

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ ПЛОТНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В АМОРФНОМ КРЕМНИИ

### Введение

Кремний в течение последних 50 лет сохраняет лидирующие позиции материала, используемого для создания функциональных электронных устройств с высокой степенью интеграции. Постоянное повышение степени интеграции и уменьшение стоимости интегральных схем (ИС) составляют ключевую основу успехов современной кремниевой технологии. Высокий уровень интеграции, достижимый в современной микроэлектронике, открыл путь для создания приборов с высокими частотными характеристиками. В течение нескольких последних десятилетий, начиная с конца 1960-х гг., в развитии микроэлектроники наблюдалась тенденция, согласно которой плотность транзисторов на поверхности ИС и тактовая частота микропроцессоров удваивалась каждые два года (закон Мура) [1]. При дальнейшем уменьшении размеров элементов традиционная кремниевая технология сталкивается с целым комплексом проблем, в том числе: проблема электрических соединений между активными элементами ИС; проблема электрических соединений между ИС на платах; проблема интеграции оптоэлектронных приборов для оптоволоконной связи и электронных устройств обработки цифровой информации. Перспективным путем решения вышеперечисленных проблем считается создание интегральной кремниевой оптоэлектроники [2 – 4]. Создание кремниевой оптоэлектроники включает в себя задачи создания различных интегральных оптоэлектронных устройств (светоизлучателей, волноводов, модуляторов, коммутаторов и пр.). Актуальной является задача создания устройств для генерации, модуляции, усиления, коммутации, а также детектирования световых сигналов, интегрированных в современные кремниевые ИС. Наиболее актуальной из перечисленных проблем является создание эффективно-го источника излучения на базе кремния. Кремний является непрямозонным материалом, в связи с чем эффективность межзонной излучательной рекомбинации в нем низка по сравнению с безизлучательной. В настоящее время светоизлучающие приборы изготавливаются на основе прямозонных полупроводниковых соединений типа  $A_3B_5$ . Квантовый выход излучения инжекционных лазеров на основе гетероструктур  $A_3B_5$  достигает 80% [5, 6]. Таким образом, перед материаловедением твердотельной электроники встает задача создания новых материалов на основе кремния с достаточно высоким квантовым выходом. В настоящее время развивается несколько направлений исследований, среди которых большое внимание уделяется аморфному водородизированному кремнию (a-Si:H) с наноразмерными включениями монокристаллического кремния и многокомпонентных полупроводниковых твердых растворов.

### Постановка задачи

В настоящее время на основе аморфного кремния (a-Si) создано значительное число различных электронных приборов (солнечные элементы, транзисторы, фотодатчики и т.д.). При моделировании этих приборов очень важно знать функцию плотности электронных состояний, которая определяет оптические, электрические и фотоэлектрические свойства a-Si, а, значит, и параметры приборов. Функции плотности электронных состояний и связанные с ними функции оптического поглощения аморфного кремния, используемые в расчетах, недостаточно точно описывают экспериментальные данные. Поэтому актуальным все еще является аналитическое описание данных функций.

В бездефектном кристаллическом полупроводнике спектр поглощения завершается скачком в запрещенной зоне. В аморфном полупроводнике имеет место наличие хвоста спектра поглощения. Наличие хвоста в спектре поглощения создает трудности в экспериментальном определении края поглощения аморфного полупроводника. Как следствие, были

разработаны различные эмпирические методы для определения оптического спектра и ширины поглощения хвоста. Хотя эти методы и облегчают количественный анализ края поглощения, их соответствие реальным физическим процессам остается под вопросом.

Хотя распределение состояний дефектов кристаллического полупроводника резко обрывается на краях зон, в аморфном полупроводнике распределение состояний хвостов распространяется в запрещенную зону. Анализ показывает, что распределения электронных состояний хвостов локализованы на границах и существует критическая энергия, называемая порогом подвижности, которая отделяет локализованные состояния от их растянутых аналогов. Эти локализованные состояния влияют на многие уникальные свойства, которыми обладают аморфные полупроводники [6].

В данной работе используется эмпирическая модель для описания распределения электронных состояний и определения соответствующего оптического спектра поглощения в рамках этой модели. Установление четкой взаимосвязи между формой оптического спектра поглощения и формой распределения электронных состояний на основе представленных моделей является достаточно актуальным.

