

УДК 537.311.3
PACS number(s): 71.55.gs

ВПЛИВ ПРОСТОРОВОЇ НЕГОМОГЕННОСТІ ЗРАЗКІВ НА ТОЧНІСТЬ ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ МЕТОДОМ СТРУМІВ, ОБМЕЖЕНИХ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ

М. Колесник, А. Опанасюк

*Сумський державний університет
кафедра загальної та експериментальної фізики
вул. Р.-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна
e-mail: maxxkol@yahoo.com*

Досліджено вплив неоднорідності просторового розподілу пасток у матеріалі та присутності міжфазних локалізованих станів на вигляд вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом. Розглянуто випадок, коли енергетичний розподіл пасток описують експоненціальною або гаусовою функцією, в той час як просторовий розподіл має максимум густини на одному з електродів. Показано, що неоднорідність розподілу пасток за товщиною зразка спричиняє суттєву зміну напруги повного заповнення пасток та великих похибок у визначенні концентрації локалізованих станів. Водночас глибину залягання пасток визначають з відносно невеликою похибкою. Розраховані корегуючі коефіцієнти, що дають змогу врахувати вплив просторового розподілу пасток на параметри глибоких пасток. Результати досліджень свідчать про необхідність врахування неоднорідності зразків для встановлення характеристик локалізованих станів.

Ключові слова: струми, обмежені просторовим зарядом, просторова неоднорідність зразків, глибокі пастки.

Електричні властивості ізолюючих і напівізолюючих матеріалів значною мірою визначаються наявністю глибоких пасток, здатних захоплювати вільні носії заряду. Дослідження локалізованих станів (ЛС) у забороненій зоні (ЗЗ) цих речовин є актуальним науковим завданням, оскільки вони зумовлюють такі важливі параметри матеріалу, як час життя носіїв заряду, їх довжину вільного пробігу та інше, а отже, і експлуатаційні характеристики напівпровідникових приладів, створених на їх основі.

Для дослідження ЛС у високоомних матеріалах в наш час широко використовують метод, створений на аналізі вольтамперних характеристик (ВАХ) у режимі струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ), [1–2]. При цьому інформацію щодо параметрів глибоких пасток одержують шляхом порівняння експериментальних ВАХ СОПЗ з кривими, розрахованими теоретично через припущення, що у напівпровіднику наявні деякі модельні розподіли ЛС.

Інтерпретуючи ВАХ СОПЗ, також вважається, що вивчені зразки є просторово однорідними [3]. Це припущення є придатним у випадку монокристалічних об'ємних матеріалів, але не може бути використане для полікристалічних чи аморфних плівок, одержаних вакуумною конденсацією або іншими методами. У цьому випадку біля підкладки формується перехідний шар з підвищеною кількістю дефектів, які можуть бути пастками. Просторову неоднорідність зразків також спричинюють операції, пов'язані з їх післяростовою обробкою, як наприклад, відпал, травлення та ін. Нарешті, додаткові ЛС обов'язково виникають на міжфазних поверхнях напівпровідник–метал або напівпровідник–напівпровідник. Оскільки вимірювання параметрів пасток у напівізольюючих матеріалах звичайно проводять у багатошарових структурах нехтування цими станами є фізично неприпустимим. Отож, зазвичай, напівпровідникові зразки, що досліджуються, є просторово неоднорідними. Це може суттєво змінити вигляд кривих струм–напруга і зумовити неправильне у визначення параметрів ЛС з ВАХ СОПЗ.

З огляду на це у статті проаналізовано вплив неоднорідності просторового розподілу пасток на вигляд ВАХ СОПЗ та надійність визначення параметрів пасток з них.

