

**ОСОБЕННОСТИ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА  
МЕЖКРИСТАЛЛИТНЫМИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ БАРЬЕРАМИ,  
ОБРАЗОВАННЫМИ ЭЛЕКТРОНЫМИ ПОВЕРХНОСТНЫМИ  
СОСТОЯНИЯМИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

**Ш.Б. Атакулов, С.М. Зайнолобидинова, С.М. Отажонов, О.А. Тухтаматов**

*Ферганский Государственный университет*

*Узбекистан*

Поступила в редакцию 03.11.2010

В модели, предполагающей захват электронов проводимости, на поверхностные состояния границ зерен в поликристаллах полупроводников, рассчитана прозрачность потенциального барьера. Задача решена для случаев невырожденной и вырожденной статистики электронов.

**Ключевые слова:** поликристалл, граница зерен, поверхностные состояния, туннелирование, термоактивация, прозрачность потенциального барьера.

У моделі, яка припускає захоплення електронів провідності, на поверхневій стани границь зерен у полікристалах напівпровідників, розрахована прозорість потенційного бар'єра. Задача вирішена для випадків невиродженої та виродженої статистики електронів.

**Ключові слова:** полікристал, границя зерен, поверхневі стани, тунелювання, термоактивація, прозорість потенційного бар'єру.

In the model suggested capture conductivity electrons on grain boundaries surface states in polycrystals of the semiconductors calculated potential barrier penetrability. The problem is solved for no degenerated and degenerated cases of the electrons statistic.

**Keywords:** polycrystal, grain boundary, surface states, tunneling, thermo activation, penetrability of potential barrier.

## **ВВЕДЕНИЕ**

До сих пор физические механизмы, ответственные за механические, электрические, оптические и другие свойства твердых тел, имеющих поликристаллическую структуру, не установлены вполне определенно. Проблема состоит в сложности идентификации природы границ зерен (ГЗ) и их реальной структуры [1], хотя, например, уже давно известно, что такие явления как охрупчивание конструкционных материалов и их механическая прочность, рекристаллизационные процессы, пики внутреннего трения и затухания ультразвука в поликристаллах обусловлены свойствами ГЗ [2 – 5]. Здесь можно указать на оптическую анизотропию металлических пленок [6] и поликристаллических пленок полупроводников [7], которые, по-видимому, также связаны со структурными особенностями ГЗ.

Большинство твердых кристаллических тел имеют поликристаллическую структуру. Для них существенное значение имеет оценка вклада ГЗ в общее электрическое сопротивление (и в явления электронного переноса во-

обще). Вычисление сопротивления, обусловленного плоскостными дефектами, наталкивается на значительные трудности как при постановке задачи о рассеянии носителей, так и при поиске методов математического моделирования [8]. Об интересе к проблеме свидетельствует не так давно решенная задача о прохождении тока через границу раздела кристаллитов в металле для случая, когда направление тока перпендикулярно плоской границе [9].

Для поликристаллов полупроводников такая задача имеет свои особенности, связанные, например, с локализацией избыточного заряда на плоских границах раздела. Сильные электрические поля в областях пространственного заряда и их ощутимые геометрические размеры не позволяют применять приближение слабого поля, как это предложено в [9].

Многие задачи теории полупроводников, связанные с прыжковой проводимостью по примесям в неупорядоченных (аморфных) полупроводниках [10, 11], проводимостью

органических полупроводников [12], керамических поликристаллов [11] и поликристаллических пленок [13, 14], сталкиваются с проблемой перехода электронов через потенциальный барьер. Такой переход обычно осуществляется либо посредством туннельного эффекта, либо тепловой активацией на высоту потенциального барьера  $\phi_0$ , либо оба механизма проявляются одновременно – электрон забрасывается на некоторый энергетический уровень  $E < \phi_0$ , с которого туннелирует через барьер [14, 15]. В конечном счете вероятности перехода и отражения от барьера определяет его прозрачность  $D$ , которая и задает особенности электронного переноса в неоднородных полупроводниках.

