

происходит путем последовательного присоединения определенных структурных единиц к центрам зарождения ТД, в качестве которых могут выступать электрически неактивные комплексы, состоящие из трех атомов кислорода. Природа подвижных частиц, участвующих в формировании термодоноров, к настоящему времени не установлена. Однако известно, что в их состав должен входить один атом кислорода. Ранее также отмечалось [7, 8], что концентрация подвижных частиц не зависит от термической предыстории кристаллов, а определяется только величиной  $N_0$ .

Не исключено, что существует несколько механизмов, учитывающих влияние кислородных преципитатов на генерацию ТД. Так, априори можно утверждать, что присутствие ПК уменьшает концентрацию центров зарождения термодоноров или снижает эффективный радиус захвата ими подвижных частиц. Не исключено, что поля упругих напряжений, создаваемые кислородными преципитатами, могут уменьшать коэффициент диффузии подвижных частиц. Однако наиболее вероятным представляется «захват» ПК подвижных частиц, что исключает часть атомов кислорода из реакций образования ТД.

В заключение отметим, что необходимы дальнейшие исследования для полного выяснения механизмов влияния кислородных преципитатов на генерацию термодоноров.

### Список литературы

1. Ouzmazd A., Schoter W., Bourget A. // Journ. Appl. Phys. 1984. V. 56. № 6. P. 1670.
2. Маркевич В. П., Мурин Л. И., Литвинко А. Г. // Физ. и техн. полупроводн. 1987. Т. 21. № 7. С. 1267.
3. Markevich V. P., Murin L. I. // Phys. Stat. Sol. 1989. V. A111. № 2. P. K149.
4. Gaworzewski P., Hilde. // Phys. Stat. Sol. 1985. V. A92. № 1. P. 129.
5. Ильин М. А., Коварский В. Я., Орлов А. Ф. // Заводская лаборатория. 1984. Т. 50. № 1. С. 24.
6. Kaiser W., Frisch H. L., Reiss H. // Phys. Rev. 1958. V. 112. № 5. P. 1546.
7. Маркевич В. П. Механизм образования и свойства термодоноров в кремнии: Автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук. М., 1990.
8. Маркевич В. П., Мурин Л. И. // Физ. и техн. полупроводн. 1991. Т. 25. № 2. С. 262.

Поступила в редакцию 03.04.92.

УДК.548.55

А. В. ДРОЗДОВСКИЙ, И. Е. ТРАЛЛЕ, А. К. ФЕДОТОВ

### БИСТАБИЛЬНОСТЬ БАРЬЕРА НА ГРАНИЦЕ ЗЕРЕН В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Границы зерен (ГЗ) являются основным фактором, определяющим электронные свойства приборов и устройств, использующих поликристаллические полупроводники [1]. Это связано, в первую очередь, с наличием на ГЗ большого количества пограничных состояний (ПС), являющихся ловушками для носителей заряда и приводящих к возникновению областей пространственного заряда (ОПЗ) вокруг ГЗ. Весьма малые толщины ОПЗ ( $10 - 1000$  нм [2]) и высокие плотности ПС ( $\sim 10^{11} - 10^{13}$  см $^{-2}$  [3, 4]) могут создавать вблизи ГЗ общего типа сильные «встроенные» электрические поля напряженностью до  $10^4 - 10^6$  В/см [5]. Складываясь с внешним электрическим полем, последние могут способствовать разогреву носителей заряда (НЗ), движущихся поперек плоскости ГЗ, и приводить тем самым к нестабильности пограничного барьера. На эту возможность впервые было указано в работах [6,7].

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния разогрева НЗ электрическим полем на высоту пограничного барьера активной ГЗ в полупроводнике на примере кремния *n*-типа проводимости.

Задачу о формировании барьера и движении НЗ поперек плоскости ГЗ будем рассматривать в приближении Шоттки, когда ГЗ моделируется двумя симметричными барьерами Шоттки, включенными навстречу друг другу (см., напр., [8]). Впервые такой подход, развивший идею захвата НЗ на ПС, был сформулирован в работе Тейлора и др. [9] для бикристаллического