Загалом ВАХ може бути одержана шляхом сумісного розв'язання рівняння безперервності струму та рівняння Пуассона [3].

$$j = e\mu E(x)n_f(x), \quad (1)$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = \frac{e \left[(n_f(x) - n_0) + \sum_j (n_{t_j}(x) - n_{t_{j0}}) \right]}{\varepsilon\varepsilon_0} = \frac{en_s(x)}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (2)$$

де j – густина струму, що протікає крізь зразок; e – заряд електрона; μ – рухливість носіїв заряду у матеріалі; $E(x)$ – напруженість електричного поля, що змінюється за товщиною зразка від інжектуючого носії катода ($x=0$) до колектуючого носії анода ($x=L$); $n_f(x)$ – концентрація вільних носіїв заряду під час інжекції; n_0 – рівноважна концентрація носіїв; $n_{t_j}(x)$ – фактична концентрація носіїв, що захоплені пастками j -ї групи з енергією залягання E_{t_j} ; $n_{t_{j0}}$ – рівноважна концентрація носіїв, що захоплені пастками j -ї групи; $n_s(x)$ – повна концентрація інжекттованих носіїв у матеріалі; ε – діелектрична проникність матеріалу; ε_0 – діелектрична стала.

У співвідношенні (2) всіма доданками окрім тих, що містять n_t знехтувано, що виправдано в режимі СОПЗ, тоді $n_s(x) \sim \sum_j n_{t_j}(x)$.

Для розв'язання системи (1) і (2) важливо знати зв'язок між n_f та n_t . Припустімо, що всі стани у матеріалі знаходяться в термодинамічній рівновазі з відповідними вільними зонами, тоді їх заповнення носіями заряду визначають положенням квазірівня Фермі E_F . З використанням статистики Больцмана для вільних носіїв і Фермі–Дірака для локалізованих можна записати

$$n_f(x) = N_{C(V)} \exp\left(-\frac{E_F(x)}{kT}\right), \quad (3)$$

$$n_i(E, x) = \frac{h(E, x)}{1 + g \exp \frac{E - E_F(x)}{kT}}, \quad (4)$$

де $N_{C(V)}$ – ефективна густина вільних станів у зоні провідності (валентній зоні) матеріалу; $E_F(x)$ – положення квазірівня Фермі при інжекції; k – стала Больцмана; T – температура; $h(E, x) = dN_i/dE$ – функція, що описує розподіл густини ЛС за енергією та координатою; g – фактор спінового виродження рівня ЛС, який залежить від зарядового стану пасток і набуває значень 1/2, 1 або 2 (зазвичай, вважається що $g = 1$).

Відлік енергії залягання пасток в ЗЗ будемо проводити від краю зони провідності або валентної зони залежно від типу (n чи p) матеріалу, що досліджується.

Вважатимемо також, що функцію, яка описує розподіл пасток, можна розбити на дві частини, що залежать лише від енергії та просторової координати $h(E, x) = h(E) \cdot S(x)$. У цьому випадку задача розрахунку ВАХ СОПЗ має бути розв'язана, як для випадку моноенергетичних пасток, так і пасток, розподілених за енергією [4].

З урахуванням неоднорідності напівпровідника за об'ємом у випадку експоненціальних енергетичних розподілів або на "хвостах" розподілів іншого вигляду можна отримати такі співвідношення для розрахунку кривих струм–напруга [5]

$$j = e\mu n_f^{inh}(L) \frac{\alpha U}{L} \frac{L}{L_{ef}} \langle S \rangle^\beta = e\mu n_f^{inh}(L) \frac{\alpha U}{L} \delta_1, \quad (5)$$

$$n_s^{inh}(L) = \frac{\alpha\beta\epsilon\epsilon_0 U}{eL^2} \left(\frac{L}{L_{ef}} \right)^2 \langle S \rangle^{\beta-1} = \frac{\alpha\beta\epsilon\epsilon_0 U}{eL^2} \delta_2, \quad (6)$$

де $n_f^{inh}(L)$ – концентрація вільних носіїв на аноді у випадку неоднорідного матеріалу; $n_s^{inh}(L)$ – повна концентрація вільних носіїв на аноді;

$\langle S \rangle = \int_0^L S(x) dx / L_{ef}$ – усереднене за товщиною шару значення функції

просторового розподілу, U – зовнішня напруга; L – товщина зразка; L_{ef} – ефективна товщина зразка; α – коефіцієнт, що враховує відмінність напруженості електричного поля поблизу анода від її середнього значення в щілині між електродами; β – коефіцієнт, що враховує відмінність $n_s^{inh}(L)$ поблизу анода від середнього значення в щілині між електродами; δ_1 та δ_2 – корегуючі коефіцієнти.

