

Пьезосопротивление в пленках поликристаллического кремния

p-типа

© В.А. Гридчин, В.М. Любимский[¶]

Новосибирский государственный технический университет,
630092 Новосибирск, Россия

(Получена 1 декабря 2003 г. Принята к печати 20 января 2004 г.)

Описан эффект пьезосопротивления в поликристаллическом кремнии *p*-типа при рассеянии дырок на межкристаллитных потенциальных барьерах. Величины коэффициентов эластосопротивления при этом типе рассеяния близки к величинам коэффициентов эластосопротивления при рассеянии на ионах примеси и акустических колебаниях решетки. Расхождение между экспериментальными и расчетными коэффициентами эластосопротивления, возможно, может быть устранено при учете изменения эффективных масс при деформации, несферичности валентной зоны, „малых эффектов“, а также учете дополнительного (дополнительных) механизмов рассеяния.

1. Введение

В настоящее время имеется несколько моделей, применяемых для описания пьезорезистивных свойств поликристаллического кремния [1–11]. В большинстве работ эффект пьезосопротивления в поликристаллическом кремнии рассматривался при больших концентрациях примеси и предполагалось, что вклад барьеров на границе зерен в эффект не значителен [1–3,5,6,9–11]. В работах [4,7,8] на основании модели проводимости, согласно которой удельное сопротивление поликристаллического кремния определяется удельным сопротивлением кристаллитов и барьеров, определялись коэффициенты пьезосопротивления как кристаллитов, так и барьеров. Однако полученные результаты, по мнению авторов [12], не являются убедительными.

Цель данной работы — описание эффекта пьезосопротивления в поликристаллическом кремнии *p*-типа при рассеянии дырок на межкристаллитных потенциальных барьерах и сравнении полученных результатов с экспериментальными.

Описание эффекта пьезосопротивления в пленках поликристаллического кремния выполнено в следующей последовательности: сначала рассмотрен эффект пьезосопротивления в монокристаллическом кремнии, в котором имеются потенциальные барьеры, перпендикулярные одной из главных осей кристалла и отождествляемые с потенциальными барьерами на границах кристаллитов; определены коэффициенты эластопроводимости (M_{ijmn}), эластосопротивления (m_{ijmn}) монокристаллического кремния. Затем вычислены коэффициенты эластосопротивления поликристаллического кремния ($\langle m_{ijmn} \rangle$) и проведено сравнение экспериментальных и вычисленных коэффициентов эластосопротивления.

2. Теория

Эффект пьезосопротивления характеризуется коэффициентами эластопроводимости, эластосопротивления и пьезосопротивления. Между всеми этими коэффициен-

тами существует однозначная связь (см., например, [13]). Экспериментально определяются коэффициенты пьезосопротивления или эластосопротивления, в то время как теоретически вычисляются коэффициенты эластопроводимости. Коэффициенты эластопроводимости определяются выражением

$$\frac{\Delta\sigma_{ij}}{\langle\sigma\rangle} = M_{ijmn}\varepsilon_{mn}, \quad \langle\sigma\rangle = \frac{1}{3} \text{Sp } \sigma = \sigma_0, \quad (1)$$

где $\Delta\sigma_{ij}$ — изменение проводимости под действием деформации ε_{mn} .

В эффект пьезосопротивления в кремнии *p*-типа основной вклад вносят тяжелые и легкие дырки [13]. Тогда среднее значение коэффициента эластопроводимости при одинаковом механизме рассеяния для тяжелых и легких дырок равно [13]

$$M_{ijmn} = M_{ijmn}^{(1)} \left(\frac{\sigma_0^{(1)} - \sigma_0^{(2)}}{\sigma_0^{(1)} + \sigma_0^{(2)}} \right), \quad (2)$$

индексы (1) и (2) относятся к тяжелым и легким дыркам соответственно.

Эффект пьезосопротивления в полупроводниках с вырожденными зонами, как известно, связан как с изменением при деформации функции распределения Ферми–Дирака (f_0), так и с изменением времени релаксации (τ) и групповой скорости движения дырок (v) [13].

