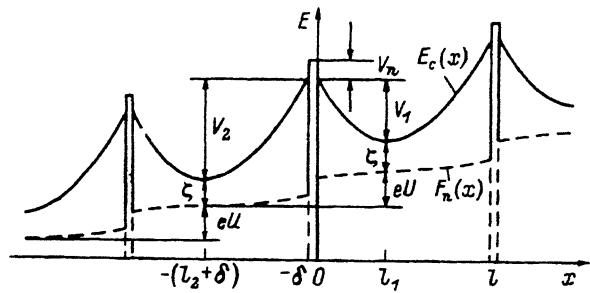


Рис. 1. Зонная диаграмма цепочки одинаковых бикристаллов.

сталлитного барьера), что ограничивает перенос заряда между зернами. Во-вторых, существенное влияние на электроперенос оказывает рассеяние носителей заряда непосредственно на самой ГЗ. Согласно работам [12,13], эффект рассеяния на ГЗ можно смоделировать, связав с ней прямоугольный потенциальный барьер (рассеивающий барьер ГЗ), при этом перенос заряда непосредственно через ГЗ рассматривается как туннелирование носителей через этот барьер.

В данной работе представлена теория, которая позволяет естественным образом объединить диффузионную модель и модель термоэлектронной эмиссии на основе последовательного учета влияния ГЗ на перенос заряда. В предлагаемой обобщенной модели проведен также более строгий учет влияния размера зерен на электроперенос, что привело к некоторым новым выводам относительно электропроводности поликристаллов.

Рассмотрим одномерную модель поликристалла — цепочку из N одинаковых бикристаллов с проводимостью зерен n -типа и акцепторными ПС (рис. 1). При приложении к цепочке постоянного напряжения NU напряженность поля в бикристаллах $\mathcal{E}(x)$ определяется из уравнения Пуассона $d\mathcal{E}(x)/dx = e[N_d - n(x)]/\epsilon\epsilon_0$ с граничными условиями

$$\mathcal{E}(-l_2 - \delta) = \mathcal{E}(l_1) = 0, \quad \mathcal{E}(0) - \mathcal{E}(-\delta) = Q_s/\epsilon\epsilon_0, \quad \int_{-(l_2+\delta)}^{l_1} \mathcal{E}(x)dx = U. \quad (1)$$

Здесь N_d — концентрация полностью ионизованных доноров, $n(x)$ — концентрация электронов в объеме зерен, e — абсолютная величина заряда электрона, $\epsilon\epsilon_0$ — абсолютная диэлектрическая проницаемость материала зерен, $l_1 + l_2 = l$, l — размер зерен, δ — толщина переходного слоя на ГЗ, Q_s — поверхностная плотность заряда на ГЗ.

Величина изгиба зон в зернах определяется выражением

$$V(x) = \begin{cases} e \int_{-(l_2+\delta)}^x \mathcal{E}(x)dx, & -l_2 < x + \delta < 0, \\ -e \int_x^{l_1} \mathcal{E}(x)dx, & 0 < x < l_1. \end{cases} \quad (2)$$

В отсутствие вырождения

$$n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E_c(x) - F_n(x)}{kT}\right), \quad (3)$$

где $E_c(x)$ и $F_n(x)$ — соответственно положение дна зоны проводимости и квазиуровня Ферми. Далее мы будем пренебрегать падением напряжения на ГЗ. Тогда $E_c(x) = E_c - V_1 + V(x)$ при $0 < x < l_1$, и $E_c(x) = E_c - V_2 + V(x)$ при $-l_2 < x + \delta < 0$, где $E_c = E_c(0) = E_c(-\delta)$, $V_1 = V(0)$, $V_2 = V(-\delta)$. Из (1) следует, что $V_2 - V_1 = eU$.

Поверхностная плотность заряда на ГЗ определяется выражением

$$Q_s = -e \int_{E_v}^{E_c} N_s(E) f_s(E) dE, \quad (4)$$

где $N_s(E) = N(E)\delta$ — поверхностная плотность ПС, $N(E)$ — объемная плотность ПС, $f_s(E)$ — функция распределения электронов на ПС, E — энергия электрона.

