

УДК 621.315.592

**А.П. Авачев, Д.В. Алмазов, Н.В. Вишняков, В.В. Гудзев, В.Г. Мишустин**  
**ИССЛЕДОВАНИЕ КОНТАКТНЫХ ЯВЛЕНИЙ В БАРЬЕРНЫХ**  
**СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ**  
**ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

*В работе исследованы особенности контактных явлений в барьерных структурах на основе неупорядоченных полупроводников. Показано, что электрофизические свойства контакта определяются, главным образом, плотностью состояний, локализованных в щели подвижности неупорядоченного полупроводника. Разработан математический аппарат для теоретического описания контактных явлений. Рассмотрены экспериментальные методы исследований, проведен сравнительный анализ теоретических и экспериментальных результатов.*

**Ключевые слова:** контактные явления, неупорядоченные полупроводники, уравнение Пуассона, экспериментальные методы исследований.

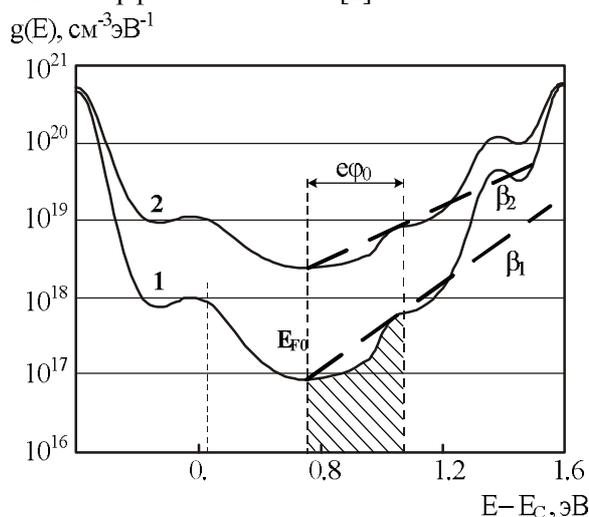
**Введение.** Работа всех полупроводниковых приборов во многом определяется физическими процессами, происходящими в области пространственного заряда (ОПЗ) контакта металл – полупроводник. Учет особенностей формирования потенциальных барьеров в зависимости от электрофизических свойств полупроводника и условий формирования металлургической границы позволяет более точно прогнозировать электрические характеристики приборов.

Физические процессы, протекающие при "тесном" контакте двух различных материалов, получили название контактных явлений. Под контактными явлениями понимают возникновение контактной разности потенциалов, процессы выпрямления на контакте, контакт электронного и дырочного полупроводников, процессы токопереноса через контакт и т.д.

Отдельно следует говорить о контактных явлениях в неупорядоченных полупроводниках, которые в настоящее время нашли широкое применение в различных областях электроники: в плоских телевизионных экранах большой и сверхбольшой площади; в высокочувствительных датчиках различного назначения; в солнечной энергетике; в оптоэлектронной технике; в качестве пороговых переключателей, элементов памяти и т.д. [1]. Неупорядоченные полупроводники обладают следующими важными достоинствами: технологическая доступность и дешевизна, возможность получения однородных по свойствам пленок на подложках большой площади из различного материала (диэлектрических, металлических, полупроводниковых),

совместимость с технологическими процессами изготовления интегральных схем, радиационная стойкость.

Описание контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках является трудной задачей, поскольку их зонная энергетическая структура носит более сложный характер по сравнению с кристаллическими. Это связано с квазинепрерывным распределением по энергии разрешенных для электрона состояний, в результате чего можно говорить о запрещенной зоне только по подвижности (рисунок 1). Сложность проблемы также усугубляется метастабильностью аморфного состояния [2].



**Рисунок 1 - Распределение плотности состояний, локализованных в щели подвижности a-Si:H [2]**

До настоящего времени разработка и изготовление приборов на основе неупорядоченных

полупроводников идет опытным путем. Зачастую для получения заданных свойств полупроводниковых пленок и приборов на их основе используют варьирование технологических режимов производственных линий. Это повышает стоимость разработки и изготовления приборов, а также не всегда позволяет гарантированно получить заранее прогнозируемые свойства.