Электропроводность каждого сорта дырок при учете фермиевского вырождения может быть записана как

$$\sigma_{ik}^t = -\frac{q^2}{4\pi^3} \int \tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} v_i^t v_j^t d^3k,$$

а ее изменение ($\Delta\sigma_{ij}^t$) при действии деформации (ε_{mn}) [13]:

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{ij}^t &= \frac{q^2\varepsilon_{mn}}{4\pi^3\hbar^2} \int \frac{\partial}{\partial\varepsilon_{mn}} \left(\tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \right) \frac{\partial E^t}{\partial k_i} \frac{\partial E^t}{\partial k_j} d^3k \\ &+ \frac{2q^2\varepsilon_{mn}}{4\pi^3\hbar^2} \int \tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \frac{\partial^2 E^t}{\partial k_i \partial k_j} \frac{\partial E^t}{\partial\varepsilon_{mn}} d^3k, \end{aligned}$$

где верхний индекс $t=(1)$ или (2) ; E^t , v_i^t , τ^t — энергия, компонента скорости и время релаксации упругого

[¶] E-mail: lubvln@ngs.ru

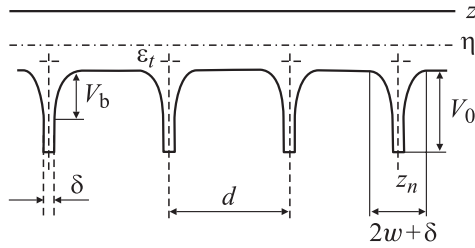


Рис. 1. Модель потенциальных барьеров в поликремнии p -типа.

рассеяния носителей заряда соответственно, q — заряд электрона.

Изменение энергии при деформации имеет вид (верхний знак относится к зоне легких, а нижний — к зоне тяжелых дырок) [14]

$$\Delta E(k) = \pm \frac{Bb}{2\bar{B}} \left[\frac{3}{k^2} (k_m \varepsilon' k_n) - \varepsilon \right],$$

$$\varepsilon' = \begin{cases} \varepsilon_{mn} & \text{при } m = n \\ \gamma \varepsilon_{mn} & \text{при } m \neq n \end{cases},$$

$$\gamma = \frac{Dd}{3Bb}, \quad \varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33},$$

где B , \bar{B} , D и b , d — параметры валентной зоны.

Аппроксимируя поверхности постоянной энергии дырок сферами, получим

$$\Delta \sigma_{ij}^t = \left(\frac{q^2 \hbar^2}{4\pi^3 m^{*2}} \int \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{mn}} \left(\tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \right) k_i k_j d^3 k \right. \\ \left. + \frac{2q^2}{4\pi^3 m^*} \int \tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \frac{\partial E^t}{\partial \varepsilon_{mn}} d^3 k \right) \varepsilon_{mn}. \quad (3)$$

Если время релаксации зависит только от энергии и не имеет угловой зависимости, то, как показано в [13,14], второй интеграл равен нулю.

В случае рассеяния носителей заряда на потенциальных барьерах на границах кристаллитов время релаксации τ_b равно [15]

$$\tau_b = \frac{\hbar^3 |k_z|}{2m^* L |U|^2}, \quad U = \frac{1}{L} \int U_0(z) \exp(-i2k_z z) dz, \quad (4)$$

где L — размер кристаллита, $U_0(z)$ — потенциальная энергия барьера на границе кристаллита. Ось z находится в плоскости пленки и совпадает с направлением напряженности внешнего электрического поля (рис. 1).

Как видно из (4), τ_b имеет угловую зависимость и поэтому второй интеграл в (3) отличен от нуля при вычислении M_{1111}^t и M_{1122}^t . При вычислении M_{3232}^t этот интеграл равен 0, из-за того что время релаксации не зависит от угла ϕ , а $\partial E^t / \partial \varepsilon_{32}$ не зависит от $\sin \phi$.

При вычислении коэффициентов эластопроводимости в соотношении (3) удобнее перейти от интегрирования по k_x , k_y , k_z к интегрированию по энергии.