Как и в [12,13], эффект рассеяния электронов на ГЗ будем моделировать, используя прямоугольный потенциальный барьер высотой V_n и шириной δ (см. рис. 1). При взаимодействии с ГЗ электроны проводимости могут или туннелировать сквозь рассеивающий барьер ГЗ в соседнее зерно, или захватиться на ПС. Имеет место и обратный процесс — эмиссия электронов с ПС в зоны проводимости двух соседних зерен. Последовательный учет электронных процессов на ГЗ осуществляется с помощью следующих граничных условий:

$$j_n(0) - j_t = ev_R n_1 - j_{em}, \quad (5)$$

$$j_t - j_n(-\delta) = ev_R n_2 - j_{em}, \quad (6)$$

где $j_n(0)$ и $n_1 = n(0)$ — соответственно плотность тока и концентрация электронов справа от ГЗ, $j_n(-\delta)$ и $n_2 = n(-\delta)$ — слева от ГЗ; j_t — плотность туннельного тока через ГЗ;

$$v_R = v_0 \int_{E_v}^{E_c} S(E) N_s(E) [1 - f_s(E)] dE \quad (7)$$

— скорость захвата электронов на ПС; $v_0 = \sqrt{kT/2\pi m^*}$ — средняя тепловая скорость электронов, m^* — эффективная масса электронов; $S(E)$ — сечение захвата электрона на ПС с уровнем энергии E ;

$$j_{em} = ev_0 N_c \int_{E_v}^{E_c} S(E) N_s(E) f_s(E) \exp\left(-\frac{E_c - E}{kT}\right) dE \quad (8)$$

— плотность тока эмиссии с ПС (предполагается, что ток эмиссии с ПС в левое и правое зерна одинаков). Остальные обозначения стандартные.

В стационарном состоянии $j_n(0) = j_n(-\delta) = j$, где j — плотность тока в цепочке. Учитывая это, из (5) и (6) находим

$$f_s(E) = \frac{n_1 + n_2}{n_1 + n_2 + 2N_c \exp\left(-\frac{E_c - E}{kT}\right)}, \quad (9)$$

$$j = j_t + \frac{1}{2}ev_R(n_1 - n_2). \quad (10)$$

Появление второго члена в (10) связано со следующим обстоятельством. При $n_1 > n_2$ справа от ГЗ преобладает захват электронов на ПС, а слева — их выброс с ПС, что и обуславливает дополнительный ток через ГЗ, описываемый вторым членом в (10). ГЗ проявляет себя как плоскость, которая захватывает носители с одной стороны и выпускает их с другой [5].

Плотность туннельного тока определяется выражением [14]

$$j_t = \frac{4\pi em^*}{h^3} \int_0^\infty dE [f_1(E) - f_2(E)] \int_0^E D(E, E_{\parallel}) dE_{\parallel}, \quad (11)$$

где $f_1(E)$, $f_2(E)$ — функции распределения электронов в зоне проводимости непосредственно справа и слева от ГЗ; $D(E, E_{\parallel})$ — прозрачность ГЗ для электронов с энергией $E = p^2/2m^*$ и поперечным (по отношению к ГЗ) импульсом p_{\parallel} (p — импульс туннелирующего электрона, $E_{\parallel} = p_{\parallel}^2/2m^*$). В отсутствие вырождения

$$f_1(E) = \exp\left(-\frac{E_c + E - F_n(0)}{kT}\right), \quad (12)$$

$$f_2(E) = \exp\left(-\frac{E_c + E - F_n(-\delta)}{kT}\right), \quad (13)$$

где $F_n(0)$ — положение квазиуровня непосредственно справа, а $F_n(-\delta)$ — слева от ГЗ. Подставляя (12), (13) в (11), получим

$$j_t = ev_0 \bar{D}_n (n_1 - n_2), \quad (14)$$

$$\bar{D}_n = (kT)^{-2} \int_0^\infty \exp(-E/kT) dE \int_0^E D(E, E_{\parallel}) dE_{\parallel}. \quad (15)$$

