Влияние термополевой ионизации на формирование барьера Шоттки металл–⟨аморфный кремний⟩

© П.Н. Крылов

Удмуртский государственный университет,
426037 Ижевск, Россия

(Получена 27 сентября 1999 г. Принята к печати 6 октября 1999 г.)

Получено выражение для функции распределения носителей заряда по глубоким уровням с учетом эффекта Френкеля–Пула в области объемного заряда, использование которого позволило рассчитать влияние термополевой ионизации на плотность объемного заряда, распределение потенциала в области объемного заряда, квазистатические вольт-фарадные характеристики контакта металл–⟨аморфный кремний⟩.

Введение

Свойства барьера Шоттки на аморфном кремнии (α-Si) существенно отличаются от свойств барьера в кристаллах тем, что суммарный пространственный заряд в области барьера определяется как ионизованными примесями, так и локализованными состояниями, связанными с оборванными ковалентными связями. Большая плотность локализованных состояний определяет электрофизические свойства α-Si: слабую чувствительность к легированию, прыжковую проводимость и другие. Электропроводность аморфного кремния, полученного из взвешенного состояния [1] и разложением силана [2], при напряженности электрического поля $E > 10^4$ В/см существенно нелинейна и описывается в рамках теории Френкеля–Пула. Эффект Френкеля–Пула связан с усиливаемым полем термическим возбуждением захваченных электронов или дырок из ловушек — термополевая ионизация (ТПИ). Приложенное электрическое поле E приводит к снижению потенциального барьера, препятствующего освобождению нейтральным локальным центром захваченного носителя, и увеличивает вероятность освобождения из ловушки в одномерном случае на множитель [3]

$$F = \exp(\beta E^{1/2}/kT), \tag{1}$$

а в трехмерном случае — на множитель [4]

$$F = (kT/\beta E^{1/2})\ \mathrm{sh}(\beta E^{1/2}/kT), \tag{2}$$

где $\beta = (e^3/4\pi\varepsilon\varepsilon)^{1/2}$ — постоянная Френкеля–Пула.

В области пространственного заряда (ОПЗ) барьера Шоттки электрическое поле, как правило, сильное, однако в литературе не рассматривается влияние эффекта ТПИ на формирование и свойства контакта металл–⟨аморфный кремний⟩. Поскольку вероятность освобождения носителя из нейтральной ловушки под действием сильного электрического поля изменяется, кинетику генерации–рекомбинации необходимо рассматривать с учетом полевого воздействия.

Влияние термополевой ионизации глубокого центра на распределение электронов по ловушкам донорного и акцепторного типов

Пусть концентрация ловушек донорного типа равна N_t, а их энергетический уровень — E_t. Тогда темп захвата электронов из зоны проводимости на ловушки (r_n) равен $r_n = \alpha_n N_t(1 - f_t)n$, где α_n — коэффициент захвата неравновесных электронов ловушками.

Темп эмиссии электронов с ловушек донорного типа в зону проводимости, ускоренный действием электрического поля, можно записать в виде $g_n = g_{nt}F$, где $g_{nt} = \beta_n N_t f_t$ — темп тепловой эмиссии. Здесь β_n — коэффициент ионизации электронов с ловушек. Связь между α_n и β_n можно найти с помощью принципа детального равновесия $\beta_n = \alpha_n n_1$, где

$$n_1 = g^{-1} N_c \exp\left[-(E_c - E_t)/kT\right]$$

— равновесная концентрация электронов в зоне проводимости, когда уровень Ферми совпадает с уровнем ловушки. Суммарный темп генерации электронов с ловушек донорного типа в зону проводимости равен

$$U_{nd}^{c} = g_n - r_n = \alpha_n N_d\left[n_1 f_t F - n(1 - f_t)\right]. \tag{3}$$

Поступая аналогичным образом, для суммарного темпа генерации дырок в валентную зону с ловушек акцепторного типа можно записать выражение

$$U_{pa}^{\mathrm{v}} = g_p - r_p = \beta_p N_a(1 - f_t)F - \alpha_p N_a f_t. \tag{4}$$

Здесь первое слагаемое определяет количество дырок, генерируемых ловушками акцепторного типа под действием поля, а второе — дырок, захваченных из валентной зоны на ловушки. Величины α_p и β_p представляют собой коэффициенты захвата и ионизации для дырок. Приравнивая r_p и g_p в случае равновесия, получим связь между β_p и α_p в виде $\beta_p = \alpha_p p_t$, где $p_1 = gN_{\mathrm{v}}\exp[-(E_t - E_{\mathrm{v}})/kT]$ — равновесная концентрация дырок в валентной зоне, когда уровень Ферми совпадает с уровнем ловушки. Тогда выражение (4) можно переписать в виде

$$U_{pa}^{\mathrm{v}} = \alpha_p N_a\left[p_1(1 - f_t)F - p f_t\right]. \tag{5}$$