Независимые компоненты тензора эластопроводимости M_{3232}^t , M_{1111}^t , M_{1122}^t равны

$$M_{3232}^t = \frac{q^2 \sqrt{2m^{t*}}}{\sigma_0^t 2\pi^3 \hbar^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left[\frac{\partial \tau^t}{\partial \varepsilon_{32}} \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \pm \frac{\partial^2 f_0}{\partial (E^t)^2} \frac{Dd}{2\bar{B}} \right. \\ \left. \times \cos \theta \sin \theta \sin \phi \right] (E^t)^{3/2} \cos \theta \sin^2 \theta \sin \phi d\theta d\phi dE^t,$$

$$M_{1111}^t = M_{3333}^t = \frac{q^2 \sqrt{2m^{t*}}}{\sigma_0^t 2\pi^3 \hbar^3} \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \left[\frac{\partial \tau^t}{\partial \varepsilon_{33}} \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \right. \right. \\ \left. \left. \pm \tau^t \frac{\partial^2 f_0}{\partial (E^t)^2} \frac{Bb}{2\bar{B}} (3 \cos^2 \theta - 1) (E^t)^{3/2} \right] \sin \theta d\theta d\phi dE^t \right. \\ \left. \pm \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \tau^t \frac{\partial f_0}{\partial E^t} \frac{Bb}{2\bar{B}} (3 \cos^2 \theta - 1) (E^t)^{1/2} \sin \theta d\theta d\phi dE^t \right\},$$

$$M_{1122}^t = -\frac{M_{1111}^t}{2}.$$

Коэффициенты эластосопrotivления m_{ijmn} , описывающие относительное изменение удельного сопротивления на единицу деформации, определяются выражением, аналогичным (1). В кубических кристаллах между ними существует следующая связь: $m_{ijmn} = -M_{ijmn}$.

Коэффициенты эластосопrotivления поликристаллического кремния ($\langle m_{ijmn} \rangle$) могут быть получены в результате усреднения коэффициентов эластосопrotivления монокристаллического кремния [11]:

$$\langle m_{ijmn} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} m'_{ijmn} d\omega \\ = - \left(\frac{\sigma_0^{(1)} - \sigma_0^{(2)}}{\sigma_0^{(1)} + \sigma_0^{(2)}} \right) \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} M'_{ijmn} d\omega.$$

Для наиболее распространенной текстуры $\langle 110 \rangle$ имеем

$$\langle M_{1111} \rangle = \frac{9}{16} m_{1111} + \frac{7}{16} m_{1122} + \frac{7}{8} m_{3232}, \\ \langle M_{1122} \rangle = \frac{3}{16} m_{1111} + \frac{13}{16} m_{1122} - \frac{3}{8} m_{3232}, \\ \langle M_{1133} \rangle = \frac{1}{4} m_{1111} + \frac{3}{4} m_{1122} - \frac{1}{2} m_{3232}.$$

3. Обсуждение результатов

Применение модели рассеяния носителей заряда на потенциальных барьерах возможно, если длина свободного пробега больше ширины потенциального барьера $2w + \delta$. Это накладывает ограничения на концентрацию примеси. Так, при подвижности дырок $20-30 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и плотности состояний на ловушках

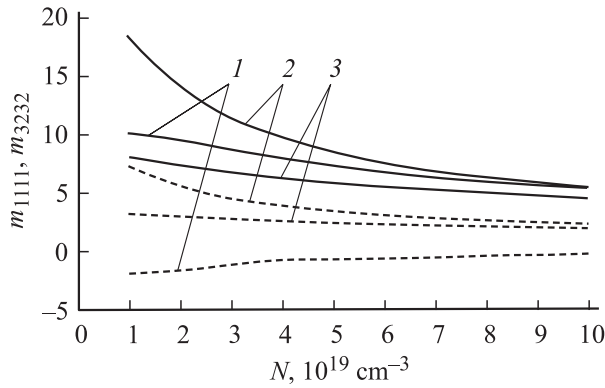


Рис. 2. Зависимости коэффициентов m_{1111} и m_{3232} от концентрации примеси N для монокристаллического *p*-Si. Штриховые кривые — m_{1111} , сплошные — m_{3232} . Расчеты выполнены при рассеянии: 1 — на потенциальных барьерах, 2 — на акустических колебаниях решетки, 3 — на ионах примеси.