В связи с этим исследование неупорядоченных полупроводников и пленочных барьерных структур на их основе остается актуальной научной и прикладной проблемой.

**Особенности контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках.** Как было отмечено выше, неупорядоченные полупроводники характеризуются высокой плотностью состояний, локализованных в щели подвижности, которая может превосходить плотность поверхностных состояний. Это обуславливает отличия электрофизических свойств неупорядоченных материалов от кристаллических, в том числе оказывает определяющее влияние на процесс формирования барьера металл – неупорядоченный полупроводник.

Барьеры в неупорядоченных полупроводниках отличаются от кристаллических, прежде всего, тем, что плотность объемного заряда в ОПЗ определяется не столько ионизированными примесями, как у кристаллических полупроводников, сколько ионизацией локализованных состояний в щели подвижности.

Свойства барьера металл – некристаллический полупроводник значительно отличаются от свойств классического барьера Шоттки. Это очевидно, т.к. физическая природа полупроводников различается.

В настоящее время существует несколько математических моделей, описывающих формирование этого барьера. Все они в той или иной степени отражают особенности контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках, однако они не лишены ограничений и недостатков.

Одна из моделей, дающая хорошее соответствие экспериментальных и теоретических результатов, была предложена в работе [3]. В ее основе лежит предположение, что неупорядоченный полупроводник можно рассматривать как сильно компенсированный кристаллический полупроводник. Процессы рекомбинации неравновесного заряда в таком материале происходят гораздо быстрее, чем максвелловская релаксация, поскольку процессы переноса заряда сопровождаются многократными актами освобождения и захвата.

В соответствии с данной моделью формирование барьера идет в два этапа. На первом этапе

за время порядка  $10^{-12}$  с из-за разницы работ выхода контактирующих материалов происходит диффузия электронов. В результате устанавливается распределение плотности объемного заряда и поля вдоль контакта так же, как и у идеального кристаллического полупроводника.

По окончании первого этапа установившийся изгиб зон создает инверсную заселенность состояний, локализованных в щели подвижности. В результате начинается второй этап формирования барьера, в течение которого происходят термическая активация носителей и их вынос из ОПЗ. Из-за низкой подвижности ( $10^{-1} \dots 10^{-2}$  см<sup>2</sup>/(В·с)) и малой диффузионной длины носители сразу же захватываются на мелкие ловушки. Перед тем как попасть на глубокую ловушку, они, согласно модели многократного захвата, испытывают несколько актов захвата-активации с мелких ловушек, продвигаясь в сторону внутренней границы ОПЗ.

Процессы рассасывания избыточного заряда, который формируется за счет опустошения глубоких ловушек ОПЗ, происходят до установления полного термодинамического равновесия системы, которое, по существу, и определяет максвелловское время релаксации  $\tau_M$ .

Вынос из ОПЗ избыточного заряда приводит к сужению ширины ОПЗ одновременно с ростом плотности объемного заряда. Аналогичные процессы характерны и для кристаллических полупроводников с глубокими ловушками. Время второго этапа формирования барьера значительно превосходит время максвелловской релаксации в кристаллических полупроводниках и может составлять вплоть до  $10^3$  с.

Из описанной модели формирования барьера можно сформулировать следующие выводы:

- увеличение плотности состояний в середине щели подвижности приводит к сужению ОПЗ и изменению хода электростатического потенциала, "утонению" барьера в приконтактной области и, как следствие, понижению эффективной высоты барьера, изменению суперпозиции токов, протекающих через барьер;

- барьер формируется за время  $t_\Sigma \approx \tau_M \leq 10^3$  с, т.е. для измерения вольт-фарадных характеристик частота тест сигнала должна быть соизмерима или меньше  $\tau_M^{-1}$ ;

- на контакте металл – неупорядоченный полупроводник формируется барьер типа Шоттки, хотя классическая теория барьеров Шоттки не допускает формирования слоя Шоттки в собственном полупроводнике.