Рассмотрим теперь баланс между переходами ⟨донорный уровень⟩–⟨валентная зона⟩, ⟨акцепторный уровень⟩–⟨зона проводимости⟩. В этих случаях темп рекомбинации увеличивается в F раз, поскольку, например, рекомбинация электрона из зоны проводимости на акцепторный уровень эквивалентна генерации дырки с уровня с энергией E_a в зону проводимости, и по аналогии с (3) и (5) имеем

$$U^{\mathrm{v}}_{pd} = \alpha_p N_d \big[p_1(1-f_t) - p f_t F\big], \qquad (6)$$

$$U^{c}_{na} = \alpha_n N_a \big[n_1 f_t - n(1-f_t)F\big]. \qquad (7)$$

Суммарные темпы генерации электронов с ловушек обоих типов в зону проводимости и дырок в валентную зону соответственно равны

$$U_n = U^c_{nd} + U^c_{na}, \qquad U_p = U^{\mathrm{v}}_{pa} + U^{\mathrm{v}}_{pd}.$$

Остановимся теперь подробнее на стационарных, но неравновесных состояниях. Рассмотрим условие, когда ток через систему не протекает. Тогда

$$U^c_{nd} = U^{\mathrm{v}}_{pd} = U^c_{na} = U^{\mathrm{v}}_{pa} = U_n = U_p = 0, \quad j_n = j_p = 0$$

и можно найти функцию распределения электронов по ловушкам донорного типа:

$$f^n_d = \big[1 + g^{-1}_{dn} F \exp(E_d - \xi_0/kT)\big]^{-1} \qquad (8)$$

и по ловушкам акцепторного типа:

$$f^n_a = \big[1 + g^{-1}_{an} F^{-1} \exp(E_d - \xi_0/kT)\big]^{-1}, \qquad (9)$$

где $E_d = E^0_d - e\varphi$, $E_a = E^0_a - e\varphi$, ξ_0 — химический потенциал.

Рассмотрим баланс между процессами переходов донор–акцептор ($d \leftrightarrow a$). Темп переходов $d \to a$ равен

$$g_{d\to a} = \alpha N_d f_d N_a (1-f_a) F^2,$$

поскольку этот процесс можно представить следующим образом: электрон покидает донор, дырка — акцептор и в обоих случаях имеет место полевая ионизация. Затем электрон и дырка рекомбинируют. Темп обратных переходов $a \to d$ равен

$$g_{a\to d} = \beta N_a f_a N_d (1-f_d).$$

Из условия теплового равновесия $g^0_{d\to a} = g^0_{a\to d}$ находим связь между коэффициентом захвата β и коэффициентом ионизации α:

$$\beta = \alpha (g_{dn}/g_{an}) \exp\big[(E_a - E_d)/kT\big],$$

подставляя которое в уравнение баланса $g_{d\to a} = g_{a\to d}$, получим уравнение

$$\frac{f_d}{1-f_d} F^2 = \frac{g_{dn}}{g_{an}} \frac{f_a}{1-f_a} \exp\left(\frac{E_a - E_d}{kT}\right).$$

Подставляя сюда (8) и (9), получим тождество. Таким образом, функции распределения носителей заряда по локальным состояниям (8) и (9) обеспечивают баланс между любыми из процессов:

$$d \leftrightarrow E_c, \quad d \leftrightarrow E_{\mathrm{v}}, \quad a \leftrightarrow E_c, \quad d \leftrightarrow E_{\mathrm{v}}, \quad d \leftrightarrow a.$$

Как видно из (8) и (9), влияние электрического поля сводится к увеличению числа заряженных (ионизованных) ловушек в полупроводнике независимо от их типа.