Если пренебречь зависимостью квазиуровня Ферми от x , то $n_{1,2} = n_0 \exp(V_{1,2}/kT)$, где $n_0 = n(l_1) = n(-l_2 - \delta) = N_c \exp(-\zeta/kT)$, ζ — разность энергии дна зоны проводимости и квазиуровня Ферми при $x = l_1$ и $x = -(l_2 + \delta)$. В этом приближении имеем из (10), (14)

$$j = ev_0 N_c \theta \exp\left(-\frac{V_1 + \zeta}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{eU}{kT}\right)\right], \quad (16)$$

где $\theta = \bar{D}_n + v_R/2v_0$. Полагая в (16) $\theta = 1$ и учитывая, что $v_0 = A^*T^2/eN_c$ (A^* — постоянная Ричардсона), имеем известную формулу для электропроводности бикристалла в модели термоэлектронной эмиссии [6,7].

Как и в [11], при выводе обобщенной формулы для электропроводности будем исходить из известного соотношения

$$j = \mu n(x) \frac{dF_n(x)}{dx}, \quad (17)$$

где μ — подвижность электронов в объеме зерен. Подставляя (3) в (17) и интегрируя от $-(l_2 + \delta)$ до $-\delta$ и от 0 до l_1 , получаем

$$n_{1,2} = n_0 \exp\left(-\frac{V_{1,2}}{kT}\right) \mp \frac{j}{ev_{d1,d2}}, \quad (18)$$

$$v_{d1} = \left[\frac{e}{\mu kT} \int_0^{l_1} dx \exp\left(\frac{V(x) - V_1}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (19)$$

$$v_{d2} = \left[\frac{e}{\mu kT} \int_{-(l_2+\delta)}^{-\delta} dx \exp\left(\frac{V(x) - V_2}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (20)$$

Согласно [11], v_{d1} и v_{d2} можно интерпретировать как эффективные скорости диффузии носителей соответственно справа и слева от ГЗ.

Можно показать, что при $j l_D / (\mu n_0 kT \sqrt{1 - n_0/N_d}) \ll 1$, где $l_D = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 kT / e^2 N_d}$ — дебаевская длина экранирования, в уравнении Пуассона достаточно положить $n(x) = n_0 \exp[-V(x)/kT]$. Тогда

$$\mathcal{E}(x) = \mp \sqrt{\frac{2}{\varepsilon \varepsilon_0}} \left\{ N_d V(x) - n_0 kT \left[1 - \exp\left(-\frac{V(x)}{kT}\right) \right] \right\}^{1/2}, \quad (21)$$

где знак минус соответствует интервалу $0 < x < l_1$, а знак плюс — интервалу $-l_2 < x_2 + \delta < 0$.

При $V_{1,2} \gg kT$ из граничных условий (1) получим

$$V_{1,2} = V_0 \left(1 \mp \frac{eU}{4V_0} \right)^2, \quad V_0 = \frac{Q_s^2}{8\varepsilon \varepsilon_0 N_d}. \quad (22)$$

Для v_{d1} и v_{d2} приближенно имеем

$$v_{d1,d2} \approx \frac{\mu kT}{el_D} \sqrt{\frac{2V_{1,2}}{kT}}. \quad (23)$$

Интегрируя уравнение Пуассона от 0 до l , находим соотношение для определения концентрации электронов в объеме зерен (n_0):

$$\frac{n_0}{N_d} \left[F\left(\frac{n_0}{N_d}, \frac{V_1}{kT}\right) + F\left(\frac{n_0}{N_d}, \frac{V_2}{kT}\right) \right] = \frac{l}{l_D} \left(1 - \frac{|Q_s|}{eN_d l} \right), \quad (24)$$

$$F\left(\frac{n_0}{N_d}, z\right) = \int_0^z \frac{\exp(-z') dz'}{\sqrt{2z' - \frac{2n_0}{N_d} [1 - \exp(-z')]}}$$

Приближенно имеем

$$F\left(\frac{n_0}{N_d}\right) = \left(1 - \frac{n_0}{N_d}\right)^{-1/2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erf}(\sqrt{z}). \quad (25)$$