Таким образом, данная модель может быть

применима для описания формирования барьера между металлом и неупорядоченным полупроводником, имеющим высокую плотность локализованных состояний и низкую подвижность носителей, а также позволяет объяснить результаты экспериментов [4].

**Решение уравнения Пуассона для контакта металл – неупорядоченный полупроводник.** Для получения распределения пространственного заряда и профиля электростатического потенциала в ОПЗ на контакте металл – неупорядоченный полупроводник решается одномерное уравнение Пуассона. Особенности электронного строения неупорядоченных полупроводников учитываются за счет использования определенных допущений и ограничений при решении следующих задач:

- расчет ведется на примере аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) как типичного представителя класса неупорядоченных полупроводников;

- ввиду размытости края зон подвижности энергия на зонных диаграммах отсчитывается от состояния вакуума  $E_0 = 0$  (рисунок 1);

- состояния, локализованные в щели подвижности, являясь электрически- и фотоактивными и могут выступать в роли донорных (при энергии выше  $E_F$ , т.е. в интервале между  $E_F$  и  $E_V$ ) или акцепторных (при энергии меньше  $E_F$ , т.е. в интервале  $E_F - E_C$ ) состояний [4];

- влияние поверхностных состояний в расчетах не учитывается;

- в расчетах используется экспоненциальная аппроксимация распределения плотности состояний в щели подвижности:

$$g(E) = g_{F0} \exp(\beta(E - E_{F0})), \quad (1)$$

где  $g_{F0}$  – плотность состояний вблизи уровня Ферми,  $\beta$  – наклон аппроксимирующей прямой в полулогарифмических координатах;

- используется приближение полного обеднения, т.е. при  $E > E_F$  функция Ферми для электронов  $f_n=1$  и при  $E < E_F$   $f_n=0$ .

Уравнение Пуассона связывает между собой плотность объемного заряда ( $\rho$ ) и ход электростатического потенциала ( $\varphi$ ) в ОПЗ полупроводника:

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

Решение уравнения (2) с учетом указанных выше допущений и ограничений позволяет получить аналитические выражения для распределения напряженности (3) и электростатического потенциала (4) электрического поля в зависимости от величины плотности состояний в щели подвижности:

$$F(x) = \sqrt{\frac{2g_{F0}}{\beta^2\varepsilon\varepsilon_0}} \operatorname{tg}\left(\frac{W-x}{\sqrt{2}L_S}\right); \quad (3)$$

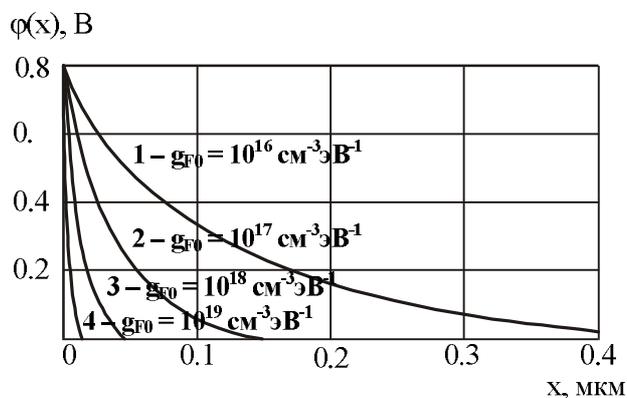
$$\varphi(x) = -\frac{2}{\beta e} \ln \left| \cos\left(\frac{W-x}{\sqrt{2}L_S}\right) \right|, \quad (4)$$

где ширина ОПЗ ( $W$ ) и характеристическая длина экранирования ( $L_S$ ) электрического поля рассчитываются по (5) и (6):

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{e^2g_{F0}}} \arccos \left[ \exp\left(-\frac{\beta e(\varphi_0 - V)}{2}\right) \right]; \quad (5)$$

$$L_S = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e^2g_{F0}}}. \quad (6)$$

Здесь  $\varphi_0$  – контактная разность потенциалов,  $V$  – внешнее смещение. Таким образом, решение уравнения Пуассона устанавливает взаимосвязь между параметрами распределения плотности состояний в a-Si:H ( $g_{F0}$ ,  $\beta$ ) и пространственным распределением объемного заряда на контакте Me/a-Si:H ( $\varphi(x)$ ,  $F(x)$ ,  $W$ ) [5]. На рисунке 2 представлены результаты теоретического расчета распределения электростатического потенциала в ОПЗ при различной плотности состояний.