$Q_t = 1.9 \cdot 10^{12} - 3.7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ концентрация легирующей примеси должна быть больше 10^{19} см^{-3} .

В поликристаллическом кремнии при концентрации примеси больше 10^{19} см^{-3} потенциал на границах кристаллитов имеет вид

$$U_0 = \begin{cases} V_b \left(1 + \frac{\delta - 2|z|}{2w}\right)^2, & \frac{\delta}{2} < |z| < \frac{\delta}{2} + w, \\ V_0, & |z| < \frac{\delta}{2}, \end{cases}$$

показанный на рис. 1 [16]. В поликремнии *p*-типа

$$V_b = \frac{q^2 N w^2}{2 \epsilon \epsilon_0}$$

и полуширина обедненной области w может быть оценена по формуле

$$w = \frac{Q_t}{2N},$$

где N — концентрация примеси, Q_t — плотность состояний на ловушках.

На рис. 2 представлены зависимости коэффициентов эластосопротивления m_{1111} и m_{3232} для монокристаллического кремния от концентрации примеси при 300 К, рассчитанные при рассеянии дырок на ионах примеси, акустических колебаниях решетки и потенциальных барьерах на границах зерен. При вычислениях коэффициентов эластосопротивления предполагалось, что отношение концентраций легких и тяжелых дырок определяется их эффективными массами и не зависит от деформации в линейном приближении. Величина U_0 вычислялась при значениях $\delta = 6 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $V_0 = 0.55 \text{ эВ}$, плотности состояний на ловушках $Q_t = 3.7 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$. Размер кристаллита $L = 0.12 \text{ мкм}$. Величины коэффициентов эластосопротивления m_{3232} , как видно из рис. 2, для всех механизмов рассеяния — одного порядка, но меньше экспериментальных [17]. Это связано с тем, что при вычислениях по приведенным формулам учитывается основной эффект, связанный с изменением

формы валентной зоны при нарушении симметрии. В то же время вклад в величину m_{3232} за счет изменения эффективных масс при деформации и несферичности валентной зоны составляет около 10–20 (за счет каждого из механизмов) [13].

Коэффициенты m_{1111} , представленные на рис. 2, для всех механизмов рассеяния, как и экспериментально наблюдаемые, значительно меньше m_{3232} . Однако экспериментальные величины m_{1111} в отличие от расчетных имеют сложные температурные зависимости и $m_{1111} \neq m_{1122}$. Это связано с тем, что приведенные формулы не учитывают изменение эффективных масс при деформации. Учет этого изменения приводит к слабо зависящим от температуры деформационным эффектам. Кроме того, вычисления проводились для одного механизма рассеяния, в то время как реально в рассеяние дают вклад несколько механизмов, а также легкие и тяжелые дырки дают различные вклады в электропроводность и пьезосопротивление [13].

Если вклад в величину m_{3232} за счет изменения эффективных масс и несферичности валентной зоны можно оценить в $(+20) - (+40)$, то оценить вклад „малых эффектов“ довольно сложно, учитывая еще и наличие нескольких механизмов рассеяния. При этом вклад „малых эффектов“ в m_{1111} и m_{1122} довольно значителен ($|m_{1111} + 2m_{1122}|$ может достигать 10).

На рис. 3, 4 приведены зависимости коэффициентов эластосопротивления $\langle m_{1111} \rangle$ и $\langle m_{1122} \rangle$ поликристаллического кремния от концентрации примеси для текстуры $\langle 110 \rangle$, вычисленные для рассматриваемых механизмов рассеяния, а также экспериментальные значения этих величин, вычисленные по результатам [5] и [3,12]. Из рисунков видно, что экспериментальные зависимости $\langle m_{1111} \rangle$ и $\langle m_{1122} \rangle$ не подобны. Это может быть связано только с тем, что эти коэффициенты определяются не только величинами m_{3232} , но и m_{1111} и m_{1122} для монокристаллического *p*-Si. Вычисления $\langle m_{1111} \rangle$ и $\langle m_{1122} \rangle$

