

4 Stromtransport in polykristallinen Halbleitern

Alle in dieser Arbeit hergestellten und untersuchten Schichten mit Ausnahme der homoepitaktisch abgeschiedenen Proben aus Kap. 10 sind polykristallin. In diesem Kapitel sollen daher kurz die verschiedenen Modell-Ansätze zur Beschreibung des Stromtransportes in solchen Schichten dargelegt werden, welche in Kap. 8 zur Interpretation der Messergebnisse verwendet werden.

Um die Leitfähigkeit und Ladungsträgerbeweglichkeit der untersuchten $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ -Schichten zu verstehen, müssen die Besonderheiten, die sich aus der Polykristallinität ergeben, berücksichtigt werden.

Als technologisch wichtigster polykristalliner Halbleiter wurde vor allem Silizium intensiv untersucht. Die Leitfähigkeit in polykristallinem Silizium ist für nicht zu hohe Dotierungen bei gleicher Dotierungskonzentration viel geringer als in einkristallinem Silizium. Für die Beschreibung von Ladungsträgerbeweglichkeit und Leitfähigkeit in polykristallinem p-Silizium entwickelte Seto das „Trapping“-Modell [65]. Dieses Modell wurde später erweitert, z. B. in [66-68], und für viele polykristalline Materialsysteme zur Beschreibung des elektrischen Transportverhaltens benutzt (z. B. Si [66, 69], GaAs [70], CdS [67], InP [71]). Nach diesem Modell befinden sich an den Korngrenzen Haftstellen („Traps“), deren Energieniveaus innerhalb der Bandlücke liegen. Im ursprünglichen Modell ging Seto von einer δ -förmigen Energieverteilung aus. Durch Dotierung entstandene freie Elektronen bzw. Löcher aus dem Korn werden in diesen Haftstellen eingefangen. Diese lokalen Ladungsträger werden kompensiert durch eine entgegengesetzt geladene Verarmungszone um die Korngrenze herum.

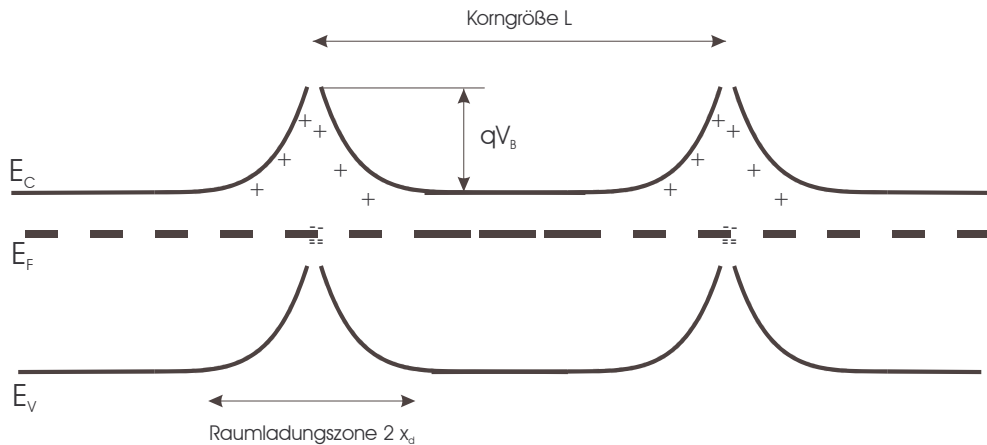


Fig. 4.1: Ausbildung einer Bandverbiegung in einem n-Halbleiter durch in den Korngrenzregionen eingefangene Elektronen und Kompensation durch positiv geladene Raumladungszone.