**Рисунок 2 – Расчетное распределение  $\varphi(x)$  в зависимости от величины плотности состояний в a-Si:H [4]**

В отличие от классического барьера Шоттки для кристаллического полупроводника в неупорядоченном полупроводнике пространственный заряд распределяется крайне неравномерно. Профиль электростатического потенциала барьера "утончается", причем, чем больше плотность состояний, тем заметнее этот эффект. В свою очередь, это приводит к понижению эффективной высоты барьера из-за туннелирования электронов сквозь тонкий барьерный слой, и как следствие, характерному для неупорядоченных полупроводников виду вольт-

амперных (ВАХ) и вольт-фарадных (ВФХ) характеристик [6].

**Экспериментальные методы исследования контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках.** Исследования полупроводниковых материалов тем или иным методом позволяют получить корректные результаты по отдельным характеристикам, однако для всестороннего изучения материала необходим комплексный подход. В настоящее время наибольшее распространение для экспериментального исследования неупорядоченных полупроводников получили несколько методов, которые рассмотрены ниже.

**Атомно-силовая микроскопия (АСМ)** – это метод для контурного изучения поверхности, обладающий большим набором методик, позволяющих проводить измерения проводимости поверхности, поверхностного потенциала, поверхностной емкости, электростатического заряда. Метод АСМ обладает большой производительностью и информативностью. Изображения, полученные с помощью данной методики, являются трехмерными, что делает их наиболее простыми для толкования среди изображений, получаемых методами микроскопии (рисунок 3).

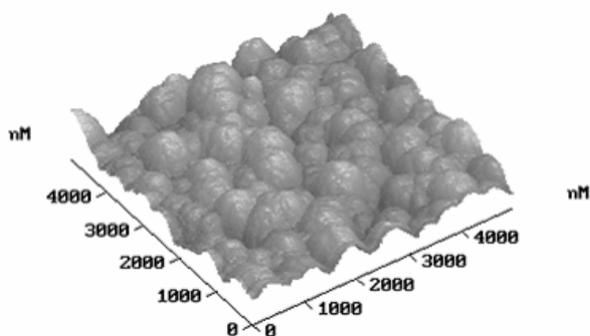


Рисунок 3 – Топология поверхности пленки a-Si:H [7]

**Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)** – очень чувствительный метод для исследования микроскопических парамагнитных центров. Поскольку состояния в щели подвижности, связанные с нарушенными электронными связями, влияют на формирование ОПЗ, метод ЭПР позволяет исследовать контактные явления. Исторически ЭПР был одним из первых методов изучения неупорядоченных полупроводников и, в частности, a-Si:H. Он ярко продемонстрировал существование высокой плотности парамагнитных состояний в нелегированном материале. Экспериментальные результаты показывают, что для a-Si:H плотность спинов меняется в пределах  $10^{15}$  -  $10^{20}$   $\text{см}^{-3}$  в зависимости от условий приготовления или

последующей обработки. Результаты исследований показали, что оборванные связи являются характеристическим свойством a-Si:H и играют очень важную роль при формировании контактов [8].

**Оптическая спектроскопия** включает в себя методы исследования люминесценции, оптического поглощения, переходного индуцированного поглощения и т.д. Эти методы позволяют получить спектральную зависимость коэффициента оптического поглощения (рисунок 4), информацию об оптической ширине щели подвижности, энергии локализованных состояний, а также о механизмах рекомбинации [9].

