



Estudio Comparativo de la Densidad de Estados en Muestras de Silicio Microcristalino Obtenida a Través del Método de Conductividad Térmicamente Estimulada y Técnicas de Fotoconductividad Modulada

A. Dussan¹, J. A. Schmidt² and R. R. Koropecski²

¹Dpto. Física – Universidad Nacional de Colombia – Bogotá

²CONICET (INTEC – UNL) Güemes 3450 (3000) Santa Fe, Argentina

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 16 de Jun. 2008; Publicado en línea 25 de Jul. 2008.

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio de la densidad de estados (DOS) obtenida en muestras de silicio microcristalino dopadas con Boro [$\mu\text{-Si:H}$ (B)] a través del método de conductividad térmicamente estimulada (TSC) y comparada con los resultados obtenidos a partir de los métodos de fotoconductividad modulada. Para explicar la discrepancia entre la DOS obtenida por TSC y la obtenida por los otros métodos, se muestra, a partir de simulaciones, que la DOS es sensible al error experimental introducido en el cálculo del producto $\mu_n\tau_n$ (movilidad del electrón \times tiempo de vida del electrón). El método TSC se aplica aquí por primera vez a muestras de $\mu\text{-Si:H}$ para calcular la densidad de estados de defecto en la banda prohibida del material.

Palabras claves: DOS, TSC, Películas delgadas.

Abstract

In this work density of states (DOS) was obtained on boron-doped microcrystalline silicon samples [$\mu\text{-Si:H}$ (B)] from the thermally stimulated conductivity (TSC) technique and compared with results obtained by the modulated photoconductivity methods. To explain the poor agreement between the DOS obtained from the TSC and the other methods, it is shown by means of numerical simulations that the DOS is very sensitive to experimental errors introduced in the calculation of the $\mu_n\tau_n$ product (mobility of electron \times lifetime of the electron). The TSC method is applied here for the first time to calculate the density of defect states in the forbidden band of $\mu\text{-Si:H}$ samples.

Key Words: DOS, TSC, Thin Films.

© 2008 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

Las propiedades opto-electrónicas y de transporte del silicio microcristalino hidrogenado ($\mu\text{-Si:H}$) son fuertemente afectadas por los estados localizados en la banda de energía prohibida (*gap*). Algunas de las técnicas experimentales que han sido utilizadas para la medición de la DOS en el *gap* del silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H)[1] se han aplicado también al $\mu\text{-Si:H}$. [2] En trabajos anteriores hemos obtenido la DOS a partir del método de la Fotoconductividad Modulada (MPC)[3], y del Método MPC en el Régimen de Recombinación (RRMPC)[4], encontrando una correlación

entre el nivel de doping en el material y la DOS para la región del *sub-gap*. En este trabajo se presenta un estudio de las mediciones de la DOS en muestras de $\mu\text{-Si:H}$ dopadas con Boro a partir del método TSC. Con base en simulaciones numéricas de experimentos de TSC y fotoconductividad en el estado estacionario, presentadas en trabajos anteriores [5], se muestra que la DOS es sensible al error experimental introducido en el cálculo de $\mu\tau$.

2. Metodología Experimental

Las muestras fueron preparadas en un reactor de PECVD con acoplamiento capacitivo operado a una frecuencia de 50MHz, cuyas características fueron descritas en un trabajo anterior.[6] Se empleó vidrio Corning 7059 como sustrato a una temperatura de 160 °C. Se usó una mezcla de 94 % de hidrógeno – 6 % de silano con un flujo total de 20 sccm. La concentración de B₂H₆ en fase gaseosa fue variada entre 0 y 100 ppm relativa al flujo de silano.

Para las medidas de conductividad (σ) se depositaron contactos de aluminio interdigitados usando técnicas fotolitográficas, separados 0.01 cm y de longitud total 25 cm. La temperatura inicial de las muestras en las mediciones de σ fue de alrededor de 120 K. Para las medidas de la conductividad térmicamente estimulada (σ_{TSC}) las muestras fueron iluminadas con un láser de He-Ne de 10 mW durante un tiempo de 10 minutos. El campo eléctrico aplicado fue de 1×10^3 V cm⁻¹ y se midió la corriente térmicamente estimulada mientras se calentaba la muestra a oscuras a una velocidad constante de 1.5 K/min. El producto $\mu \cdot \tau$ se evaluó usando el método de la fotoconductividad ajustada a la conductividad térmicamente estimulada (PMTSC).[7]