Nach der Poissongleichung führt diese Ladungstrennung zu einem Potential V , das zu einer Bandverbiegung an den Korngrenzen führt, und als Barriere für den Stromtransport wirkt. Klassisch betrachtet, üben die in den Korngrenzen lokalisierten Ladungsträger eine repulsive Kraft auf die freien Ladungsträger im Korn aus. Aus der eindimensionalen Poissongleichung

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{e_0 N}{\epsilon} \quad (4.1)$$

folgt für das maximale Potential bzw. die Barrierenhöhe V_B bei einer Dotierkonzentration N und einer Breite der Raumladungszone x_d :

$$V_B = \frac{qN}{2\epsilon} x_d^2 \quad (4.2)$$

Die Breite der Raumladungszone x_d hängt ab von der Dotierkonzentration N , der Anzahl der Haftstellen pro Flächeneinheit N_T und deren energetischer Lage. Liegt das Energieniveau mehrere kT vom Majoritätsladungsträgerband entfernt, werden quasi alle freien Ladungsträger eingefangen, bis entweder die Anzahl der von den Dotierungsatomen bereitgestellten Ladungsträger erschöpft ist, oder alle Trapzustände besetzt sind.

Der erste Fall tritt bei niedriger Dotierung ein, wenn die Anzahl der Ladungsträger pro Flächeneinheit $N \cdot L$ im Korn der Länge L kleiner ist als N_T . Das Korn ist dann vollständig an freien Ladungsträgern verarmt und die Raumladungszone hat beiderseits der Korngrenze eine Breite von $x_d = L/2$. Eingesetzt in Gl. 4.2 ergibt sich damit die mit der Dotierkonzentration linear ansteigende Barrierenhöhe

$$V_B = \frac{qL^2}{8\epsilon} N \propto N \quad \text{für} \quad N^*L < N_T \quad (4.3)$$

Für den Fall hoher Dotierung mit $N^*L > N_T$ verbleiben nach Füllung aller Haftstellen neutrale Regionen im Inneren des Kornes. Die Raumladungszone hat dann eine Breite von $x_d = N_T/2N$ und für die mit der Dotierkonzentration reziprok fallende Barrierenhöhe gilt:

$$V_B = \frac{qN_T^2}{8\epsilon N} \propto \frac{1}{N} \quad \text{für} \quad N^*L > N_T \quad (4.4)$$

Die Barrierenhöhe hat somit bei einer Dotierkonzentration $N = N_T/L$ ein Maximum von

$$V_B = \frac{qLN_T}{8\epsilon} \quad \text{bei} \quad N^*L = N_T \quad .$$

Der Stromtransport über eine hinreichend breite Barriere kann als thermische Emission von Ladungsträgern über die Korngrenzbarriere in beide Richtungen beschrieben werden. Eine angelegte Spannung fällt hauptsächlich an den Korngrenzen ab. Dadurch wird auf der einen Seite der Korngrenze die Barriere für die Elektronen erhöht, auf der anderen Seite erniedrigt, und es entsteht eine Differenz zwischen Vorwärtsstrom J_F und Rückstrom J_R , was einen Nettostrom

$$J = J_F - J_R = qnv_c \left[\left(e^{-\frac{q}{kT} \left(V_B - \frac{1}{2}V_G \right)} \right) - \left(e^{-\frac{q}{kT} \left(V_B + \frac{1}{2}V_G \right)} \right) \right] \quad \text{mit } v_c = \sqrt{kT / 2\pi m^*} \quad (4.5)$$

bewirkt. Dabei ist V_G die über eine Korngrenze abfallende Spannung und, wobei angenommen wurde, daß sich der Spannungsabfall gleichmäßig auf beide Seiten der Korngrenze verteilt. Ist dieser Spannungsabfall klein gegen die thermische Energie ($1/2V_G \ll kT$) läßt sich Gl. 4.5 mit der linearen Beziehung zwischen Strom und Spannung

$$J = \frac{q^2 n v_c}{kT} e^{\left(-\frac{qV_B}{kT} \right)} V_G$$

annähern. Für die über viele Körner gemittelte Leitfähigkeit bzw. Hall-Beweglichkeit ergibt sich daraus:

$$\sigma = \frac{qnM}{\sqrt{T}} e^{-\frac{qV_B}{kT}} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{M}{\sqrt{T}} e^{-\frac{qV_B}{kT}} \quad \text{mit} \quad M = \frac{qL}{k} \sqrt{\frac{k}{2\pi m^*}} . \quad (4.6)$$

Leitfähigkeit und Beweglichkeit sind also aktivierte Prozesse, deren Aktivierungsenergie durch die Barrierenhöhe zwischen den Korngrenzen bestimmt wird.