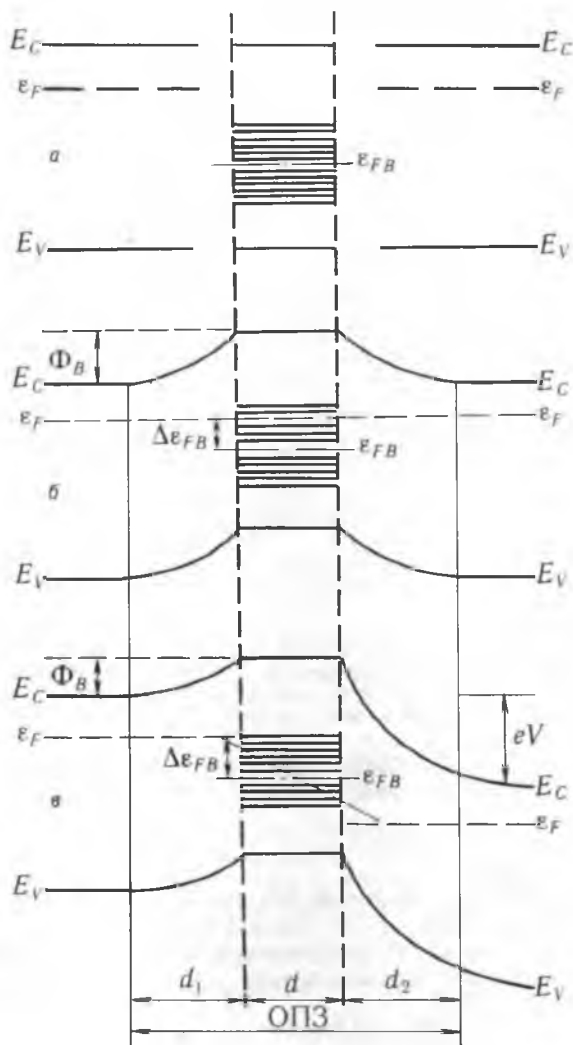


Рис. 1. Схематическое представление изгиба зон около ГЗ в кремнии п-типа  
 а—условное исходное состояние (до соприкосновения «ядра» и зерен); б—структура зон в условиях термодинамического равновесия; в—изгиб зон при приложении внешнего электрического напряжения поперек плоскости ГЗ

германия. Поскольку «ядро» ГЗ, где сосредоточены ПС («оборванные» связи, сегрегированные примеси и т. д.), имеет иную атомную структуру, чем соседствующие зерна, то уровни Ферми в объеме зерен ( $\epsilon_F$ ) и на ГЗ ( $\epsilon_{FB}$ ) должны различаться (рис. 1, а). При образовании системы зерно — «ядро» ГЗ — зерно основные НЗ будут перетекать из объема зерен на ПС до тех пор, пока уровни Ферми зерен и ГЗ не сравняются (отсчет энергии ведется от края С-зоны). Обеднение зерен носителями (и образование ОПЗ) приведет к изгибу зон и возникновению симметричного барьера (рис. 1, б). Высота этого барьера определяется захваченным на ПС зарядом  $Q_i$ , который зависит от разности уровней Ферми в соседствующих зернах и «ядре» ГЗ, энергетического распределения плотности пограничных состояний (ППС)  $N_i(E)$  и функции распределения электронов по энергиям  $f_i(E)$ :

$$Q_i [ \Phi_b (V) ] = e \int_{\epsilon_{FB}}^{\epsilon_F} N_i (E) f_i (E) dE. \quad (1)$$

При приложении поперек плоскости ГЗ напряжения смещения  $V$  квази-уровень Ферми  $\epsilon_{FB}$  будет изменяться на некоторую величину  $\Delta\epsilon_{FB}$ , вызывая, в свою очередь, изменение заряда  $Q_i$  (через изменение  $f(E)$  и пределов

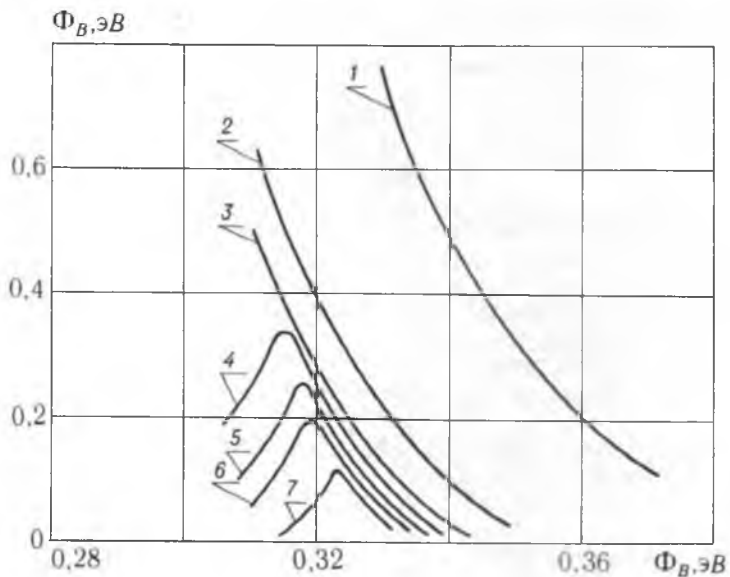


Рис. 2. Изменение величины барьера  $\Phi_B$ , вычисленное самосогласованно, для разных значений приложенного напряжения  $V$  (при накоплении заряда дырок с ростом  $V$ ):