Плотность объемного заряда в аморфном кремнии при термополевой ионизации

В случае аморфных полупроводников плотность состояний внутри щели подвижности может быть представлена в виде суперпозиции донорноподобных и акцепторноподобных состояний. В качестве модельных парциальных плотностей состояний примем значения

$$g(E) = g_d(E) + g_a(E),$$

$$g_d(E) = g_d(E_{\mathrm{v}}) \exp\big[(E_{\mathrm{v}} - E)/E_{0d}\big],$$

$$g_a(E) = g_a(E_c) \exp\big[(E - E_c)/E_{0a}\big]. \qquad (10)$$

Здесь и далее E — энергия носителей заряда. Плотность объемного заряда ρ можно записать в виде

$$\rho = e(N^+_d - N^-_a), \qquad (11)$$

где

$$N^+_d = \int\limits_{E_{\mathrm{v}}}^{\infty} g_d(E)\big[1 - f^n_d(E)\big] dE \qquad (12)$$

— концентрация ионизованных донорноподобных центров;

$$N^-_a = \int\limits_{-\infty}^{E_c} g_a(E)\, f^n_a(E) dE \qquad (13)$$

— концентрация акцепторноподобных центров.

Подставляя (8)–(10) в (12) и (13), выразим концентрации заряженных ловушек через гипергеометрические функции:

$$N^+_d = g_d(E_{\mathrm{v}})\, kT\, \frac{\mathrm{F}(1,\,\alpha,\,\alpha+1,\,A)}{\alpha}, \qquad (14)$$

$$N^-_a = g_a(E_c)\, kT\, \frac{\mathrm{F}(1,\,\beta,\,\beta+1,\,B)}{\beta}, \qquad (15)$$

где

$$A = \exp\big[(E^*_{fd} - E_{\mathrm{v}})/kT\big],$$

$$B = \exp\big[(E_c - E^*_{fa})/kT\big],$$

$$E^*_{fd} = \xi_0 + e\varphi + kT \ln(g_{dn}F),$$

$$E^*_{fa} = \xi_0 + e\varphi - kT \ln(g^{-1}_{an}F),$$

$$\alpha = kT/E_{0d}, \qquad \beta = kT/E_{0a}.$$

Здесь E^*_{fa} и E^*_{fd} — квазиуровни Ферми для электронов, локализованных на акцепторноподобных и донорноподобных уровнях соответственно. Подставляя (14) и (15) в (11) и учитывая условие электронейтральности в объеме, получим

$$\frac{\mathrm{F}(1,\ \alpha,\ \alpha+1,\ -A^*)}{\alpha} = \frac{\mathrm{F}(1,\ \beta,\ \beta+1,\ -B^*)}{\beta} = C, \quad (16)$$

где

$$A^* = \exp\left[(\xi_0 - E_\mathrm{v})/kT\right], \quad B^* = \exp\left[(E_c - \xi_0)/kT\right],$$

плотность объемного заряда можно записать в виде

$$\rho = eg_d(E_\mathrm{v})kT\,C\left[\frac{\mathrm{F}(1,\ \alpha,\ \alpha+1,\ -A)}{\mathrm{F}(1,\ \alpha,\ \alpha+1,\ -A^*)} - \frac{\mathrm{F}(1,\ \beta,\ \beta+1,\ -B)}{\mathrm{F}(1,\ \beta,\ \beta+1,\ -B^*)}\right]. \quad (17)$$

Характер распределения объемного заряда определяет ход потенциала φ в ОПЗ в соответствии с уравнением Пуассона:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (18)$$

В безразмерных переменных

$$e\varphi/kT = \psi, \quad x/L = y, \quad L^2 = 2\varepsilon\varepsilon_0/e^2 g_d(E_\mathrm{v}),$$

$$\alpha = (e/\pi\varepsilon\varepsilon_0 L\,kT)^{1/2}$$

уравнение Пуассона можно переписать в виде

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = \frac{1}{C}\left[\frac{\mathrm{F}(1,\ \beta,\ \beta+1,\ -B)}{\beta} - \frac{\mathrm{F}(1,\ \alpha,\ \alpha+1,\ -A)}{\alpha}\right] \quad (19)$$

с граничными условиями

$$y \to \infty, \quad \psi,\ d\psi/dy \to 0;$$

$$y \to 0, \quad \psi \to \psi_k + eV/kT, \quad (20)$$

где ψ_k — контактная разность потенциалов, V — внешнее смещение. Однако первое граничное условие не может быть использовано при численном анализе. Перейдя к новой переменной $z = (d\psi/dy)^2$, уравнение (19) можно переписать в виде

$$\frac{dz}{d\psi} = \frac{2}{C}\left[\frac{\mathrm{F}(1,\ \beta,\ \beta+1,\ -B)}{\beta} - \frac{\mathrm{F}(1,\ \alpha,\ \alpha+1,\ -A)}{\alpha}\right], \quad (21)$$