В [15] прозрачность барьера рассмотрена для идеализированных барьеров – прямоугольного, треугольного и трапециидального – без конкретизации природы барьера. Анализ показывает, что использование таких геометрических моделей для расчета прозрачности потенциальных барьеров, приводит к существенным расхождениям при их приложении к экспериментальным данным. В [12] задача решалась для барьера, образованного электронными поверхностными состояниями (ПС), локализованными на ГЗ полупроводниковых поликристаллических пленок, причем, там был рассмотрен случай вырождения электронного газа в материале пленок. Полученные результаты позволили удовлетворительно описать экспериментальные закономерности в поведении кинетических коэффициентов в блочных и поликристаллических пленках халькогенидов свинца.

Самостоятельный интерес представляет проблема идентификации природы ПС на ГЗ. Причинами образования ПС может быть деформационный потенциал, возникающий вблизи дислокаций, или разорванные связи самих дислокаций [13], примеси, локализованные на ГЗ [14], одномерные или двумерные неровности поверхности зерен в местах их соприкосновения, так называемые “шероховатости” (в роли неровностей могут проявляться дислокации несоответствия) [16].

Цель настоящей работы установить прозрачность барьера, образованного ПС на ГЗ полупроводниковых поликристаллов, при

произвольной статистике электронов в зависимости от температуры, параметров барьера и материала зерен.

## МОДЕЛЬ

Рассмотрим плоскую ГЗ и выберем направление  $x$ , перпендикулярное ей  $x=0$  соответствует плоскости ГЗ. Пусть материал зерен легирован мелкой донорной примесью до концентрации  $N_d$ , которая полностью ионизирована, т.е. концентрация электронов в зернах  $n = N_d$ . На ГЗ имеются электронные ПС концентрации  $N_s$ ; энергетический уровень ПС  $E_s$  расположен в запрещенной зоне. Отсчет энергии будем вести от дна зоны проводимости ( $E_c = 0$ ), тогда  $E_s < 0$ ,  $E > 0$  ( $E$  – энергия электрона в зоне). Нас будет интересовать случай, когда электроны переносятся в направлении  $x$ .

Если материал пленки легирован так, что уровень Ферми  $E_F > E_s$ , ПС захватывают электроны проводимости и на ГЗ образуются потенциальные барьеры. Здесь необходимо различать два крайних случая: отсутствие вырождения электронного газа (больцмановская статистика) и полное вырождение электронного газа (статистика Ферми-Дирака). Они существенно сказываются на распределении потенциала вблизи ГЗ.

В отсутствие вырождения высота потенциального барьера задается решением уравнения Пуассона и имеет вид [15]

$$\phi(x) = \frac{e^2 N_d}{2\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{l}{2} - x \right)^2, \quad (1)$$

где  $\epsilon\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость материала зерен;  $l = gfN_s/N_d$  – толщина барьера (радиус экранирования избыточного заряда на ПС);  $g$  – фактор вырождения уровня ПС ( $g = 2$ );  $f$  – функция заполнения ПС электронами:

$$f = \left[ 1 + \exp\left( \frac{\phi(0) - E_F + E_s}{kT} \right) \right]^{-1}; \quad (2)$$

Когда  $\phi(0) + E_s < E_F$ ,  $f = 1$ ,  $\phi(0) = e^2 g^2 N_s^2 / 8\epsilon\epsilon_0 N_d$ . При этом

$$N_s < \sqrt{\frac{8\epsilon\epsilon_0 N_d (E_F - E_s)}{e^2 g^2}} = N_s^* \quad (3)$$