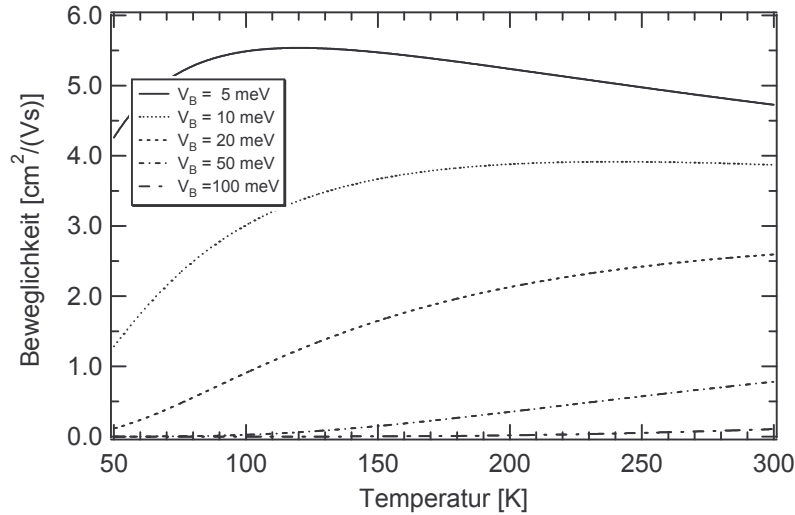


Fig. 4.2: Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit nach Gl. 4.6 für unterschiedliche Barrierenhöhen mit $M = 100 \text{ cm}^2/(\text{Vs})\text{K}^{1/2}$.

Werner betrachtete in [68] den Fall einer räumlichen Variation der Barrierenhöhe, bedingt durch Inhomogenitäten an den Korngrenzen und unterschiedlicher Korngrößen in einem Film. Er nahm eine gaußförmige Verteilung der Barrierenhöhen V_B mit dem Mittelwert \bar{V}_B und einer Standardabweichung σ_{V_B} an. Der Stromtransport findet stärker über die Korngrenzen mit kleineren Barrierenhöhen statt. Bei kleiner werdender Temperatur verstärkt sich der relative Anteil der kleineren Barrieren am Stromtransport. Setzt man in Gl. 4.5 für V_B eine Gaußverteilung ein und integriert über die Energie, dann bleibt die Form der Gleichung 4.5 erhalten durch Einführung einer effektiven Barrierenhöhe $V_{\text{eff}}(T)$, die kleiner als die mittlere Barrierenhöhe ist. Für diese effektive Barrierenhöhe gilt [68]:

$$V_{\text{eff}}(T) = \bar{V} - \frac{\sigma_{V_B}^2}{2kT/q} . \quad (4.7)$$

Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit wird dann beschrieben durch:

$$\mu = \frac{qv_c L}{kT} e^{-\frac{q \left(\bar{V}_B - \frac{\sigma_{V_B}^2}{2kT/q} \right)}{kT}} \quad (4.8)$$

Die Temperaturabhängigkeit der effektiven Barrierenhöhe führt bei Auftragung von $\text{Log}(\mu)$ über der inversen Temperatur zu einer Abflachung der Kurve bei tiefen Temperaturen (Fig. 4.3).