где

$$A = \exp(\Delta + \eta_0 + \psi - az^{1/4}), \quad B = \exp(\eta_0 - \psi - az^{1/4}),$$

$$\Delta = E_g/kT, \qquad \eta_0 = (\xi_0 - E_c)/kT$$

с граничными условиями

$$\psi \to 0, \qquad z \to 0;$$

$$\psi \to \psi_k + eV/kT, \quad z \to z_k. \quad (22)$$

Известно [5], что гипергеометрический ряд Гаусса $\mathrm{F}(a, b, c, z)$ сходится при $|z| < 1$. Используя соотношение Гаусса для смежных функций, получим формулу для расчета $\mathrm{F}(1, \alpha, \alpha+1, -A)$ при $|A| < 1$

$$\mathrm{F}(1, \alpha, \alpha+1, -A) = \frac{1}{1+A} + \frac{A}{1+A}\left(\frac{\alpha+1}{\alpha}\right) \times \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-A)^n}{(\alpha+n)(\alpha+n+1)}. \quad (23)$$

При $|A| > 1$ используем соотношение

$$\mathrm{F}(1, \alpha, \alpha+1, -A) = \frac{\pi\alpha}{\sin\pi\alpha}\,\frac{1}{A^\alpha} + \left(\frac{\alpha}{\alpha+1}\right) \times \frac{1}{A}\,\mathrm{F}(1, 1-\alpha, 2-\alpha, -A^{-1}), \quad (24)$$

где расчет функции $\mathrm{F}(1, 1-\alpha, 2-\alpha, -A^{-1})$ можно проводить по формуле (23).

Уравнение Пуассона (21) с условиями (22)–(24) решалось численно методом трапеций. Была получена зависимость $\psi'(\psi)$, которая также интегрировалась методом трапеций, в результате чего получена зависимость потенциала от координаты. Параллельно с решением уравнения Пуассона можно вычислить дифференциальную емкость как функцию приложенного напряжения. Действительно, зависимость емкости от напряжения определяется выражением $C(V) = \psi''/\psi'$, которое с учетом полученной зависимости $\psi'(\psi)$ приобретает явный вид, пригодный для численного анализа

$$C = \psi''\left[\psi, \psi'(\psi)\right]/\psi'(\psi). \quad (25)$$

Результаты численного расчета и их обсуждение

На рис. 1 изображена типичная зависимость от напряжения уровня Ферми ξ относительно порогов подвижности, а также квазиуровни Ферми для электронов, локализованных на донорноподобных (E^*_{fd}) и акцепторноподобных (E^*_{fa}) уровнях. Отличие E^*_{fd} и E^*_{fa} от ξ обусловлено влиянием эффекта Френкеля–Пула, приводящего к понижению значения E^*_{fd} и повышению

E^*_{fa}, что является следствием ионизирующего действия электрического поля. Продолжением этого следствия является более резкий спад потенциала в ОПЗ (рис. 2), приводящий к уменьшению толщины ОПЗ. На рис. 3 приведена зависимость емкости барьера C от приложенной разности потенциалов. Как видно из рис. 3, поведение емкости существенно отличается от того, что предсказывает классическая теория барьера Шоттки

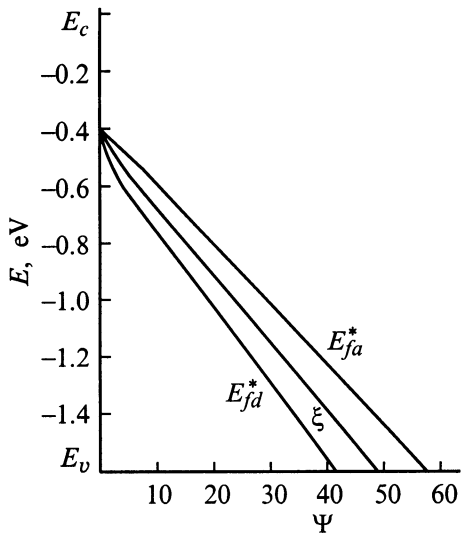

Рис. 1. Зависимости уровня Ферми ξ и квазиуровней Ферми E^*_{fd}, E^*_{fa} от приведенного потенциала электрического поля внутри барьера $\Psi = e\varphi/kT$.