Распределение электронных состояний для аморфных полупроводников остается справедливой в той же мере, что и для кристаллических. Вопрос о «состояниях в запрещенной зоне» является особо важным как примесной, так и собственной природы. Свойственное для аморфных полупроводников отсутствие дальнего порядка приводит к появлению хвостов электронных состояний валентной зоны и зоны проводимости, причем величина хвостов зависит от степени разупорядоченности. Получить выражение для плотности состояний весьма трудно из-за отсутствия данных о равновесном положении атомов (т.е. атомной структуры), фотонного спектра и причин возбуждения электронной подсистемы. Для аморфных полупроводников это осложняется и технологией их изготовления.

В настоящее время создан ряд теорий и моделей позволяющих провести теоретический анализ распределения электронных состояний в аморфных полупроводниках. Из них наиболее часто используются модели Коэна – Фриче – Овчинского и Мота – Дэвиса [2, 7, 8]. Первая предполагает, что хвосты плотности состояний перекрывают всю запрещенную зону и зависимость плотности состояний от энергий непрерывна (рис. 1, а). Согласно модели Мота – Дэвиса хвосты локальных состояний узкие и распространяются в запрещенную зону на несколько десятых электрон-вольта. Кроме того, вблизи запрещенной зоны предполагается наличие зоны компенсированных уровней, обязанной своим существованием дефектам в случайной сетке атомов (рис. 1, б). Эти состояния могут выступать и как доноры, и как акцепторы, причем условия однократного или двукратного заполнения этих состояний приводят к образованию двух зон, разделенных соответствующей энергией Хаббарда. В настоящее время механизм формирования распределения электронных состояний хвостов остается невыясненным.

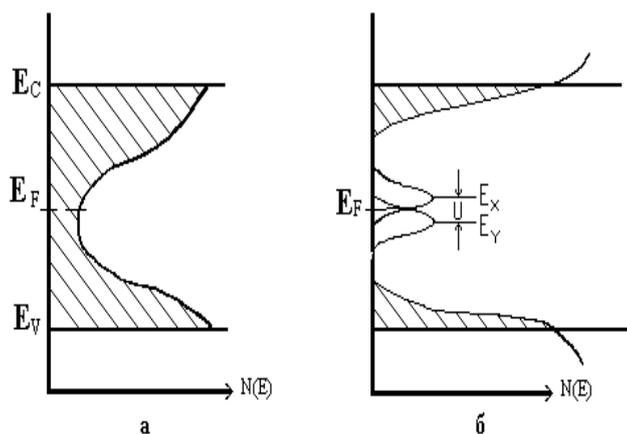


Рис. 1. Различные виды плотности состояний в электронных в аморфных полупроводниках: а – модель Коэна – Фриче – Овчинского; б – модель Мота – Дэвиса

## Функции плотности состояний

Для того чтобы обойти эту неопределенность, предлагается эмпирическая модель распределения электронных состояний, которая охватывает основные особенности материала. Общеизвестно, что распределение состояний проявляет квадратичную зависимость в области зоны проводимости (валентной) и экспоненциальную зависимость в хвостовой области, хотя точная форма хвоста по-прежнему вызывает значительные противоречия. Известно также, что переход функции плотности состояний между зоной и областью хвоста гладкий. Зоны образования хвостов характеризуются шириной хвостов зоны проводимости  $\gamma_c$  и шириной хвостов валентной зоны  $\gamma_v$ . Эти параметры ширины хвостов являются мерой разупорядоченности аморфного кремния. При условии выделения отдельных участков распределения электронных состояний хвостов и растянутости всех зонных состояний можно предположить, что уровни с энергиями  $E_c + \frac{\gamma_c}{2}$  и  $E_v - \frac{\gamma_v}{2}$  представляют собой порог подвижности зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Таким образом, функция плотности состояний для зоны проводимости имеет вид

$$N_c(E) = \frac{\sqrt{2} \cdot m_c^{*3/2}}{\pi^2 \cdot \hbar^3} \begin{cases} \sqrt{E - E_c}, & E \geq E_c + \frac{\gamma_c}{2} \\ \sqrt{\frac{\gamma_c}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{E - E_c}{\gamma_c}\right), & E < E_c + \frac{\gamma_c}{2} \end{cases}, \quad (1)$$

где  $m_c^*$  – эффективная масса электрона в зоне проводимости;  $E_c$  – энергия дна неупорядоченной зоны проводимости;  $E_c + \frac{\gamma_c}{2}$  – точка перехода между квадратичным и экспоненциальным распределением плотности состояний зоны проводимости.