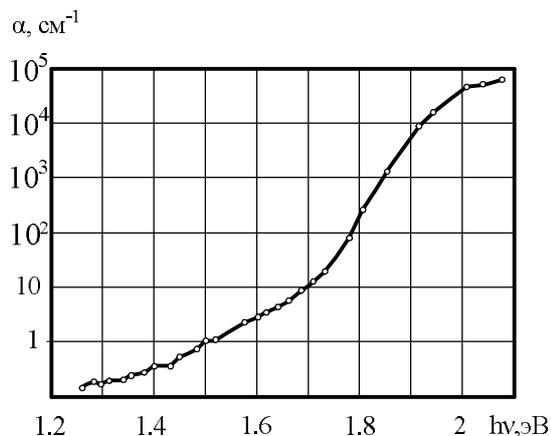


Рисунок 4 – Спектральная зависимость коэффициента оптического поглощения a-Si:H

**Методы, основанные на измерении кинетических свойств.** Данные, получаемые из экспериментов по исследованию переноса носителей, позволяют получать информацию как о кинетических свойствах неупорядоченного полупроводника, так и о зонной структуре материала.

Метод ВАХ позволяет исследовать электрофизические свойства контактирующих материалов. По форме ВАХ можно сделать вывод о высоте потенциального барьера, идеальности контакта, преобладающих механизмах токопереноса, а исследование температурной зависимости ВАХ позволяет рассчитать энергию активации проводимости и положение уровня Ферми (рисунок 5).

**Эффект поля** – это один из наиболее испытанных методов исследования неупорядоченных полупроводников. Его суть заключается в измерении планарной проводимости образца как функции электрического поля, приложенного к поверхности. Однако при использовании эффекта поля возникает проблема, связанная с влиянием поверхностных состояний. Поэтому результаты, полученные данным методом, зачастую не характеризуют объем полупроводника.

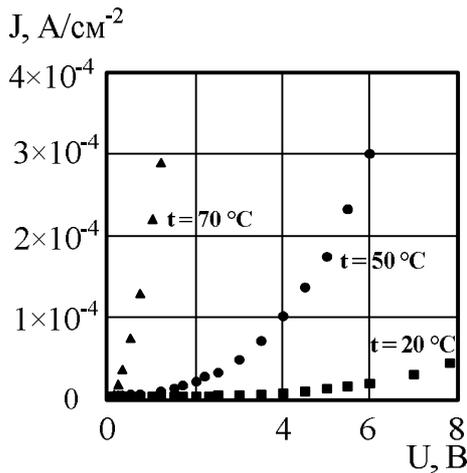


Рисунок 5 – ВАХ контакта Al/a-Si:H при различных температурах

Метод ВФХ является достаточно эффективным, однако при исследовании неупорядоченных полупроводников при стандартной частоте тест-сигнала (обычно  $10^4$  Гц при 300 К) измеряется чисто геометрическая емкость структуры [10]. Более информативным методом с этой точки зрения является измерение низкочастотной (НЧ) ВФХ или квазистатической ВФХ (рисунок 6).

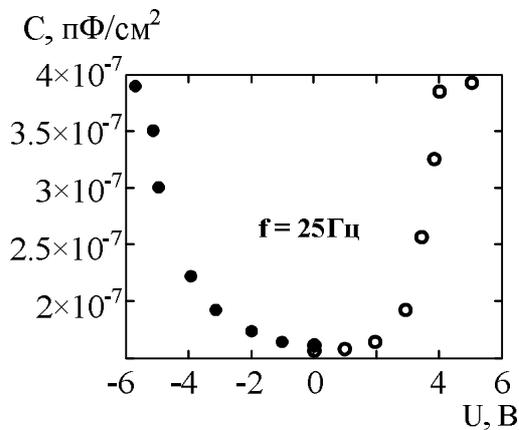


Рисунок 6 – НЧ ВФХ структуры Al/a-Si:H/Al [5]

Релаксационная спектроскопия глубоких уровней (РСГУ) представляет собой весьма информативный метод изучения глубоких состояний в полупроводниках. Метод основан на эффекте расширения обедненного слоя обратно смещенного перехода и измерении переходного отклика при термическом освобождении носителей с ловушек. В случае неупорядоченных полупроводников анализ усложняется из-за непрерывного распределения локализованных состояний и теряет свою простоту, характерную для случая кристаллических полупроводников (рисунок 7).