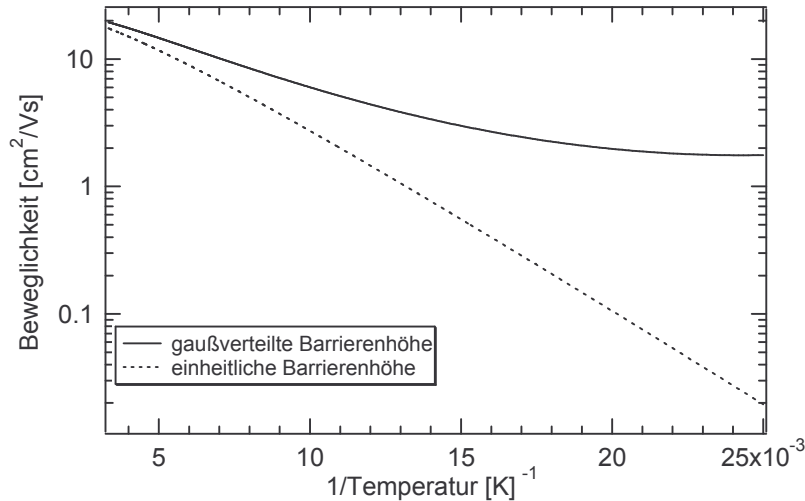


Fig. 4.3: Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit bei Annahme von gaussverteilten Barrierenhöhen nach Werner ($\bar{V}_B = 30\text{mV}$, $\sigma_{V_B} = 10\text{ mV}$) und einheitlichen Barrierenhöhen nach Seto ($V_B = 30\text{ mV}$).

Garcia-Cuenca et al. erweiterten das Seto-Modell für die Interpretation ihrer Hall- und Leitfähigkeitsmessungen an polykristallinen CdS-Filmen [67]. Sie gingen ebenfalls von einer δ -förmigen Energieverteilung der Trapzustände bei der Energie E_T aus, und berücksichtigten den Fall, daß durch die Füllung der Trapzustände und die daraus entstehende Bandverbiegung die Trapzustände in den Bereich der Fermienergie gehoben und trotz noch vorhandener freier Majoritätsladungsträger diese nicht mehr vollständig besetzt werden. Zusätzlich berücksichtigten sie neben der thermischen Emission über die Barriere den Tunnelstrom durch die Barriere. Da dieser außer von der Barrierenhöhe von der Breite der zu durchtunnelnden Barriere abhängt, wurde neben der Breite der Verarmungszone x_d auch eine endliche Breite a der Korngrenzregion, in der sich die getrappten Ladungsträger befinden, in das Modell einbezogen. Die Barrierenhöhe steigt im Zentrum der Grenzregion auf den Wert

$$V'_B = V_B (1 + a/x_d) \quad (4.9)$$

Die Analyse ergab, daß das vom Modell Setos vorhergesagte Maximum der Barrierenhöhe bei $N^*L = N_T$ nur bis Trapdichten $N_T \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ vorkommt. Die Barrierenhöhe steigt bei höheren Trapdichten zwar ebenfalls bei kleinen Dotierungskonzentrationen mit N an, bei weiterem Ladungsträgereinfang werden die Trapzustände aber an das Fermi-Niveau gehoben und es kommt schon vor vollständiger Füllung der Trapzustände zur Ausbildung neutraler Bereiche in der Kornmitte, die mit zunehmender Dotierungskonzentration größer werden. Der Übergang von vollständiger zu partieller Verarmung der Körner geschieht bei der Dotierkonzentration N_m , die für hohe Werte von N_T angenähert werden kann durch:

$$N_m = \frac{8\epsilon kT}{q^2 L^2} \left[-\frac{E_T}{kT} + \ln \left(\frac{2N_T}{LN_C} \right) \right] \quad (4.10)$$