Функция плотности состояний для валентной зоны имеет похожий вид:

$$N_v(E) = \frac{\sqrt{2} \cdot m_v^{*3/2}}{\pi^2 \cdot \hbar^3} \begin{cases} \sqrt{\frac{\gamma_v}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{E_v - E}{\gamma_v}\right), & E \geq E_v - \frac{\gamma_v}{2} \\ \sqrt{E_v - E}, & E < E_v - \frac{\gamma_v}{2} \end{cases} \quad (2)$$

где  $m_v^*$  – эффективная масса дырки в валентной зоне;  $E_v$  – потолок неупорядоченной валентной зоны;  $\gamma_v$  – ширина хвоста валентной зоны;  $E_v - \frac{\gamma_v}{2}$  – точка перехода между квадратичным и экспоненциальным распределением плотности состояний валентной зоны.

Для изучения влияния разупорядоченности исследуется чувствительность функций плотности состояний зоны проводимости и валентной зоны к изменениям в  $\gamma_c$  и  $\gamma_v$ . Результаты расчетов приведены на рис. 2. Для заданных значений  $\gamma_c$ , распределение электронных состояний хвостов проявляется ниже порога подвижности. С увеличением  $\gamma_v$  общее число выбранных электронных состояний хвостов увеличивается, а распределение хвостов распространяется на значительное расстояние в запрещенную зону. Аналогичные результаты наблюдаются и для функции плотности состояний валентной зоны. При расчетах значения  $E_c$  и  $E_v$  принимались равными нулю. Эффективные массы электрона в зоне проводимости и эффективная масса дырки в валентной зоне определяются выражениями [2, 7]

$$m_c^* \approx \frac{E_L}{2 \cdot (E_2 - E_C) \cdot \lambda^{1/3}} \cdot m_e, \quad (3)$$

$$m_v^* \approx \frac{E_L}{2 \cdot (E_v - E_{v2}) \cdot a^{1/3}} \cdot m_e \quad (4)$$

где  $E_L = \frac{\hbar^2}{m_e \cdot L^2}$ ;  $m_e$  – масса свободного электрона;  $L$  – средняя длина связи в образце;  $E_2$  – энергия при которой мнимая часть диэлектрической проницаемости становится максимальной;  $\lambda = \frac{N_1}{N} < 1$ ;  $N_1$  – количество атомов соответствующих расширенным состояниям;  $N$  – число атомов способствующих уровню (состоянию) хвоста,  $E_{v2}$  – энергия, соответствующая половине ширины валентных расширенных состояний. Таким образом, эффективная масса электрона в зоне проводимости равна 1,08 от массы покоя электрона и эффективная масса дырки в валентной зоне – 0,56 от массы покоя электрона.

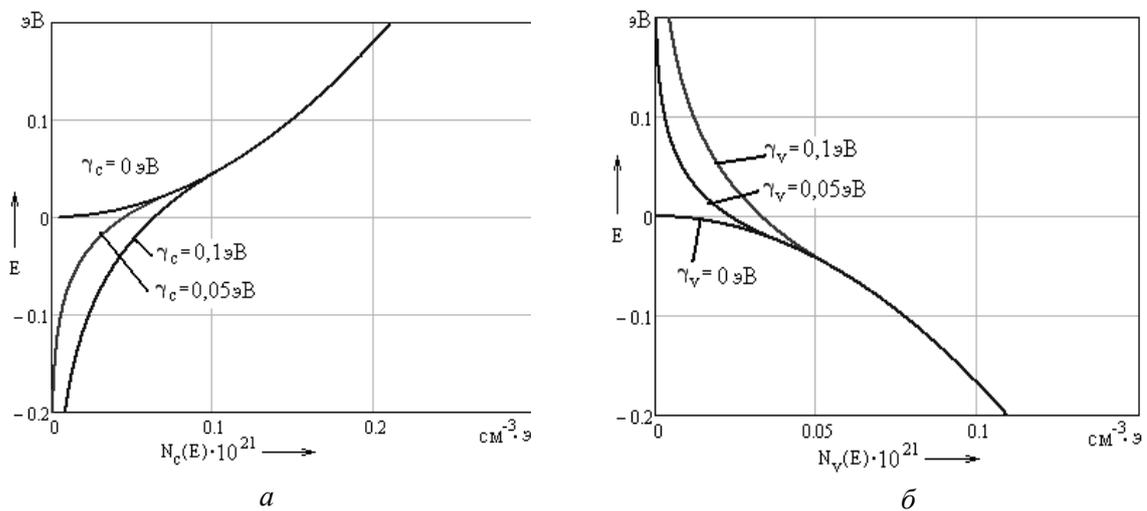


Рис. 2. Зависимости плотности состояний для: *a* – зоны проводимости и *б* – валентной зоны