3. Resultados y Análisis

En la figura 1-a, se presenta la curva de la conductividad a oscuras (σ_{osc} , línea a trazos) obtenida para la muestra de μ c-Si:H dopada con 25 ppm de B₂H₆, junto con la medición de la conductividad realizada luego de que la muestra fue expuesta a la luz y dejada a oscuras por el mismo tiempo (TSC, línea continua). Se puede observar que para $T = 72$ °C las curvas de TSC y σ_{osc} se unen y presentan el mismo comportamiento en el rango de mayores temperaturas. Esto se debe a que, por encima de esta temperatura (llamada temperatura de Fermi, T_F) toda la carga atrapada ya fue liberada. El valor de T_F depende de las propiedades del material, y para el caso del a-Si:H se encuentra alrededor de temperatura ambiente.[8]

La σ_{TSC} se obtiene a partir de la resta entre la TSC y la conductividad a oscuras. El pico para la región de altas temperaturas presente en nuestro material (figura 1-b) aparece debido a la liberación de carga atrapada. La DOS se obtiene a partir de la σ_{TSC} mediante la expresión [5]:

$$\sigma_{TSC} = e \cdot f(\epsilon_m, T_0) \cdot \mu\tau(T) \cdot g(\epsilon_m) \cdot \frac{d|\epsilon_m|}{dt} \quad (1)$$

donde e es la carga electrónica, $g(\epsilon_m)$ es la densidad de estados para la energía ϵ_m , y $f(\epsilon_m, T_0)$ representa la probabilidad de ocupación inicial para la energía ϵ_m , la que por lo general se toma igual a la unidad. La variación de ϵ_m puede evaluarse a través de:

$$\epsilon_m(T) = -0.967 \cdot K_B T \cdot \ln\left(52 \frac{v_{efect}}{\beta}\right) + 0.017 \quad (2)$$

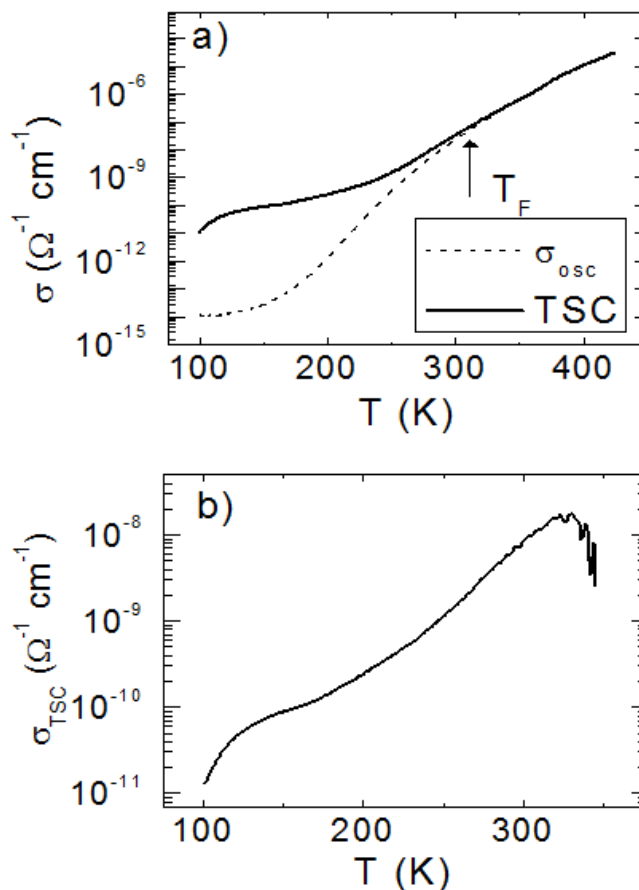


Fig. 1. Mediciones experimentales a partir del método TSC para una muestra de μ c-Si:H dopada con 25 ppm de B₂H₆. a) TSC y conductividad a oscuras medidas en función de la temperatura. La Temperatura de Fermi se indica con una flecha. b) σ_{TSC} obtenida a partir de la diferencia entre la TSC y la conductividad a oscuras mostrada en a).

donde K_B es la constante de Boltzman, v_{efect} la frecuencia de intento de escape y β la velocidad de calentamiento de la muestra durante la medición.