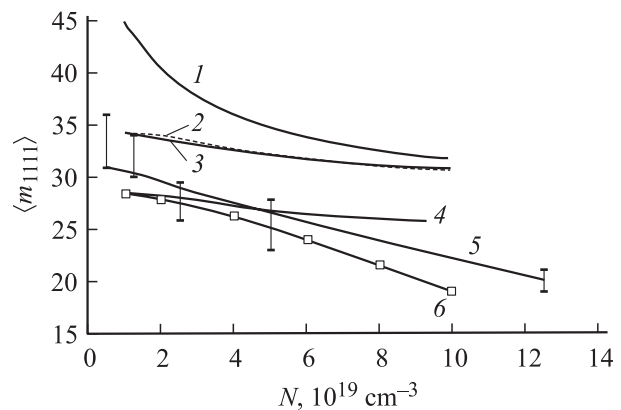


Рис. 3. Зависимости коэффициента $\langle m_{1111} \rangle$ от концентрации примеси N для поликремния *p*-типа. Расчеты выполнены при рассеянии: 1 — на акустических колебаниях решетки, 2 — на потенциальных барьерах, 3 — на ионах примеси. 4 — зависимость $\langle m_{1111} \rangle$ от N при скорректированных значениях m_{1111} и m_{3232} . Приведены экспериментальные результаты из работ: 5 — [5], 6 — [12].

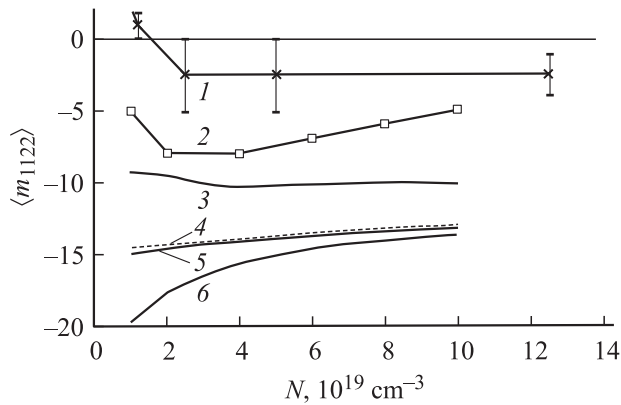


Рис. 4. Зависимости коэффициента $\langle m_{1122} \rangle$ от концентрации примеси N для поликремния p -типа. Экспериментальные результаты из работ: 1 — [5], 2 — [12]. 3 — результат расчета зависимости $\langle m_{1122} \rangle$ от N при скорректированных значениях m_{1111} и m_{3232} . Расчетные зависимости при рассеянии: 4 — на потенциальных барьерах, 5 — на ионах примеси, 6 — на акустических колебаниях решетки.

после увеличения m_{3232} на 30 и без коррекции m_{1111} и m_{1122} приводят к тому, что $\langle m_{1111} \rangle$ и $\langle m_{1122} \rangle$ больше экспериментальных по абсолютной величине. Большие значения этих коэффициентов могут быть связаны, например, с тем, что реальная форма межкристаллитного потенциального барьера отличается от приведенной на рис. 1, и также с тем, что не учитывались какие-то другие механизмы рассеяния. Например, рассеяние дырок из-за разориентации кристаллитов. Этот механизм рассеяния не зависит от концентрации примеси и должен приводить к уменьшению электропроводности и, возможно, к уменьшению коэффициента m_{3232} .

Из данных, приведенных в работе [12] и на рис. 3, видно, что с уменьшением концентрации примеси экспериментальная зависимость $\langle m_{1111} \rangle$ от N выходит на насыщение. Это можно объяснить тем, что при уменьшении концентрации примеси увеличивается рассеяние на потенциальных барьерах, а m_{3232} при рассеянии на потенциальных барьерах меньше этой величины при рассеянии на акустических колебаниях решетки.