Виявляється, що напівпровідник з неоднорідним просторовим розподілом пасток $S(x)$ є еквівалентним матеріалу з однорідним розподілом ЛС за умови, що справжня товщина зразка замінена деякою ефективною [4].

Ефективну товщину для напівпровідника з пастками, розподіленими за енергією визначають так:

$$L_{ef} = \left[\alpha \int_0^L \left(\int_0^t S(x) dx \right)^\beta dt \right]^{1/\alpha}. \quad (7)$$

Легко показати, що у випадку просторово гомогенних матеріалів, коли $S(x)=\text{const}=1$, їх ефективна товщина збігається з дійсною.

Як правило, при розрахунках ВАХ коефіцієнти α та β у співвідношеннях (5) та (6) приймають сталими [6], але більш точна теорія [7] свідчить, що вони є функціями струму та напруги $\alpha=2-\gamma$, $\beta=1-\gamma$, де $\gamma = d \ln U / d \ln j$ – нахил ВАХ у подвійних логарифмічних координатах. Оскільки похідна γ у режимі СОПЗ під час збільшення напруги зміщення U , прикладеної до зразка, змінюється від 0,5 до 0, легко побачити, що ці параметри на квадратичній ділянці ВАХ набувають значень $\alpha=1,5$, $\beta=0,5$, водночас як у матеріалі з повністю заповненими пастками $\alpha \rightarrow 2$, $\beta \rightarrow 1$.

Оскільки співвідношення (5) та (6) відрізняються від аналогічних, одержаних в припущенні просторової однорідності матеріалу [3], присутністю корегуючих коефіцієнтів δ_1 та δ_2 , завдання врахування впливу неоднорідності розподілу концентрації ЛС за товщиною зразків полягає у визначенні цих параметрів залежно від вигляду функції $S(x)$.

Ми розраховували ВАХ СОПЗ та корегуючі коефіцієнти δ_1 , δ_2 для найреалістичніших енергетичних та просторових розподілів пасток у напівпровідниках. Розглянуто випадки, коли енергетичний розподіл ЛС у ЗЗ матеріалу описують експоненціальною або гаусовою функцією, оскільки саме такі розподіли, як правило, простежені у полікристалічних та аморфних матеріалах одержаних різними методами [2–3]. Водночас просторовий розподіл пасток був заданий експоненціальною функцією з максимумом густини на інжектуєчому (катоді) $S(x) = S_0 + S_1 \exp(-x/r)$ або колектуєчому (аноді) $S(x) = S_0 + S_1 \exp((x-L)/r)$ електродах, де S_0 – вклад об'ємних, а S_1 – міжфазних станів на катоді або аноді, відповідно; r – параметр просторового розподілу поверхневих станів. При розрахунках ми нормували функцію $S(x)$ на одиницю $S(x) = S_0 + S_1 = 1$. Такий опис просторового розподілу пасток дає змогу розглянути весь спектр можливих ситуацій. Справді, у випадку, якщо $L \ll r$, глибокі пастки майже однорідно розподілені за товщиною матеріалу, тому він може вважатися однорідним. Якщо $L \gg r$, маємо ЛС, розташовані безпосередньо на поверхні напівпровідника.

Відповідні розподіли пасток для різних співвідношень L/r наведено на рис. 1.

Моделювання проводилося для двох крайніх випадків $\alpha=1,5$, $\beta=0,5$ та $\alpha=2$, $\beta=1$, що відповідає зміні кута нахилу ВАХ СОПЗ $0,5 \leq \gamma \leq 0$. Це дало змогу охопити увесь спектр можливих енергетичних розподілів пасток у напівпровідниках – від моноенергетичних до однорідних. При моделюванні були використані значення параметрів глибоких станів і фізичні константи, які характерні для типових напівпровідників (*Si*, *GaAs*, *CdTe*). Водночас для вибраних енергетичних та просторових розподілів пасток за допомогою співвідношень (3)–(7) розраховували розрахунок ВАХ СОПЗ. При моделюванні брали до уваги зміну нахилу кривих струм–напруга у подвійних логарифмічних координатах і, відповідно, коефіцієнтів α та β в процесі заповнення пасток, розподілених за енергією. Для цього використовували таке співвідношення $d(\ln n_s(x))/d(-(E_F(x)/kT)) = \gamma/(1-\gamma)$ [8].