### Распределение электронных состояний в аморфных полупроводниках

Обобщенная функция распределения плотности состояний при низких температурах в нелегированных или слабо легированных аморфных полупроводниках может быть записана как

$$J(\hbar \cdot \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} N_c(E) \cdot N_v(E - \hbar \cdot \omega) dE. \quad (5)$$

В целях облегчения расчетов вводится нормированная обобщенная функция распределения плотности состояний  $\xi(\hbar \cdot \omega)$

$$\xi(\hbar \cdot \omega) \equiv \frac{\pi^2 \cdot \hbar^3}{\sqrt{2} \cdot m_c^{*3/2}} \cdot \frac{\pi^2 \cdot \hbar^3}{\sqrt{2} \cdot m_v^{*3/2}} \cdot J(\hbar \cdot \omega) \quad (6)$$

Функции плотностей состояний в случае, когда  $\gamma_c \rightarrow 0$  и  $\gamma_v \rightarrow 0$

$$N_c(E) \rightarrow \frac{\sqrt{2} \cdot m_c^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \begin{cases} \sqrt{E - E_c}, \\ 0, E < E_c \end{cases}, \quad (7)$$

$$N_v(E) \rightarrow \frac{\sqrt{2} \cdot m_v^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \begin{cases} 0, E > E_v \\ \sqrt{E_v - E}, E \leq E_v \end{cases}. \quad (8)$$

Тогда функциональная зависимость для нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний  $\xi(\hbar \cdot \omega)$ :

$$\xi(\hbar \cdot \omega) \rightarrow \begin{cases} \frac{\pi}{8} \cdot (\hbar \cdot \omega - E_c + E_v)^2, \hbar \cdot \omega \geq E_c - E_v, \\ 0, \hbar \cdot \omega < E_c - E_v \end{cases}, \quad (9)$$

где  $E_c - E_v = E_{g0}$  – ширина запрещенной зоны, определяемая для аморфных полупроводников из закона Тауса (таусовская ширина запрещенной зоны).

Анализ зависимостей нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний от энергии фотонов проводится в двух диапазонах энергий  $\hbar \cdot \omega \leq E_{g0} + \frac{\gamma_c}{2} + \frac{\gamma_v}{2}$  и  $\hbar \cdot \omega \geq E_{g0} + \frac{\gamma_c}{2} + \frac{\gamma_v}{2}$ . Из уравнений (1), (2), (5) и (6) находятся функциональные зависимости  $\xi(\hbar \cdot \omega)$  для произвольных значений степеней разупорядоченности. На рис. 3 приведены результаты расчета зависимости  $\xi(\hbar \cdot \omega)$  для случая  $\gamma_c = \gamma_v$  и значения таусовской ширины запрещенной зоны 1.85 эВ. На рис. 4 приведены результаты расчета спектральной зависимости  $\xi(\hbar \cdot \omega)$  для различных значений  $\gamma_c$  и  $\gamma_v$ . Как следует из анализа зависимостей хвост поглощения спектральной зависимости нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний вторгается в область запрещенной зоны и ширина этого хвоста растет с ростом степени разупорядоченности.