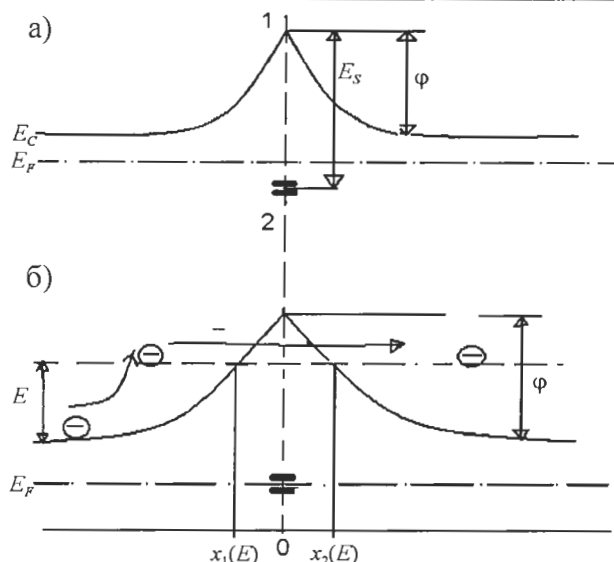


Рис. 1. Изгиб зоны проводимости в пленках на ГЗ при выполнении – а) и нарушении – б) условия (3). (невыврожденная статистика). 1 – ГЗ; 2 – ПС. Стрелками показан процесс перехода электрона через барьер.

и барьер имеет вид как на рис.1а. Когда условие (3) нарушается, φ(0) необходимо искать совместным разрешением уравнений (1) и (2). В первом приближении это решение имеет вид

$$\varphi(0) \approx E_f - E_s + kT \ln \left( \frac{N_s}{N_s^*} - 1 \right), \quad (4)$$

что соответствует рис. 1б. Если концентрации ПС велики, реализуется именно такая ситуация (рис. 1).

При вырождении электронного газа уравнение Пуассона для распределения потенциала φ(x) вблизи границы переходит в уравнение Томаса-Ферми.

Изгиб зоны проводимости, из-за захвата электронов на ПС, изображен на рис. 2. Концентрация ПС предполагается столь большой, что они заполняются до “завязывания” (пининга) энергии ПС с уровнем Ферми. Тогда с точностью до kT

$$\varphi_0 = E_f - E_s. \quad (5)$$

Ход потенциала на границе подчиняется уравнению

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \rho(x),$$

$$\rho(x) = N_d - n_s \delta(x) - \frac{\{2m_{dn}[E_f - \varphi(x)]\}^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} U[E_f - \varphi(x)]. \quad (6)$$

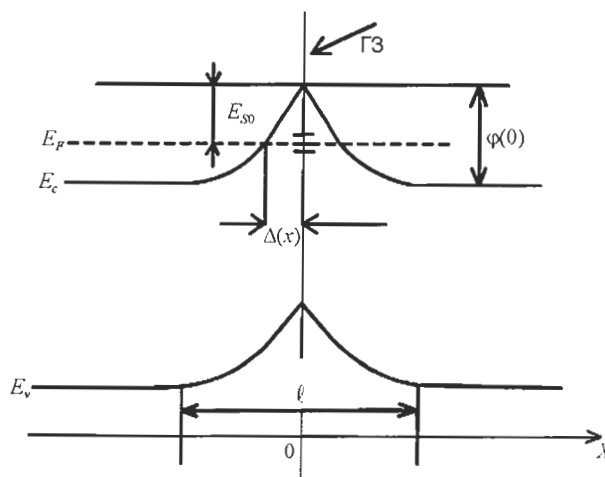


Рис. 2. Потенциальный барьер на ГЗ при вырождении электронного газа.