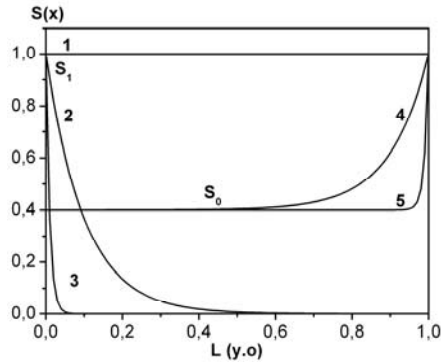


Рис. 1. Просторовий розподіл пасток з наявністю об'ємних (S_0) та міжфазних станів (S_1) на катоді (2, 3) або аноді (4, 5). Показано випадки: 1 – $L/r \rightarrow 0$ – матеріал є однорідним; 2 – $L/r = 10$; 3 – $L/r = 100$ – міжфазні стани, наявні лише на поверхні зразка: $S_0 = 0$ – об'ємні пастки відсутні; 4 – $L/r = 10$; $L/r = 100$ – міжфазні стани наявні тільки на поверхні зразка: $S_0 = 0,4$

Типові ВАХ СОПЗ, отримані для зразків з неоднорідним та однорідним розподілом пасток, показані на рис. 2.

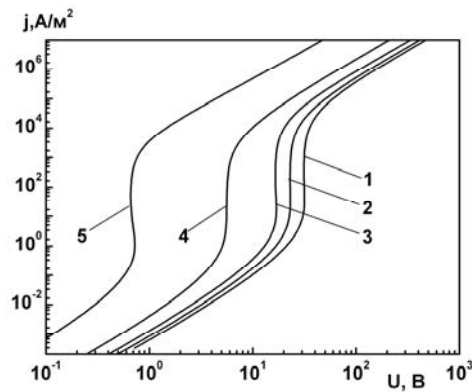


Рис. 2. Вольтамперні характеристики, розраховані для однорідних та неоднорідних за товщиною зразків: 1 – однорідний розподіл; максимум концентрації міжфазних станів на катоді (2 – $L/r = 1$, 4 – $L/r = 10$); на аноді (3 – $L/r = 1$, 5 – $L/r = 10$). Показано розрахунки для випадку $S_1/S_0 = 1000$. Енергетичний розподіл пасток описується функцією Гауса $h(E) = N_t / \sigma(2\pi)^{1/2} \cdot \exp\left(-\frac{(E - E_t)^2}{2\sigma^2}\right)$, де $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$, $E_t = -0,57 \text{ eV}$, $\sigma = 0,025 \text{ eV}$, $T = 300 \text{ K}$

Визначено, що неоднорідність розподілу пасток за товщиною зразка спричинює суттєву зміну напруги повного заповнення пасток U_{TFL} і, відповідно, похибок у визначенні справжньої концентрації ЛС, оскільки $N_t \sim U_{TFL}$. Ці похибки зростають у випадку, коли максимум просторового розподілу пасток знаходиться поблизу анода. На величину стрибка струму на ВАХ СОПЗ (глибину залягання

пасток) просторовий градієнт густини ЛС впливає слабо. Відповідно глибина залягання пасток визначають з невеликою похибкою.

Про більш повний вплив неоднорідності матеріалу на надійність визначення параметрів пасток свідчать результати розрахунку коефіцієнтів δ_1 та δ_2 , показані на рис. 3, 4.