En la figura 2 se presenta el espectro de la DOS obtenida a partir del método TSC para las muestras de μ c-Si:H de 25 ppm y 50 ppm. Se puede observar claramente que la DOS obtenida por el método TSC para ambas muestras es significativamente mayor a las DOS encontradas a partir de los métodos de MPC y RRMPC, donde las DOS presentan un buen acuerdo entre sí. Se aprecia, en forma comparativa, que la DOS obtenida por el método TSC introduce una falsa idea acerca de la distribución de estados defectos en el *gap* del material y por lo tanto un concepto erróneo sobre su calidad para aplicaciones tecnológicas.

Con el fin de analizar más en detalle el origen de la discrepancia para la DOS de las muestras, se estudió la influencia que tiene en los resultados finales el error en la determinación del producto $\mu \cdot \tau$. Para ello se utilizaron las simulaciones numéricas del experimento de TSC presentadas por Schmidt *et al.*[5], en las que se resuelven las ecuaciones

diferenciales que gobiernan la evolución de la carga libre y atrapada en función del tiempo. Teniendo en cuenta la imprecisión en la obtención del parámetro $\mu\tau$, se realizaron simulaciones del experimento de TSC introduciendo aleatoriamente una dispersión del 10% en el rango de medición $T > 150\text{K}$ (ver Fig. 3-a). Posteriormente los datos obtenidos fueron ajustados por un polinomio de tercer orden, y este polinomio fue usado para reconstruir la DOS (ver Fig. 3-b). De manera similar se realizaron variaciones en $\mu\tau$ del 20% y el 100% para el rango de temperaturas mayor a 150 K.

Conclusiones

En este trabajo se ha presentado un estudio de la DOS obtenida a través de la aplicación del método TSC a películas delgadas de $\mu\text{-Si:H}$ dopadas con Boro. Basados en simulaciones del experimento de TSC se muestra que la DOS es muy sensible al error experimental introducido en el cálculo del producto $\mu_n\tau_n$.

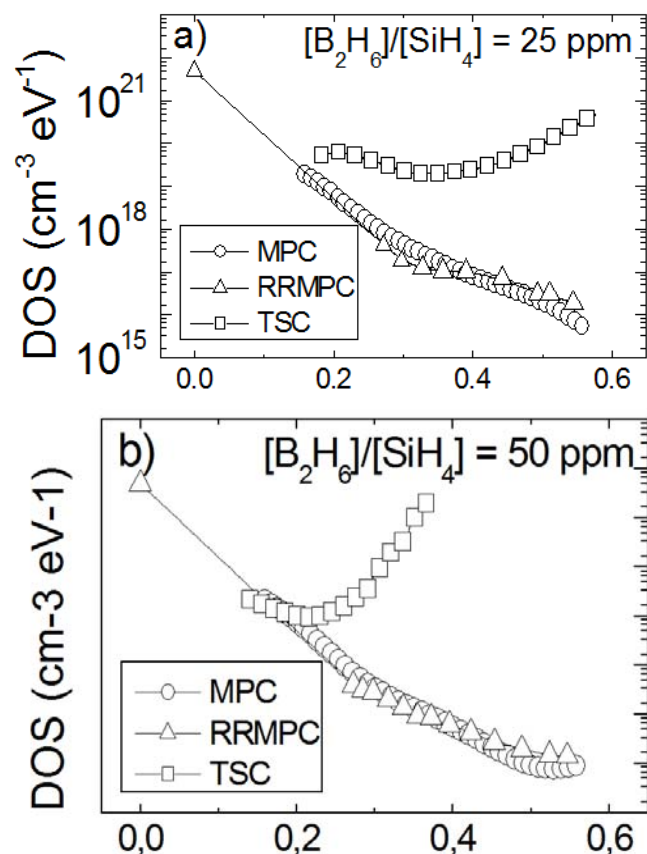


Fig. 2. DOS obtenida a partir del método de TSC (cuadros) para muestras de $\mu\text{-Si:H}$ dopadas con 25 ppm (a) y 50 ppm (b). A manera de comparación se presenta la DOS obtenida por los métodos MPC (círculos) y RRMPC (triángulos) para cada muestra