Из (24), (25) находим

$$n_0 = \frac{N_d \xi}{2} \left(\sqrt{\xi^2 + 4} - \xi\right), \quad (26)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(1 - \frac{|Q_s|}{eN_d l}\right) \frac{l}{l_D} \left(\operatorname{erf} \sqrt{\frac{V_1}{kT}} + \operatorname{erf} \sqrt{\frac{V_2}{kT}}\right)^{-1} \quad (27)$$

и из (10), (14), (18) получаем окончательное выражение для плотности тока

$$j = \frac{ev_0 n_0 \theta}{1 + \gamma} \exp\left(-\frac{V_1}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{eU}{kT}\right)\right], \quad (28)$$

где $\gamma = v_0 (v_{d1}^{-1} + v_{d2}^{-1}) \theta$. Видно, что при $\gamma \ll 1$ выражение (28) переходит в (16), т.е. в формулу для вольт-амперной характеристики (ВАХ) в модели термоэлектронной эмиссии. Учитывая (23), при $\gamma \gg 1$ имеем

$$j = e\mu n_0 \sqrt{\frac{V_1 N_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}} \left(1 + \frac{eU}{4V_0}\right) \exp\left(-\frac{V_1}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{eU}{kT}\right)\right] \quad (29)$$

— формулу для ВАХ в диффузионной модели [1].

Таким образом, результат, описываемый формулой (28), является объединением диффузионной модели и модели термоэлектронной эмиссии. Существенно новым в предлагаемой модели является зависимость концентрации электронов в объеме зерен от напряжения U , выражаемая соотношениями (26), (27). Наиболее сильно эта зависимость проявляется при $\xi \ll 1$, когда имеет место полное обеднение зерен в результате захвата носителей на ПС.

На рис. 2–4 представлены результаты численных расчетов, иллюстрирующие влияние значений параметров ПС и размера зерен на вольт-амперную характеристику поликристалла с $N_d = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon = 8.9$, $\mu = 210 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, $\bar{D}_n = 0.1$, $N_c = 2.25 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $v_0 = 6 \cdot 10^6 \text{ см/с}$ при $T = 300 \text{ К}$. Кривые рис. 2,3 соответствуют моноэнергетическим ПС, т.е. $N_s(E) = N_s \cdot \delta(E_s - E)$, а при расчете кривых рис. 4 использовано распределение ПС вида

$$N_s(E) = \begin{cases} N_0, & E_c - \Delta E < E < E_c, \\ 0, & E_v < E < E - \Delta E. \end{cases} \quad (30)$$

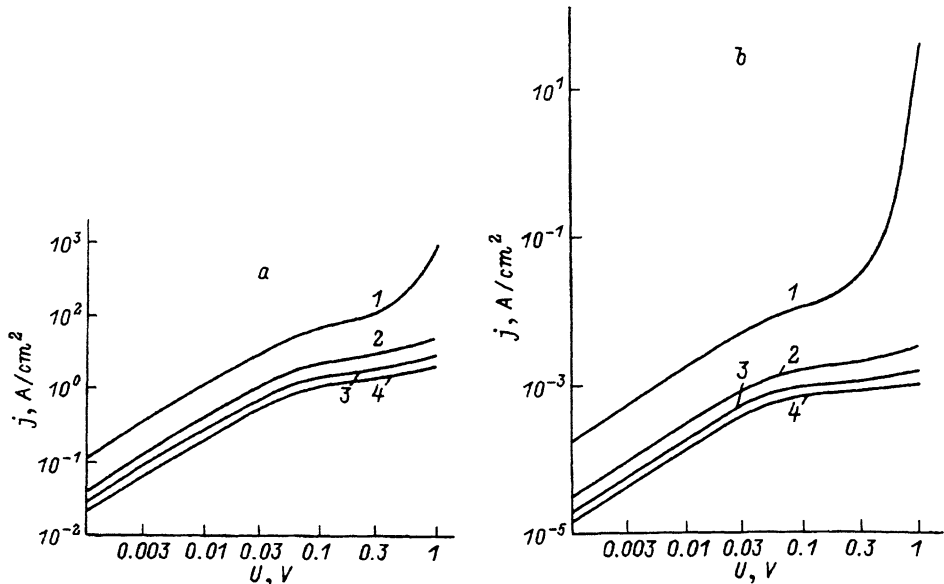


Рис. 2. ВАХ цепочки одинаковых бикристаллов с размером зерен $l = 1 \cdot 10^{-4}$ см и моноэнергетическими пограничными состояниями. $S = 2.5 \cdot 10^{-14}$ см²; E_s , эВ: а — 0.3, б — 0.5; N_s , см⁻²: 1 — $1 \cdot 10^{12}$, 2 — $2 \cdot 10^{12}$, 3 — $3 \cdot 10^{12}$, 4 — $4 \cdot 10^{12}$.