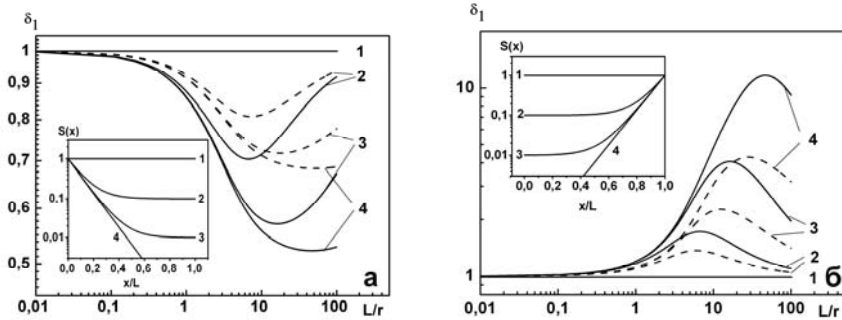


Рис. 3. Коефіцієнт δ_1 , розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і поверхневих станів. Максимум концентрації міжфазних станів на катоді (а) та аноді (б): 1 – $S_1/S_0=0$; 2 – $S_1/S_0 = 10$; 3 – $S_1/S_0 = 100$; 4 – $S_1/S_0 = 1000$. Штрихові лінії $\alpha=1,5$, $\beta=0,5$; суцільні лінії $\alpha=2$, $\beta=1$. На вставці наведені просторові розподіли, для яких проведені розрахунки ($L/r=10$)

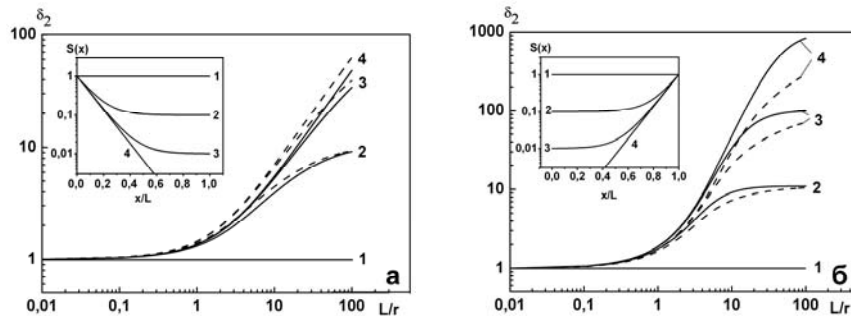


Рис. 4. Коефіцієнт δ_2 розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і поверхневих станів. Максимум концентрації міжфазних станів на катоді (а) та аноді (б): 1 – $S_1/S_0=0$; 2 – $S_1/S_0 = 10$; 3 – $S_1/S_0 = 100$; 4 – $S_1/S_0 = 1000$. Штрихові лінії $\alpha=1,5$, $\beta=0,5$; суцільні лінії $\alpha=2$, $\beta=1$. На вставці наведені просторові розподіли, для яких проведено розрахунки ($L/r=10$)

Коефіцієнт δ_1 дає змогу знайти похибку визначення глибини залягання ЛС $\Delta E = E_F^{inh} - E_F^h = kT \ln \delta_1$. Як видно з рис. 3, якщо просторовий розподіл пасток не враховувати, виникає систематичне зміщення енергетичного положення пасток. За кімнатної температури і $S_1/S_0=10^3$ це зміщення може сягати 0,01–0,015 еВ у випадку, якщо максимум концентрації міжфазних станів знаходиться на катоді, та 0,04–0,06 еВ, коли цей максимум знаходиться на аноді. Відповідно енергія залягання енергетичного рівня може бути дещо завищеною або заниженою. Похибки вимірювання E_i суттєво знижуються у разі зменшення відношення S_1/S_0 та температури дослідження ВАХ.

Відповідно, у низькотемпературному наближенні, коли функція Фермі–Дірака може бути замінена на функцію Хевісайда, коефіцієнт δ_2 дає відношення точного значення повної концентрації пасток на аноді до теоретично визначеної без урахування можливої неоднорідності досліджуваних зразків – $h^{inh}(L)/h^h(L) \sim n_s^{inh}(L)/n_s^h(L) = \delta_2$. Це відношення може сягати 10^2 – 10^3 (рис. 4). Вплив просторової неоднорідності є більш суттєвим, коли максимум концентрації міжфазних станів знаходиться на аноді.