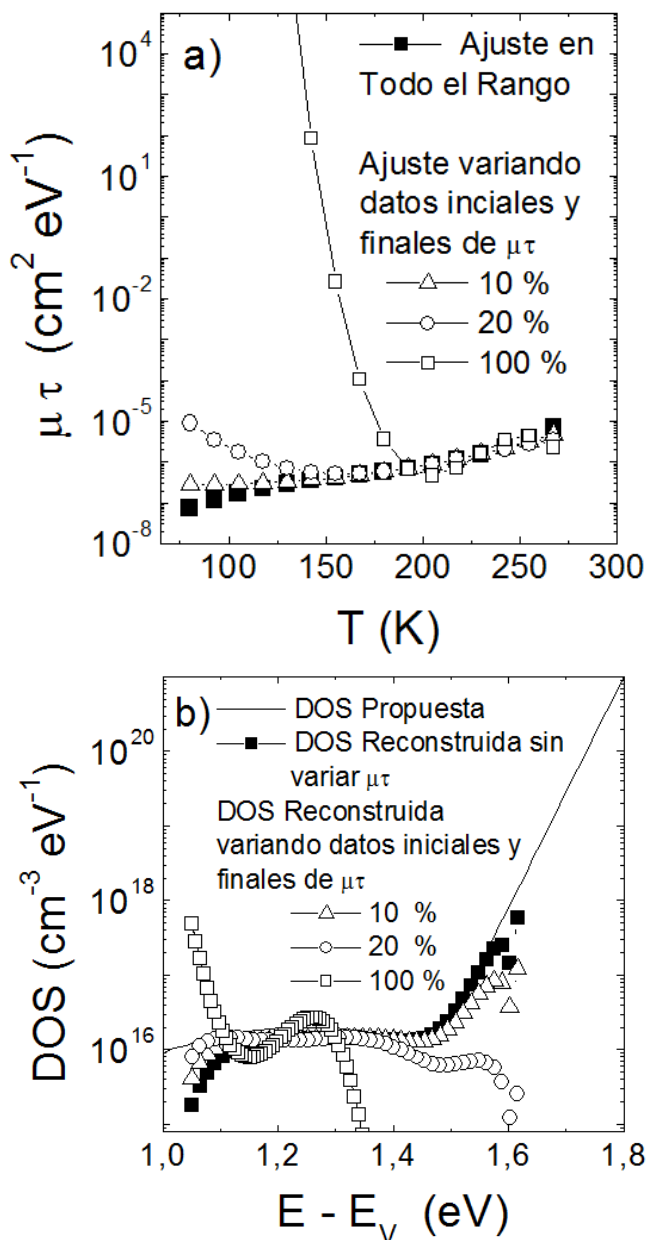


Fig. 3 (a) Espectros simulados de $\mu\tau$ variando el grado de dispersión de los datos con 10%, 20% y 100% para la región de temperaturas mayores a 150 K y (b) reconstrucción de la DOS propuesta para cada uno de los casos mostrados en la parte (a). Los cuadros sólidos representan los espectros simulados sin introducir algún grado de dispersión en la simulación.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado parcialmente con fondos de la ANPCyT (PICT 12-06950).

Referencias

- [1] S. Reynolds, C. Main, D. P. Webb, M. J. Rose, *Philos. Mag. B* **80** 547 (2000).
- [2] S. Sheng, X. Liao, G. Kong, *Appl. Phys. Lett.* **78** 2509 (2001).
- [3] A. Dussan, J. A. Schmidt, R. D. Arce y R. R. Koropecski, *Rev. Anales AFA V.13* 172-177 (2001).
- [4] R. R. Koropecski, J. A. Schmidt, and R. Arce, *J. Appl. Phys.*, **91**, 8965 (2002).
- [5] J.A. Schmidt, R. R. Koropecski, R. Arce, A. Dussan, and R. H Buitrago, *J. Non-Cryst. Solids* **338-340** 322 (2004).
- [6] S. B. Concari, R. H. Buitrago, M. T. Gutierrez, and J. J. Gandia, *J. Appl. Phys.* **94**, 2417 (2003).
- [7] M. Zhu, M. B. Von Der Linden, J. Bezemer, R. E. I. Schropp, W. F. Van Der Weg, *J. Non-Cryst. Solids* **137-138** 355 (1991).
- [8] M. von der Linden, Tesis: "Electronic defects in amorphous silicon materials and devices" Universiteit Utrecht, 1994.