1— $V=0$  В; 2—0,3 В; 3—0,6 В; 4—0,7 В; 5—0,8 В; 6—0,9 В; 7—1,0 В

интегрирования в (1)). Величина отклонения квазиуровня Ферми от равновесного значения была определена в работах [8, 10]:

$$\Delta E_{FB} = kT \ln \left[ \frac{2}{1 + \exp(-eV/kT)} \right]. \quad (2)$$

В результате, высота пограничного барьера  $\Phi_B$  будет отклоняться от его равновесного значения (рис. 1, в). Зависимость  $\Phi_B(V)$  можно определить, решая уравнение Пуассона в приближении Шоттки. Согласно [8, 9], эта зависимость определяется соотношением

$$\Phi_B = \frac{1}{4} V_c \left[ 1 - \frac{V}{V_c} \right]^2. \quad (3)$$

Видно, что при достижении некоторого критического напряжения смещения  $V = V_c$  происходит пробой пограничного барьера, так что  $\Phi_B(V)$  становится равным нулю. При этом величина критического напряжения

$$V_c = \frac{\epsilon \epsilon_0}{2eN_0} \left[ \frac{Q_i}{\epsilon \epsilon_0} \right]^2 \quad (4)$$

определяется пограничным зарядом  $Q_i$ , который сам зависит от  $V$ , а следовательно, от  $\Phi_B$ . Здесь  $\epsilon \epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость полупроводников,  $e$  — заряд электрона, а  $N_0$  — концентрация основной легирующей примеси. Таким образом, уравнение (3) фактически является трансцендентным уравнением типа:

$$\Phi_B(V) = F[\Phi_B(V)], \quad (5)$$

где  $F(\Phi_B)$  в (5) есть правая часть уравнения (3). Это позволяет самосогласованно определять высоту барьера  $\Phi_B(V)$  (или заряд  $Q_i$ ), применяя соответствующую итерационную процедуру.

Анализ правой части уравнения (3)

$$F(\Phi_B) = \frac{1}{4} V_c \left[ 1 - \frac{V}{V_c} \right]^2$$

позволяет определить изменение высоты барьера  $\Phi_B$ , вычисленное самосогласованно для разных значений приложенного напряжения смещения  $V > 0$ . Результаты этих вычислений подобны кривым 1–3 на рис. 2. Точки пересечения этих кривых  $\Phi_B = F(\Phi_B(V))$  с прямой  $\Phi_B = \Phi_B$  дают стационар-

ные самосогласованные значения высот барьера при соответствующих  $V$ . Анализ кривых свидетельствует о существовании единственного решения уравнения (3) для данного  $V > 0$ .

При разогреве НЗ внешним и «встроенным» электрическими полями и при достижении ими некоторой пороговой энергии может происходить ударная ионизация атомов кремния с образованием некоторого числа неосновных носителей (дырок). Последние, диффундируя к ГЗ, будут захватываться на ПС и, тем самым, изменять  $\Delta E_{\text{FB}}$ ,  $Q_i$  и понижать барьер.

Расчет высоты барьера в новых условиях при наличии неосновных носителей (дырок) заключается в замене электронного поверхностного заряда  $Q_i$  в (1) на полный заряд электронов и дырок.

Полный ток дырок через границу пропорционален электронному току  $J_e^c$ , инжектируемому в положительно смещенное зерно:

$$J^h = gJ_i^c = g \left( J - J_i^c + \frac{1}{2} J_{em} \right), \quad (6)$$

где ток термоактивации  $J$  равен

$$J = A^* T^2 \exp \left[ - (e\Phi_B + \epsilon_F) / kT \right],$$

а ток захвата электронов на границе и ток эмиссии из пограничных состояний соответственно равны:

$$J_i^c = J \int c(E) N_t(E) [1 - f_i(E)] dE, \quad (7)$$

$$J_{em}^c = \int b(E) \exp \left[ - (E_B - E) / kT \right] N_t(E) f_i(E) dE. \quad (8)$$

Сечения захвата  $c(E)$  и эмиссии  $b(E)$  аппроксимируются константами. При нулевом напряжении смещения они связаны между собой следующим соотношением:  $b = 2Ac$ ,  $A = A^* T^2$ , где  $A^*$  – постоянная Ричардсона, а  $(E_B - E)$  – энергия активации термоэлектронной эмиссии.

Считаем, что весь входящий поток дырок  $J^h$  полностью захватывается и уравнивается только процессами электронно-дырочной рекомбинации. Безусловно, это окажет влияние на электронный заряд  $Q^c$ , который находится после определения нового положения квазиуровня Ферми.