При $l = 1 \cdot 10^{-4}$ см имеет место частичное обеднение зерен и $n_0 = N_d$ (рис. 2, а, б). Видно, что линейная зависимость $j(U)$ переходит в сублинейную [с коэффициентом нелинейности $\alpha = d(\ln j)/d(\ln U) < 1$]. Область ВАХ с $\alpha < 1$ соответствует режиму компенсации [4], при котором понижение межкристаллитных барьеров продольным электрическим полем компенсируется дополнительным захватом электронов на ПС. По мере приближения f_s к 1 захват электронов на ПС замедля-

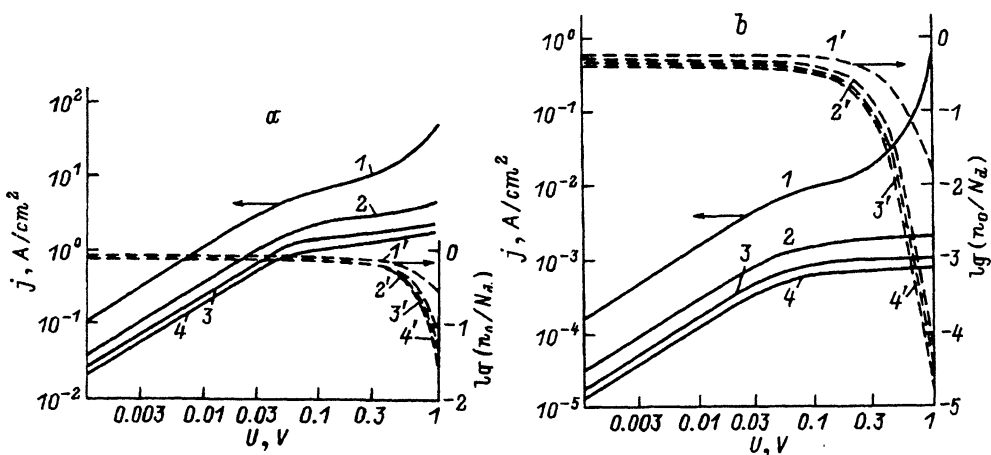


Рис. 3. ВАХ, аналогичные приведенным на рис. 2, а, б, но при размере зерен $l = 2 \cdot 10^{-5}$ см (сплошные линии, 1-4) и соответствующие зависимости $\lg(n_0/N_d)$ от U (штриховые, 1'-4').

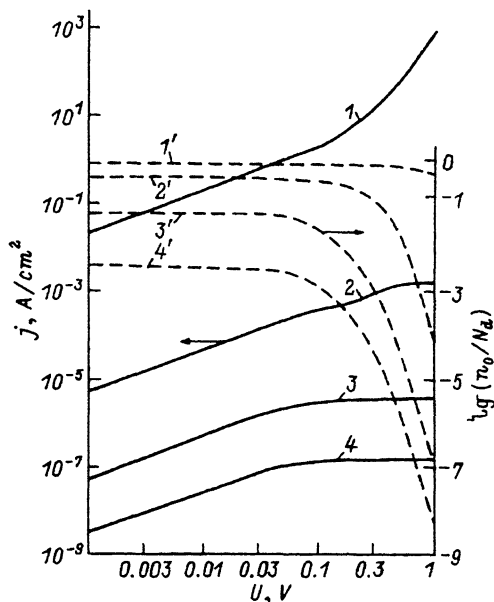


Рис. 4. ВАХ цепочки одинаковых бикристаллов с размером зерен $l = 2 \cdot 10^{-5}$ см и непрерывным распределением пограничных состояний (сплошные линии, 1-4), а также соответствующие зависимости $\lg(n_0/N_d)$ от U (штриховые, 1'-4'). $S = 2.5 \cdot 10^{-14}$ см²; $\Delta E = 1$ эВ; N_0 , см⁻² · эВ⁻¹: 1, 1' — $1 \cdot 10^{12}$; 2, 2' — $2 \cdot 10^{12}$; 3, 3' — $3 \cdot 10^{12}$; 4, 4' — $4 \cdot 10^{12}$.