Der Besetzungsgrad der Trapzustände wird bestimmt durch den Abstand des Fermi-Niveaus E_F von $(E_T + qV_B')$. Aus der Neutralitätsbedingung

$$2Nx_d = N_T \left[1 + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{E_T + qV_B' - E_F}{kT} \right) \right]^{-1} \quad (4.11)$$

kann in einer iterativen Prozedur die Breite der Verarmungszone x_d , und daraus die Barrierenhöhen bestimmt werden. Die Position des Fermi-Niveaus wird aus der Beziehung

$$N = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{W} dW}{1 + \exp(W - \eta)} = N_C F_{1/2}(\eta) \quad (4.12)$$

mit $W = (E - E_C)/k_B T$ und $\eta = (E_f - E_C)/k_B T$ bestimmt. $F_{1/2}(\eta)$ ist das Fermi-Integral und findet sich tabelliert in Büchern.

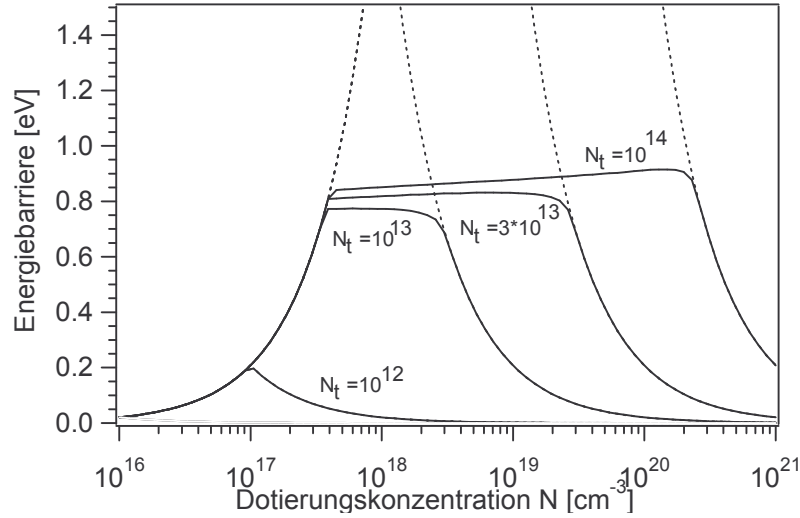


Fig. 4.4: Maximale Energiebarrierenhöhe in der Verarmungszone des Korns qV_B in Abhängigkeit von der Dotierungskonzentration für verschiedene Trapdichten nach dem Model von Garcia-Cuenca [67], berechnet für Pyrit mit $m^* = 1.1 m_e$, $L = 100 \text{ nm}$ (durchgezogene Linien) und Seto (gestrichelte Linien).

Die Barrierenhöhe steigt nach Erreichen von N_m nur noch leicht an, bevor sie dann nach vollständiger Füllung der Trapzustände bei hohen Dotierungen wieder abfällt. Wird die Leitfähigkeit durch die Barrieren limitiert und ist der Spannungsabfall über eine Barriere klein gegen die thermische Energie ($q\Delta V \ll kT$), so ist die Leitfähigkeit in der WKB-Näherung gegeben durch [72]:

$$\sigma = \frac{LqA^*}{k^2} \left(\int_0^{\phi_B'} f(E) e^{-\alpha(E)} dE + \int_{\phi_B}^{\infty} f(E) dE \right). \quad (4.13)$$

A^* ist die effektive Richardsonkonstante und $f(E)$ die Fermi-Dirac-Verteilung:

$$f(e) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{kT}}}. \quad (4.14)$$