Уравнение баланса для электронного тока равно:

$$J_i^c = J_i^c - J_{em}^c - J_{rec}^c = 0,$$

а для дырочного тока (без эмиссии):

$$J_i^h = J^h - J_{rec}^h = 0. \quad (9)$$

Используя эти два уравнения и равенства токов

$$J_{rec}^c = J_{rec}^h = J_{rec},$$

получаем условие баланса

$$J_i^c - J_{em}^c - J^h - J^h = 0.$$

Отсюда получаем новое выражение для квазиуровня Ферми на поверхности, который понижается за счет действия процессов рекомбинации:

$$\Delta E_{\text{FB}} = kT \ln \left[ \frac{2 + g}{1 + \exp(-eV/kT) - g_c} \right], \quad (10)$$

где

$$g_c = g(1 - c^*) / c^*, \quad c^* = c \int N_t(E) [1 - f_i(E)] dE.$$

Здесь  $g$  – эффективность дырочной генерации,  $c^*$  – вероятность захвата. Используя новое выражение для  $E_{\text{FB}}$  в (2), можно вычислить электронный заряд  $Q^c$  на границе.

Далее необходимо вычислить заряд дырок  $Q^h$  на ГЗ. Последний вычисляется с помощью соотношения (9) и следующего выражения для тока рекомбинации:

$$J_{rec} = \frac{r}{e} Q^c Q^h \cong 1 / \tau_r Q^h,$$

что приводит к конечному выражению

$$Q^h = gJ\tau_r \frac{2-c^*}{2+g}. \quad (11)$$

С учетом полученных изменений полный заряд на границе принимает вид  $Q_i = Q^e - Q^h$  и может быть вычислен самосогласованно для барьера  $\Phi_B$ .

Результат такого расчета представлен на рис. 2. При малых напряжениях смещения, когда накапливания дырок на ПС не происходит, кривые 1–3 на рис. 2 практически совпадают с результатами расчета при  $g=0$ . С ростом  $V$  дырки будут накапливаться, изгибая зависимости  $F(\Phi_B)$  вниз (кривые 4–6 на рис. 2). Это означает наличие двух устойчивых значений для высоты барьера (см. таблицу).

Значения барьера  $\Phi_B$ , при которых граница раздела находится в устойчивом состоянии

V, В	$\Phi_{B1}$ , эВ	$\Phi_{B2}$ , эВ
0,0	0,352	—
0,3	0,332	—
0,6	0,328	—
0,7	0,327	0,291
0,8	0,325	0,309
0,9	0,322	0,313

Заметим, что обнаруженный эффект бистабильности на ГЗ может, по-видимому, регулироваться не только коэффициентом генерации дырок  $g$ , но также плотностью и характером энергетического распределения ловушек на границе.

В работе использовались следующие значения подгоночных параметров в соотношениях (1)–(11) для кремния:

1. Пограничные состояния моделировались моноуровнем  $N_i = N_i \delta(E - E_i)$  с плотностью  $N_i = 10^{13} \text{ см}^{-2}$ , расположенным на расстоянии 0,578 эВ выше края валентной зоны.

2. Плотность мелких доноров бралась равной  $N_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что характерно при сегрегации примесей на ГЗ.

3. Сечение захвата носителей заряда на пограничные состояния считалось равным  $s = 10^{-13} \text{ см}^{-2}$ .

4. Диэлектрическая постоянная  $\epsilon\epsilon_0 = 12$ .

5. Уровень Ферми расположен на  $\epsilon_F = 0,18$  эВ ниже края зоны проводимости.

6. Постоянная Ричардсона выбиралась равной  $A = 50 \text{ Асм}^{-2}\text{К}^{-2}$ .

7. Эффективность генерации дырок считалась равной  $g = 10^{-3}$ .

8. Время рекомбинации носителей было  $\tau_r = 10^{-3} \text{ с}$ .

Все вычисления велись для  $T = 300 \text{ К}$ .

### Список литературы

1. Поликристаллические полупроводники. Физические свойства и применение / Под ред. Г. Харбеке. М., 1989.
2. М а т а р е Г. Электроника дефектов в полупроводниках. М., 1974.
3. Fedotov A. K., Evtody B. N., Katz E. A., Ilyashuk Ju. M. // Phys. Stat. Solidi (a). 1990. V. 119. P. 523.
4. M a t a r e H. F. // Journ. Appl. Phys. 1986. V. 59. P. 97.
5. B l a t t e r G., B a c r i s w y l D. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 6446.
6. P i k e G. E. // Grain Boundaries in Semiconductors / Ed. H. J. Leamy et al. 1982. P. 369.
7. B l a t t e r G., G r e u t e r F. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 8555.
8. P i k e G. E. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 3274.
9. T a y l o r W. E., O d e l l N. H. // Phys. Rev. 1952. V. 38.
10. M u e l l e r R. K. // Journ. Appl. Phys. 1961. V. 32. P. 635.

Поступила в редакцию 08.09.92.