Из рис. 4 видно, что экспериментальные величины $\langle m_{1122} \rangle$ при уменьшении концентрации примеси уменьшаются по абсолютной величине. Это связано с тем, что при уменьшении концентрации примеси возрастает рассеяние на потенциальных барьерах, а величина m_{1111} при таком рассеянии меньше 0. Однако для количественного согласования экспериментальных и расчетных коэффициентов эластосопротивления необходимо, чтобы m_{3232} было несколько меньше, а $|m_{1111}|$ было несколько больше, чем вычисленные значения. Так, при рассмотрении рассеяния на потенциальных барьерах уменьшение m_{3232} в 1.2 раза и увеличение $|m_{1111}|$ в 2.5 раза приводит к зависимостям $\langle m_{1111} \rangle$ и $\langle m_{1122} \rangle$ от концентрации примеси, удовлетворительно согласующимся с расчетными при концентрации примеси $10^{19} - 4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (рис. 3, 4). При концентрации

примеси, близкой к 10^{20} см^{-3} , потенциальные барьеры малы и величины коэффициентов эластосопротивления определяются другими механизмами рассеяния. Уменьшение m_{3232} в 1.2 раза и увеличение $|m_{1111}|$ с 2 до 5 при концентрации примеси 10^{19} см^{-3} вполне возможно из-за влияния рассеяния на разориентациях кристаллитов и учете „малых эффектов“.

4. Заключение

Таким образом, описан эффект пьезосопротивления в поликристаллическом кремнии p -типа при рассеянии дырок на межкристаллитных потенциальных барьерах. Количественное согласие между экспериментальными и расчетными коэффициентами эластосопротивления может наблюдаться при учете изменения эффективных масс при деформации, несферичности валентной зоны, „малых эффектов“, а также учете дополнительного (дополнительных) механизма рассеяния.

Список литературы

- [1] J. Suski, V. Mosser, J. Goss. *Sens. Actuators*, **17**, 405 (1989).
- [2] J. Suski, V. Mosser, G. Le Roux. *Proc. Electrochem. Soc. Conf.* (San Diego, CA, USA, Oct. 1986). p. 331.
- [3] E. Obermeir. Ph. D. Thesis (University of Munich, 1983).
- [4] P.H. French, A.G.R. Evans. *Sensors Actuators*, **7**, 135 (1985).
- [5] D. Schubert, W. Jenschke, T. Uhlig, F.M. Schmidt. *Sensors Actuators*, **11**, 145 (1987).
- [6] V.A. Gridchin, V.M. Lubimsky, M.P. Sarina. *Sensors Actuators*, **A49**, 67 (1995).
- [7] P.H. French, A.G.R. Evans. *Electron. Lett.*, **24**, 999 (1984).
- [8] T. Toriyama, Y. Yokoyama, S. Sugiyama. *Sensors Materials*, **12**, 473 (2000).
- [9] P.H. French, A.G.R. Evans. *Sol. St. Electron.*, **32**, 1 (1989).
- [10] M. Le Berre, M. Lemitte, D. Barbier, P. Pinard, J. Cali, E. Bustarret, J. Sicart, J.L. Robert. *Sensors Actuators*, **A46-47**, 166 (1995).
- [11] В.А. Гридчин, В.М. Любимский. *Микроэлектроника*, **32**, 261 (2003).
- [12] V. Mosser, J. Suski, J. Goss, E. Obermeir. *Sensors Actuators*, **A28**, 113 (1991).
- [13] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [14] Г.Е. Пикус, Г.Л. Бир. *ФТТ*, **1**, 1828 (1959).
- [15] В.А. Гридчин, В.М. Любимский, А.Г. Моисеев. *ФТП* (в печати).
- [16] N.C.C. Lu, C.Y. Gerberg, C.Y. Lu, J.D. Meidl. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-28**, 818 (1981).
- [17] M. Granveaud, P. Malsan. *Onde Electron.*, **47**, 392 (1967).

Редактор Т.А. Полянская

Piezoresistance in films of polycrystalline silicon of *p*-type

V.A. Gridchin, V.M. Lubimsky

Novosibirsk State Technical University,
630092 Novosibirsk, Russia

Abstract The piezoresistance effect in polycrystalline silicon of *p*-type is described at scattering holes on potential barriers of grain boundary. The sizes of coefficients of the elastoresistance of this type of scattering are close to those of coefficients at scattering on ions of an impurity as well as on acoustic phonons. The divergence between experimental and calculated coefficients of the elastoresistance can be probably eliminated by the account of the change of the effective mass under deformation, alongside with „small effects“, of additional mechanisms of scattering.