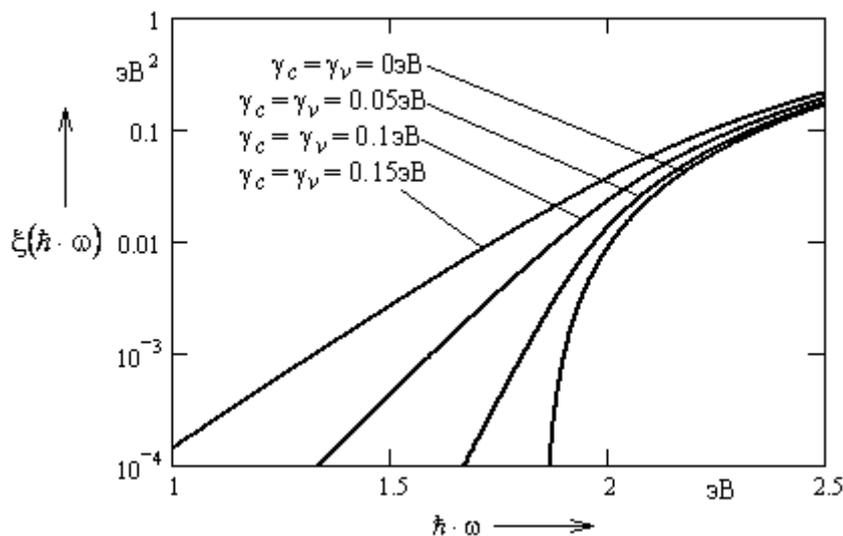


Рис. 3. Спектральные зависимости нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний для случая  $\gamma_c = \gamma_v$  и  $E_{g0} = 1.85 \text{ эВ}$

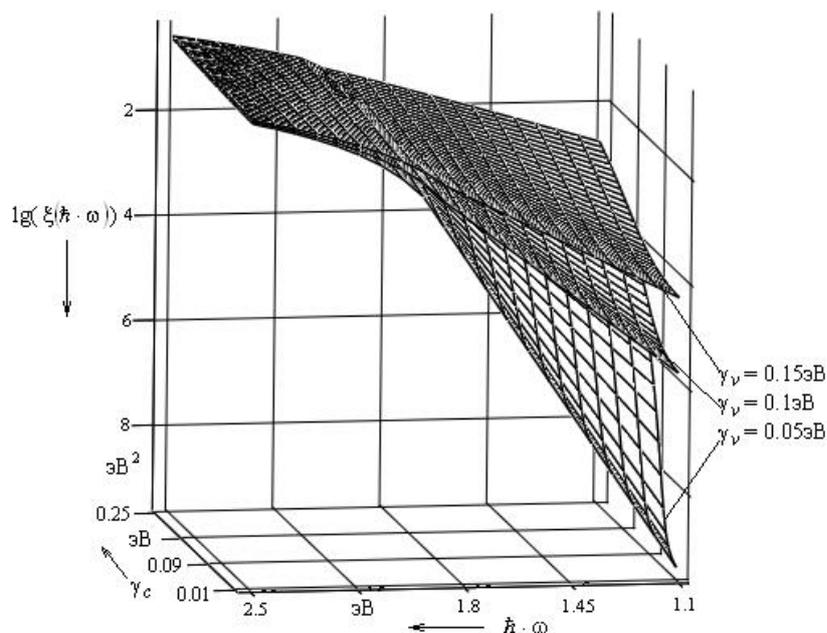


Рис. 4. Спектральные зависимости нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний

## Выводы

Таким образом, в работе описана эмпирическая модель спектральной зависимости нормированной обобщенной функции распределения плотности состояний для аморфного кремния с учетом степени разупорядоченности его структуры. Данная модель может быть использована для определения распределения плотностей электронных состояний при описании спектра оптического поглощения  $\alpha$ -Si:H. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [5 – 8].

**Список литературы:** 1. *Gordon Moore*. Lithography and the Future of Moore's Law. Proc. SPIE Vol. 2437, May 1995. 2. *Street, R. A.* Cambridge Solid State Science Series: Hydrogenated amorphous silicon. – Cambridge University Press., 1991. – 417p. 3. *Pavesi, L.* Will silicon be the photonic material of the third millenium? J. Phys.:Condens. Matter 15, 1169 (2003). 4. *Brendel, R.* Thin-film crystalline silicon solar cell – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim, 2003. – 300p. 5. *Tim Searle*. Properties of silicon and its alloys // INSPEC. The institution of electrical engineers, London, United Kingdom, 1998. – 425p. 6. *Jef Poortmans, Vladimir Arkhipov*. Thin Film solar cell: fabrication, characterization and applications // Wiley series in materials for electronic & optoelectronics application, 2006. – 504p. 7. *Bisi, O., Ossicini, S., Pavesi, L.* Porous silicon: a quantum sponge structure for silicon based optoelectronics. Surf. Sci. R 138, 1 (2000). 8. *Jha, A. R.* Solar cell technology and applications.– Taylor and Francis Group, LLC, 2010. – 280p.

Харьковский национальный  
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 05.05.2012