Der erste Integralterm in Gl. 4.13 beschreibt den Tunnelstrom durch die Barriere, der zweite Term beschreibt die thermische Emission über die Barriere. $\alpha(E)$ beschreibt die Transmissionswahrscheinlichkeit und ist gegeben durch [72]:

$$\alpha = \frac{4\pi\sqrt{2m^*}}{h} \left[(x_d + a)\sqrt{\phi_B - E} - \frac{x_d E}{\sqrt{\phi_B}} \ln \frac{\sqrt{\phi_B} + \sqrt{\phi_B - E}}{\sqrt{E}} + \sqrt{\frac{ax_d}{\phi_B}} (\phi_B' - E) \sin^{-1} \left(\frac{a\phi_B}{x_d(\phi_B' - E)} \right)^{1/2} \right]$$

für $0 \leq E \leq \phi_B$ und

$$\alpha = \frac{2\pi^2 \sqrt{2m^*}}{h} \sqrt{\frac{\alpha x_d}{\phi_B}} (\phi_B' - E)$$

für $\phi_B \leq E \leq \phi_B'$.

Die thermische Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit E_σ entspricht bei moderaten Dotierungen wie im Modell Setos der Barrierenhöhe. Der Beitrag des Tunnelstroms wird jedoch bei Raumtemperatur für ca. $N > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dominant gegenüber der thermischen Emission. In diesem Fall wird E_σ kleiner als die Barrierenhöhe. Die Anwendung dieses Modells auf den Ladungstransport in Pyrit zeigt, daß auch hier bei hohen Dotierungen mit der Dominanz des Tunnelstroms zu rechnen ist.

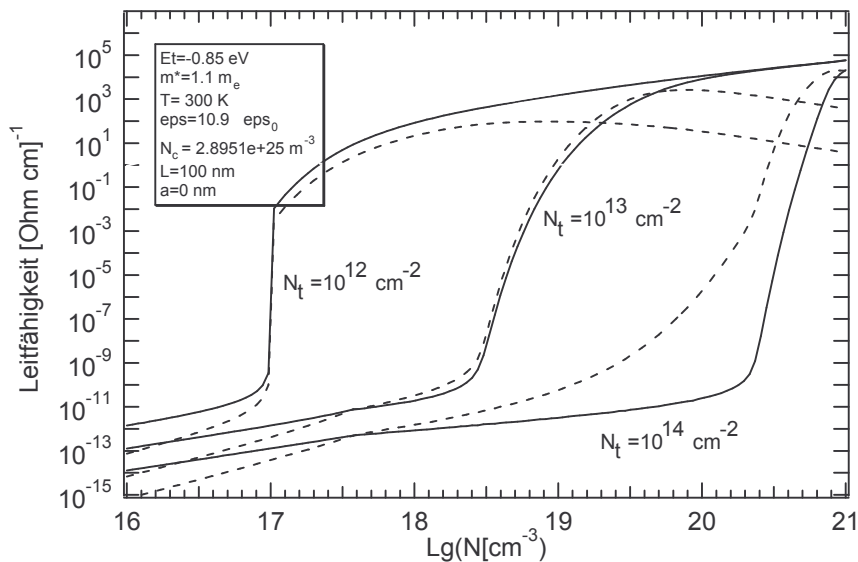


Fig. 4.5 Anteil des Tunnelstroms (gestrichelt) und der thermischen Emission (durchgezogen) an der Leitfähigkeit für Pyrit nach dem Modell von Garcia-Cuenca für unterschiedliche Trap-Konzentrationen

Für Indium-dotiertes polykristallines CdS ermittelte Garcia-Cuenca durch Anpassen der Modellparameter an temperaturabhängige Leitfähigkeitsmessungen die Lage der Trapzustände bei ca. $E_T = 400 \text{ meV}$ unterhalb der Leitungsbandkante [73]. Die Trapdichte stieg mit zunehmender Dotierkonzentration von $N_t = 1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ bei $n = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ bis $N_t = 3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ bei $n = 5.6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Ein ähnlicher Anstieg der Trapdichte mit der Dotierkonzentration wurde auch schon vorher von Yang et al. in Filmen aus polykristallinem GaAs beobachtet [70]. In dieser Arbeit wird außerdem bei GaAs eine Abhängigkeit der Trapdichte vom Ladungsträgertyp – höhere Trapdichten bei n-Material – beobachtet.