Здесь  $n_s = f \cdot N_s$  число электронов на ПС;  $m_{dn}$  – эффективная масса плотности состояний в зоне проводимости;  $\delta(x)$  – дельта-функция Дирака;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $U(\xi)$  –

импульсная функция  $U(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi \geq 0 \\ 0, & \xi < 0. \end{cases}$

Граничные условия к (6):  $\varphi(x) = 0$  и  $d\varphi(x)/dx = 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Выражая  $E_f$  через  $N_d$

$$E_f = \frac{(2\pi^2)^{2/3} \hbar^2 N_d^{2/3}}{2m_{dn}}, \quad (7)$$

(6) приводим виду

$$\rho(x) = \frac{3}{2} N_d \frac{\varphi(x)}{E_f} \Omega(x) - n_s \delta(x), \quad (8)$$

$$\Omega(x) = \frac{2}{3} \frac{E_f}{\varphi(x)} \left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{\varphi(x)}{E_f} \right]^{3/2} U[E_f - \varphi(x)] \right\}. \quad (9)$$

Функция Ω(x) легко оценивается во всем пространстве своего задания (−∞, ∞). Учитывая граничное условие φ(x) = 0 при  $x \rightarrow \pm\infty$  и применяя правило Лопиталья, находим

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Omega(x) = \lim_{\varphi(x) \rightarrow 0} \Omega(x) = 1.$$

В точке, где  $\varphi(x) = E_f$ , Ω(x) = 2/3 и, наконец Ω(0) = (2/3)E\_f/φ(0). Для ситуации на рис. 2 φ(0) = E\_f + |E\_s|, поэтому

$$\Omega(0) = (2/3)E_f / (E_f + |E_s|).$$

В рассматриваемой здесь задаче нас интересует случай достаточно сильного вырождения электронного газа, т.е.  $E_f \gg |E_s|$ . Тогда в рамках рассматриваемой задачи Ω(x) можно считать медленно меняющейся функцией

порядка единицы на всей числовой оси. Более того на отрезке  $E_F \leq \varphi(x) \leq E_F + |E_S| \Omega(x)$  вообще можно с большей точностью положить равной 2/3, а учитывая, что именно этот отрезок значений  $\varphi(x)$  определяет явления переноса, можно считать

$$\rho(x) = N_d \frac{\varphi(x)}{E_F} - n_s \delta(x). \quad (10)$$

Решение (6) – (9) с точностью до численного множителя порядка единицы

$$\varphi(x) \approx \frac{e^2 n_s}{2 \epsilon \epsilon_0} l_s \exp\left(-\frac{|x|}{l_s}\right); \quad (11)$$

в точке  $x = 0$ ,  $\varphi(0) = E_F + |E_S|$ , поэтому эффективная полутолщина барьера  $l_s$  определяется соотношением

$$l_s = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 (E_F + |E_S|)}{e^2 N_d}}, \quad (12)$$

следующим из условия электронейтральности в области барьера:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = N_d \int_0^{\infty} \frac{e^2 n_s}{\epsilon \epsilon_0} l_s \exp\left(-\frac{x}{l_s}\right) dx - n_s = 0. \quad (13)$$

### ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОЗРАЧНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА (НЕВЫРОЖДЕННАЯ СТАТИСТИКА)

Носитель заряда может преодолеть потенциальный барьер посредством термоактивации с вероятностью  $P_a(E)$  и туннелирования с вероятностью  $P_T(E)$  с минимальной затратой энергии (см. рис. 1б), что в математическом смысле означает: прохождение через барьер осуществляется при максимальном значении прозрачности барьера  $D(E)$ ,

$$dD(E)/dE = 0. \quad (14)$$

Физический смысл (14) состоит в том, что носитель активируется до энергии  $E$ , а затем туннелирует через барьер на уровне  $E$ , а термоактивация и туннелирование не зависимы друг от друга. Так как процесс носит вероятностный характер,

$$D(E) = P_a(E) \cdot P_T(E). \quad (15)$$

Активация на уровень с энергией  $E$  задается статистикой Больцмана

$$P_a(E) = A \exp(-E/kT). \quad (16)$$

Вероятность туннелирования с уровня  $E$

$$P_T(E) = B \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1(E)}^{x_2(E)} \sqrt{2m_{dn}(\varphi(x) - E)} dx\right\}, \quad (17)$$

где  $x_1(E)$  и  $x_2(E)$  – симметричные относительно  $x = 0$  квазиклассические точки поворота Замена переменной в (17)  $z = \varphi(x) - E$  и учет  $\varphi(x_1) = \varphi(x_2) = E$  даёт

$$P_T(E) = B \exp\left\{-4 \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 m_{dn}}{e^2 \hbar^2 N_d}} \int_0^{\varphi(0)-E} \sqrt{\frac{z}{z+E}} dz\right\}. \quad (18)$$

В (16) и (18)  $A$  и  $B$  – численные коэффициенты порядка 1, которые не повлияют на окончательные результаты.