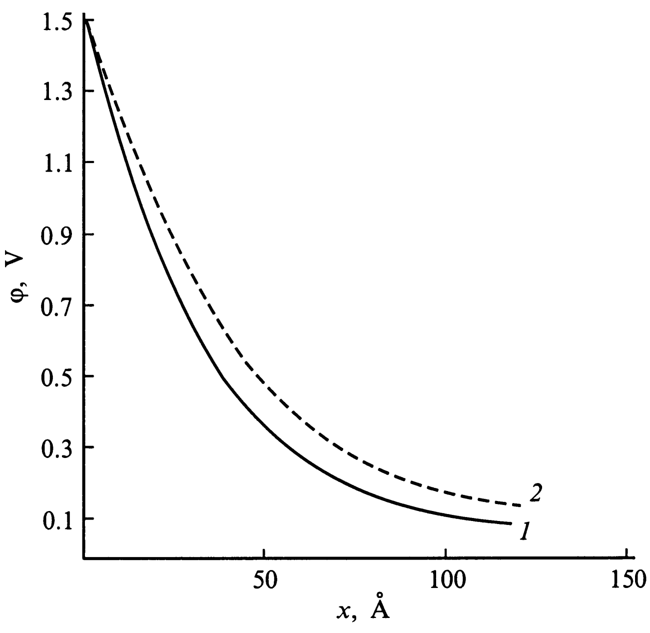

Рис. 2. Ход потенциала в области объемного заряда барьера Шоттки металл–⟨аморфный кремний⟩: *1* — с учетом, *2* — без учета эффекта термополевой иоинзации.

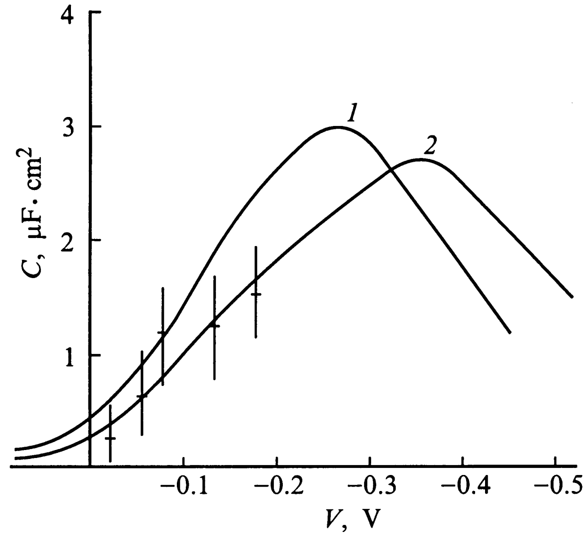

Рис. 3. Зависимости емкости (C) от обратного смещения (V) для барьера Шоттки металл–⟨аморфный кремний⟩. Зависимости рассчитаны при $E_c - \xi = 0.65$ эВ: *1* — с учетом, *2* — без учета термополевой ионизации.

$$C^{-2} \propto V_k - V. \qquad (26)$$

Зависимость такого типа начинается лишь при достаточно больших отрицательных смещениях, например, для случая $\eta_0 = -32$ при $\psi > 35$ без учета ТПИ, а при $\psi > 45$ — с учетом ТПИ. Такое поведение можно качественно объяснить, рассматривая положение квазиуровней Ферми относительно порогов подвижности. Зависимость типа (26) начинает проявляться лишь при тех значениях напряжения смещения V, при которых зарядовое состояние локальных уровней не изменяется. Это означает, что мы получаем модель барьера Шоттки, в которой плотность объемного заряда является постоянной. На начальном участке роста емкости C от напряжения V эффект ТПИ дает более пологую кривую. Чтобы сравнить с имеющимися в литературе экспериментальными данными зависимости емкости от обратного смещения для барьера на границе раздела нелегированного гидрогенизированного аморфного кремния с золотом [6], на рис. 3 представлены расчетные кривые при $E_c - \xi = 0.65$ эВ, $g(\xi_0) = 10^{17}$ эВ$^{-1}\cdot$см$^{-3}$ с учетом и без учета ТПИ. Как видно из рис. 3, учет термополевой ионизации в области объемного заряда приводит к более точному совпадению экспериментальной и расчетной кривых.

Список литературы

[1] А.А. Андреев, О.А. Голикова, М.М. Казанин, М.М. Мездрогина. ФТП, **13**(9), 1859 (1979).
[2] А.К. Джоншер, Р.М. Хилл. Физика тонких пленок, **8**, 180 (1978).
[3] J.L. Hartke. J. Appl. Phys., **39**, 4871 (1968).
[4] M. Ieda, G. Sawa, S. Kato. J. Appl. Phys., **42**, 3737 (1971).
[5] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Сигал (М., Наука, 1979).
[6] *Аморфные полупроводники*, под ред. М. Бродски (М., Мир, 1982).

Редактор Т.А. Полянская

The influence of thermal-field ionization on the formation of Schottky barrier: metal–amorphous silicon

P.N. Krylov

Udmurt State University,
426037 Izhevsk, Russia