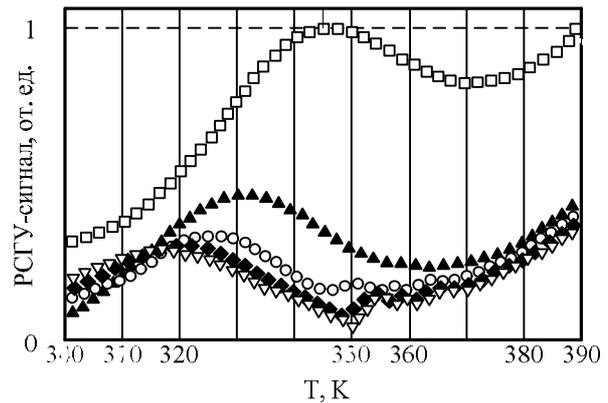


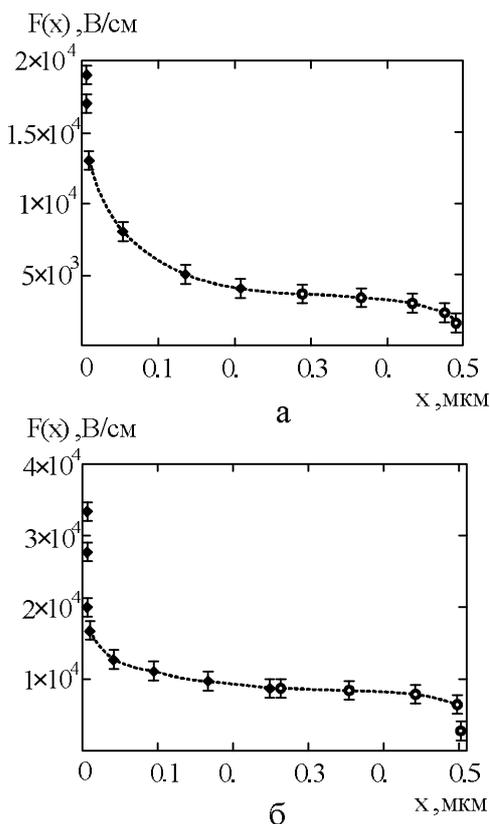
Рисунок 7 – Спектр токовой РСГУ p-i-n структуры на основе a-Si:H [11]

*Времяпролетные методы определения параметров полупроводника.* Традиционно эти методы применяют для исследования кинетических характеристик материала, таких как подвижность и время жизни носителей.

Традиционный времяпролетный метод основывается на измерении переходной фотопроводимости. Пакет носителей возбуждается вблизи одного из электродов, напыленных на образец, и измеряется ток, возникающий при переносе носителей к другому электроду. В простейшем случае измерения непосредственно дают время, необходимое для переноса носителей, откуда определяется подвижность. Однако в неупорядоченных полупроводниках перенос носителей носит дисперсионный характер, т.е. времена переноса отдельных носителей характеризуются очень широким распределением. При этом ток экспоненциально уменьшается со временем и характеризуется специфической зависимостью от толщины. Поэтому интерпретация экспериментальных результатов представляет определенную сложность.

Модификация традиционного времяпролетного метода на основе методики Гехта позволяет повысить точность измерений за счет учета потери части носителей из-за рекомбинации на глубоких ловушках в процессе дрейфа через ОПЗ, а также исключает влияние дисперсии носителей на результаты измерений [12].

МВПМ позволяет с высокой точностью измерять дрейфовый сдвиг ( $\mu\text{т}$ ) в неупорядоченных полупроводниках, а также непосредственно измерять распределение электрических полей  $F(x)$  в тонкопленочных барьерных структурах (рисунок 8).