Объединяя (14) – (18), придем к параметрическому уравнению

$$-\frac{1}{kT} + 4 \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 m_{dn}}{e^2 \hbar^2 N_d}} \frac{d}{dE} \int_0^{\varphi(0)-E} \sqrt{\frac{z}{z+E}} dz = 0, \quad (19)$$

решение которого задает энергию носителей ( $E \pm kT$ ), определяющую явления переноса.

После последовательного интегрирования и дифференцирования в (19)

$$-\frac{1}{kT} + 4 \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 m_{dn}}{e^2 \hbar^2 N_d}} \ln \frac{\sqrt{\varphi(0)} + \sqrt{\varphi_0 - E}}{\sqrt{E}} = 0. \quad (20)$$

Решение (20) имеет вид

$$E = \left(\frac{2C}{C^2 + 1}\right)^2 \varphi(0), \quad C = \exp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{e^2 \hbar^2 N_d}{\epsilon \epsilon_0 m_{dn} k^2 T^2}}, \quad (21)$$

Учет в (15) соотношений (16), (18) и (21) приводит к соотношению

$$D(E) = A \cdot B \exp\left(-\frac{C^2 - 1}{C^2 + 1} \frac{\varphi(0)}{kT \ln C}\right). \quad (22)$$

При  $C \rightarrow 1$  неопределенность 0/0 разрешается

по правилу Лопиталья  $\lim_{C \rightarrow 1} \frac{C^2 - 1}{(C^2 + 1) \ln C} = 1$ . В

физическом смысле  $C = 1$  соответствует туннельно-непрозрачному барьеру.

**Случай вырождения.** Вновь, как в [11 – 13], считая, что барьер (11) селективирует электроны по энергиям, вычислим вероятность их прохождения через барьер. При вырождении электронного газа основной вклад в явления переноса дают носители с энергией  $E_F$ . Вероятность прохождения таких носителей через

барьер нас и будет интересовать. Схема перехода электрона через барьер приведена на рис. 3: носитель с уровня Ферми активируется до состояния  $E_F + E$ , а затем туннелирует через барьер. Прозрачность барьера вновь задается соотношениями (14) – (17), где  $\phi(x)$  определяется посредством (11) и (12).

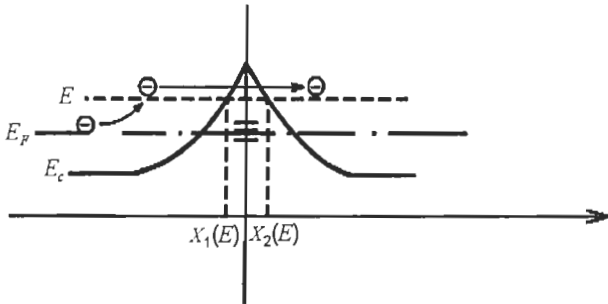


Рис. 3. Схема прохождения электрона через барьер для случая вырождения.