Отже, унаслідок моделювання встановлено, що просторова неоднорідність матеріалу може зумовлювати асиметрію ВАХ навіть у випадку дослідження симетричних структур метал–напівпровідник–метал. При цьому виникають суттєві похибки визначення параметрів ІС методом ВАХ СОПЗ. Розрахунки корегуючих коефіцієнтів δ_1 та δ_2 , що враховують неоднорідність матеріалу, свідчать, що максимальна похибка визначення енергії пасток E_t при ігноруванні факту розподілу пасток за товщиною зразка не перевищує 15%, водночас як похибка у визначенні концентрації ІС N_t може сягати 1–3 порядки за величиною. Отже, ігнорування можливою неоднорідністю матеріалу може призвести до неправильної інтерпретації експериментальних даних, отриманих зазначеним методом.

Результати проведених досліджень свідчать, що для коректного встановлення параметрів ІС у напівпровідниках обов'язково необхідно враховувати можливу негомогенність зразків, що досліджуються.

-
1. *Madatov R.S., Tagiyev T.B., Gabulov I.A.* et al. Injection currents in lamellar crystals of gallium telluride // *Semiconductor physics. Quantum electronics. Optoelectronics.* 2003. Vol. 6. N 3. P. 278–281.
 2. *Kalita P.K., Sarma B.K., Das H.L.* Space charge limited conduction in CdSe thin films // *Bull. Mater. Sci.* 2003. Vol. 26. N 6. P. 613–617.
 3. *Ламперт М., Марк П.* Инжекционные токи в твердых телах. М.: Мир, 1973. 222 с.
 4. *Као К., Хуанг В.* Перенос электронов в твердых телах. М.: Мир, 1984. 352 с.
 5. *Sworacowsky J. A., Nespurec S.* Determining local state densities in spatially inhomogeneous samples from steady state space-charge-limited currents // *IEEE Trans. Electr. Ins.* 1989. Vol. 24. № 2. P. 223–227.
 6. *Manfredotti C., de Blasi C., Galassini S* et al. Analysis of SCLC curves by a new direct method // *Phys. Status Solidi (A).* 1976. Vol. 36. N 2. P. 569–577.
 7. *Stokman F.* On the dependence of photocurrents on the excitation strength // *Phys. Status Solidi (A).* 1969. Vol. 34. P.741–749.
 8. *Nespurec S., Sworacowsky J.* A differential method of analysis of steady-state-space-limited current-voltage characteristics // *Phys. Status Solidi (A).* 1977. Vol. 41. N 2. P. 619–627.

**THE INFLUENCE OF SPATIAL INHOMOGENEITY OF SAMPLES ON
PRECISION ESTIMATION OF LOCAL STATES PARAMETERS USING
METHOD OF SPACE CHARGE LIMITED CURRENTS**

M. Kolesnik, A. Opanasyuk

*Sumy state university
department of general and experimental physics
R-Korsakov street, 2, UA-40007 Sumy, Ukraine
e-mail: maxxkol@yahoo.com*

In this paper was investigated the influence of inhomogeneous spatial distribution of traps in a material and presence of interphase local states on I-V characteristics of the space charge limited currents. Was examined the case, when energy distribution of traps was described by exponential or Gaus's function and, at the same time, spatial distribution has maximal thickness on the one of electrodes. It is found out that heterogeneity of the traps distribution with the thickness of the model results in substantial change of complete filling traps voltage and errors in determination of the actual local states concentration accordingly. At the same time depth of traps distribution can be estimated with comparatively small errors. Coefficients of correction, calculated earlier, let discount influence of the spatial traps distribution on parameters of deep traps. Results of the investigations assert the necessity of taking into consideration inhomogeneity of samples for correct estimation of local states.

Key words: space charge limited currents, spatial heterogeneity of examples, deep traps.

Стаття надійшла до редколегії 17.05.2006

Прийнята до друку 09.06.2008