**Рисунок 8 – Распределение напряженности контактного поля в а-Si:H: а - структура с барьером Шоттки, б – р-и-n структура [5]**

**Заключение.** Глубокое понимание физической природы контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках наряду с корректировкой математического аппарата для обработки экспериментальных результатов необходимо для создания автоматизированных систем проектирования (САПР) приборов на основе этих материалов, учитывающих их особенности.

Комплексные теоретические и экспериментальные исследования контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках являются необходимым условием успешного развития и конкурентоспособности этого направления электроники. Особенно актуальна эта тема в связи с широким внедрением новых неупорядоченных материалов для изготовления наноразмерных структур, где к традиционным "проблемам" этих материалов добавляется необходимость учитывать квантово-размерные эффекты при формировании и работе контактов.

Дальнейшие исследования контактных явлений в неупорядоченных полупроводниках необходимо продолжать с учетом теоретических и экспериментальных результатов, описанных в данной работе. Это позволит приблизить переход от технологических способов проектирования и изготовления приборов к модельным,

что существенно снизит затраты на разработку и повысит процент выхода годных приборов.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

#### **Библиографический список**

1. Вихров С.П., Вишняков Н.В., Мишустин В.Г. Физические процессы в барьерных структурах на основе неупорядоченных полупроводников: Учеб. пособие. Рязань, РГРТА. 2005. 72 с.
2. G. Yue, B. Yan, G. Ganguly et al. Metastability in Hydrogenated Nanocrystalline Silicon Solar Cells // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 910 (2006). P. A-02-01 – A-02-12.
3. Вишняков Н.В., Вихров С.П. Модель формирования барьера Me/a-Si:H с учетом высокой плотности состояний в щели подвижности // Аморф. гидрог. полупр. и их прим.: Ст. тезисов докл. Всесоюзного семинара. Л., 1991. С.41.
4. Вихров С.П., Вишняков Н.В., Мишустин В.Г. и др. Формирование потенциальных барьеров в нелегированных неупорядоченных полупроводниках // Физика и техника полупроводников, 2005. Т. 39. Вып. 10. С. 1189 – 1194.
5. Мишустин В.Г. Исследование влияния локализованных состояний на распределение пространственного заряда в барьерных структурах на основе неупорядоченных полупроводников / Дисс. канд. физ.-мат. наук: Рязань, 2008. 185 с.
6. Вихров С.П., Вишняков Н.В., Мишустин В.Г. и др. Токотенос через барьер на контакте металл - некристаллический полупроводник: особенности расчета прямых и обратных ВАХ // Вестник РГРТУ. Вып. 22. Рязань, РГРТУ. 2007. С. 86 – 88.
7. Уточкин И.Г. Исследование структурных и электрофизических характеристик пленок на основе а-Si:H, полученных в плазме НЧ разряда / Дисс. канд. физ.-мат. наук: Рязань, 2005. 171 с.
8. И. Соломон. Спиновые эффекты в аморфных полупроводниках // В кн.: Аморф. полупр. / под ред. М. Бродски. М.: Мир, 1982. 419 с.
9. Дж. Коннелл. Оптические свойства аморфных полупроводников // В кн.: Аморфные полупроводники / под ред. М. Бродски. М.: Мир, 1982. 419 с.
10. Вишняков Н.В. Контактные явления в структурах металл - аморфный гидрогенизированный кремний / Дисс. канд. техн. наук: Рязань, 1993. 252 с.
11. Литвинов В.Г., Мишустин В.Г., Гудзев В.В. и др. Практические аспекты применения метода DLTS для исследования электронных состояний в неупорядоченных полупроводниках // Сб. трудов VI Межд. конф. "Аморф. и микрокрист. полупров.". С.-Пб. 2008. С. 164 – 165.
12. Вихров С.П., Вишняков Н.В., Мишустин В.Г. и др. Разработка фундаментальных основ время-пролетного метода исследования некристаллических полупроводников // Отчет о НИР 2-05Г / Рук. Вихров С.П., № Госрегистрации 01200501803. Рязань. 2007. 52 с.