Если теперь отсчет энергии будем вести от  $E_F$ , то для вырожденной статистики (16) остаётся без изменений, а интегрирование в (17) даёт

$$P_T(E) = B \exp \left[ \frac{4l_s \sqrt{2m_{dn}}}{\hbar} \times \left( \sqrt{|E_s| - E} - \sqrt{E} \arctg \sqrt{\frac{|E_s| - E}{E}} \right) \right]. \quad (23)$$

При вырождении дифференцирование в (5) приводит к уравнению:

$$\frac{2l_s \sqrt{2m_{dn}} kT}{\hbar} \arctg \sqrt{\frac{|E_s| - E}{E}} = \sqrt{E}, \quad (24)$$

однако, это уравнение не имеет аналитического решения. В то же время функция  $\arctg \zeta$  при малых  $\zeta$  аппроксимируется функцией  $\zeta$  с точностью до  $\zeta^3$ . В рамках такого приближения уравнение (24) приобретает вид:

$$2l_s kT \sqrt{2m_{dn}} \sqrt{|E_s| - E} = \hbar E, \quad (25)$$

т.е. сводится к простому квадратному уравнению. Решение уравнения, имеющее физический смысл,

$$E = \frac{\beta^2}{2} \left( 1 + \sqrt{\frac{|E_s|}{\beta^2} - 1} \right);$$

$$\beta^2 = \frac{8\epsilon\epsilon_0 (E_F + |E_s|) k^2 T^2 m_{dn}}{e^2 \hbar^2 N d}. \quad (26)$$

Таким образом, подстановка (26) в (16) и (23) определяет прозрачность (15) потенциального барьера на ГЗ при вырождении электронного газа.

Совершенно аналогичные соотношения имеют место, когда основа поликристалла  $p$  – типа. В этом случае ПС должна иметь донорную природу.

Полученные результаты дают возможность проанализировать прозрачность потенциальных барьеров на ГЗ независимости от параметров полупроводника ( $N_D, \mu$ ), параметров ПС ( $E_s, N_s$ ) и внешних условий, на пример температуры, и применит результаты при интерпретации конкретных свойств поликристаллов полупроводников, наблюдаемых в эксперименте. В частности, их можно использовать при расчете кинетических коэффициентов поликристаллических полупроводников, учитывая трансформацию времени релаксации носителей заряда за счет рассеяния на потенциальном барьере ГЗ.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Атомная структура межзеренных границ. Сб. статей. – М.: Мир, 1978.
2. Hall E.O. // Proc. Phys Soc. – 1951. – Vol. B 64. – P. 747.
3. Горелик С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов. – М.: Металлургия, 1967.
4. Recrystallization of Metallic Materials/Red. F. Haessner. – Stuttgart: Dr. Riederer Verlag, 1971.
5. Постников В.С. Внутреннее трение в металлах. – М.: Металлургия, 1969.
6. Poczta E.F. // Acta Phys. Acad. Sci. Hung. – 1968. – Vol. 15. – P. 89.
7. Бородкина Н.К., Страхов Л.П. // ФТТ. – 1966. – Т. 8. – С. 2260.
8. Гантмахер В.Д., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. – М.: Наука, 1984.
9. Латышев А.В., Юшканов А.А. // ФТТ. – 2001. – Т. 43. – С. 1744.
10. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Кайпер Р., Миронов А.Г., Эндерлайн Р., Эссер Б. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. – М.: Наука, 1981.
11. Аморфные и поликристаллические полупроводники/Под ред. В.Хейванга. – М.: Мир, 1987.

12. Гутман Ф., Лейонс Л. Органические полупроводники. – М.: Мир, 1970.
13. Гольцман Б., Дашевский З., Кайданов В., Коломоец Н.В. Пленочные термо-элементы: физика и применение. – М.: Наука, 1985.
14. Атакулов Ш., Коканбаев И.М. Термические и радиационно-стимулированные процессы в поликристаллических пленках халькогенидов свинца. – Ташкент, Фан, 1992.
15. Губанов А.И.//ФТП. – 1983. – Т. 17. – С. 1679.
16. Погребняк В.А., Яковенко В.М., Яковенко И.В.//ФТТ. – 1995. – Т. 39. – С. 1875.
17. Азимов С.А., Атакулов Ш.Б. Кинетические явления в поликристаллических пленках халькогенидов свинца и висмута. – Ташкент, Фан, 1985.