ется, при этом сублинейная зависимость переходит в суперлинейную, с $\alpha > 1$ (кривые 1 на рис. 2, a, b). Область ВАХ с $\alpha > 1$ соответствует режиму декомпенсации [4], при котором заполнение слабо зависит от U ($f_s \approx 1$) и дополнительный захват электронов на ПС уже не компенсирует понижение барьеров продольным полем. Отметим, что ВАХ типа кривых 1 на рис. 2, a, b наблюдалась в [8].

При $l = 2 \cdot 10^{-5}$ см имеет место полное обеднение зерен (рис. 3, a, b, рис. 4). В этом случае $Q_s \approx eN_d l$, заполнение слабо зависит от U (режим декомпенсации) и, согласно выводам работы [4], линейная зависимость должна почти сразу переходить в суперлинейную. Однако такой характер имеет только кривая 1 на рис. 4. Кривые 1 на рис. 3, a, b содержат три участка — линейный, сублинейный и суперлинейный. На ВАХ 2-4 рис. 3, a, b и рис. 4 линейная зависимость сменяется областью насыщения. Такой противоречащий выводам работы [4] характер зависимости $j(U)$ обусловлен сильным уменьшением n_0 с ростом U (см. штриховые кривые на рис. 3, a, b, рис. 4), которое компенсирует увеличение j , связанное с понижением барьеров продольным полем.

Эффект возрастания степени обеднения зерен при повышении напряжения U можно легко понять из соотношений (26), (27). При $\xi \ll 1$ величина $|Q_s|$, хотя и незначительно, но повышается с ростом U , все более приближаясь к величине $eN_d l$. Этот малый рост практически не влияет на прозрачность барьеров, однако оказывает существенное влияние на концентрацию n_0 , так как при $|Q_s| \rightarrow eN_d l$ отношение $n_0/N_d \approx \xi \rightarrow 0$. Отметим, что ранее этот эффект в литературе не обсуждался.

Список литературы

- [1] W.E. Taylor, N. Odell, H. Fan. Phys. Rev., **88**, 867 (1952).
- [2] Е.И. Гольцман, А.Г. Ждан. ФТП, **10**, 1839 (1976).
- [3] Е.И. Гольцман, И.Б. Гуляев, А.Г. Ждан, В.Б. Сандомирский. ФТП, **10**, 2089 (1976).
- [4] Е.И. Гольцман, А.Г. Ждан, В.Н. Неменуший. ФТП, **12**, 833 (1978).
- [5] R.K. Mueller. J. Appl. Phys., **32**, 635 (1961).
- [6] C.H. Seager, T.H. Casner. J. Appl. Phys., **49**, 3879 (1978).
- [7] G.E. Pike, G.H. Seager. J. Appl. Phys., **50**, 3414 (1979).
- [8] C.H. Seager, G.E. Pike. Appl. Phys. Lett., **35**, 709, (1979).
- [9] G.C. McGonigal, D.J.S. Thomson, J.G. Shaw, H.C. Card. Phys. Rev. B, **28**, 5908 (1983).
- [10] S.N. Singh, R. Kishore, P.K. Singh. J. Appl. Phys., **57**, 2793 (1985).
- [11] C.R. Crowell, S.M. Sze. Sol. St. Electron., **9**, 1035 (1966).
- [12] C.Y. Lu, N.C.C. Lu. Sol. St. Electron., **26**, 549 (1983).
- [13] M.M. Mandurah, K.C. Saraswat, C. Helms, T. Kamins. IEEE Trans. Electron. Dev., **ED-28**, 1163 (1981).
- [14] Туннельные явления в твердых телах (под ред. Э.Бурштейна, С.Лундквиста). М. (1973).

Редактор Л.В. Шаронова
