

Władysław TOMASZEWICZ i Piotr GRYGIEL

*Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechnika Gdańska,
80-952 Gdańsk, ul. G. Narutowicza 11/12*

Wpływ nierównomierności grubości próbek na prądy TOF oraz TSC

Streszczenie

W komunikacie zbadano wpływ nierównomierności grubości próbek na przebiegi natężenia prądu, rejestrowane metodami czasu przelotu (time-of-flight, TOF), oraz termicznie stymulowanych prądów (thermally stimulated currents, TSC). Wyniki analityczne porównano z rezultatami symulacji prądów TOF i TSC metodą Monte Carlo dla jednorodnego i gaussowskiego rozkładu nierównomierności grubości próbek, uzyskując zadowalającą zgodność.

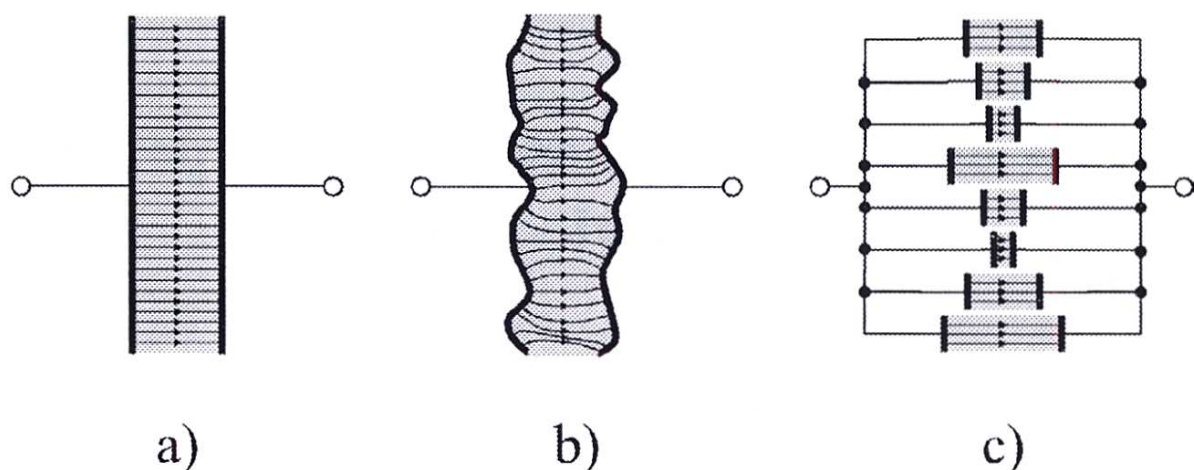
Wstęp

Teoretyczny opis zjawisk, związanych z transportem nadmiarowych nośników ładunku w próbce z elektrodami typu „sandwich”, opiera się zwykle na założeniu, że powierzchnie próbki są idealnie płaskie i równoległe do siebie, co implikuje jednorodny rozkład pola elektrycznego w próbce (rys. 1a). W przypadku bardzo cienkich warstw, o grubości rzędu $1\ \mu\text{m}$ lub mniejszej, wpływ niejednorodności pola elektrycznego, spowodowanych nierównomiernościami grubości warstw, na transport nośników może mieć jednak istotne znaczenie. Zagadnienie to było dotychczas badane w przypadku stacjonarnych prądów iniekcyjnych [1] i modulowanych fotoprądów [2]. W obecnym komunikacie rozpatrzmy wpływ nierównomierności grubości próbek na prądy TOF i TSC.

Analityczne rezultaty

Ścisłe obliczenie prądów TOF i TSC w próbce z nierównymi powierzchniami wydaje się trudne ze względu na skomplikowany rozkład pola elektrycznego (rys. 1b). W obecnych rozważaniach będziemy traktować rzeczywistą próbkę jako populację połączonych równoległe „mikropróbek” o różnych grubościach L , scharakteryzowaną gęstością prawdopodobieństwa $h(L)$ (rys. 1c). Całkowite

natężenie prądu jest wtedy równe sumie natężeń prądów płynących przez poszczególne „mikropróbkę”. Przyjmiemy, że rozkład pola elektrycznego wewnątrz każdej z „mikropróbek” jest jednorodny. Uogólnienie wzoru, określającego natężenie prądu przy pomiarach TOF i TSC dla dyspersyjnego transportu nośników [3-4], na przypadek próbki o nierównomiernej grubości ma wówczas postać:



Rys. 1. Idealna próbka (a), próbka z nierównymi powierzchniami (b) i jej model (c)

$$I(t) \approx Q_0 \frac{d}{dt} \int_0^{\infty} h(L) \frac{1 - \exp[-L^2 \Phi(t) / \mu_0 V]}{L^2 \Phi(t) / \mu_0 V} dL, \quad (1)$$

gdzie funkcja

$$\Phi(t) \approx C_t \int_{\varepsilon_0(t)}^{\infty} N_t(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2)$$

W powyższych wzorach t oznacza czas, Q_0 — całkowity wytworzony w próbce ładunek, μ_0 — ruchliwość swobodnych nośników, V — przyłożone napięcie, C_t — współczynnik wychwytu nośników, ε — głębokość pułapek mierzona od krawędzi pasma dozwolonego, $N_t(\varepsilon)$ — gęstość pułapek przypadająca na jednostkę energii. $\varepsilon_0(t)$ jest demarkacyjnym poziomem energii, który dla pomiarów TOF (stała temperatura próbki) i TSC (temperatura rosnąca liniowo z czasem) określają odpowiednio wzory:

$$\varepsilon_0(t) = kT \ln(1,8\nu_0 t), \quad (3)$$

$$\varepsilon_0(t) = k[c^* T(t) - T^*], \quad (4)$$

$$c^* = 0,967 \ln(45,9K \cdot \nu_0 / \beta), \quad T^* = 180K$$

(k — stała Boltzmanna, T — temperatura próbki, ν_0 — czynnik częstotliwościowy, β — prędkość ogrzewania próbki).

Całki we wzorze (1) nie można na ogół obliczyć analitycznie. Możemy jednak otrzymać przybliżone wzory, określające natężenie prądu w początkowym i końcowym przedziale czasu. Jeżeli $L^2\Phi(t)/\mu_0 V \gg 1$ dla prawie wszystkich L , wykładniczy składnik pod całką może być pominięty. Wtedy

$$I(t) \approx I_0 \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\Phi(t)} \right], \quad (5)$$

gdzie

$$I_0 = Q_0 \mu_0 V \int_0^\infty h(L) L^{-2} dL \quad (6)$$

jest natężeniem prądu w próbce bez stanów pułapkowych. W przeciwnym przypadku, gdy $L^2\Phi(t)/\mu_0 V \ll 1$, wykładnicza funkcja pod całką może być rozwinięta w szereg potęgowy. Wówczas

$$I(t) \approx c I_0 \tau_0^2 \left[-\frac{d\Phi(t)}{dt} \right], \quad (7)$$

gdzie stała

$$c = \frac{\langle L^2 / L_0^2 \rangle}{2 \langle L_0^2 / L^2 \rangle}. \quad (8)$$

Ukośne nawiasy oznaczają uśrednienie względem funkcji $h(L)$, $L_0 \equiv \langle L \rangle$ jest średnią grubością „mikropróbek”, a $\tau_0 = L_0^2 / \mu_0 V$ — czasem przelotu swobodnych nośników przez próbkę o grubości L_0 . Efektywny czas przelotu τ_e nośników przez próbkę odpowiada punktowi przecięcia krzywych, określonych wzorami (5) i (7) i jest dany równaniem

$$\tau_0 \Phi(\tau_e) = c^{1/2}. \quad (9)$$

Ponieważ funkcja $\Phi(t)$ monotonicznie maleje z czasem, wzory (5) i (7) stosują się odpowiednio dla $t \ll \tau_e$ i $t \gg \tau_e$. Wzory (5)-(9) są niemal identyczne z wzorami odnoszącymi się do idealnej próbki (w tym przypadku stała $c = 1/2$). Nierównomierności grubości próbki nie mają więc zasadniczego wpływu na przebieg natężenia prądu w początkowym i końcowym przedziale czasu.

Numeryczne rezultaty

W celu bardziej szczegółowego zbadania wpływu odstępstw od idealnej geometrii próbki na przebiegi natężenia prądu przeprowadziliśmy numeryczne

obliczenia $I(t)$ na podstawie wzorów (1)-(4) i (6) oraz, dla porównania, metodą Monte Carlo. Algorytmy symulacji Monte Carlo były zbliżone do opisanych w literaturze (np. [5-6]). Jedyną istotną różnicą polegała na losowej zmianie grubości L „mikropróbki” przy symulacji transportu kolejnych nośników, zgodnie z przyjętą postacią funkcji $h(L)$. Obliczenia zostały wykonane dla dwóch rozkładów grubości „mikropróbek”:

— jednorodnego rozkładu,

$$h(L) = \frac{1}{\Delta L}, \quad L_0 - \frac{\Delta L}{2} \leq L \leq L_0 + \frac{\Delta L}{2}, \quad (10)$$

$$\sigma = \Delta L / 2\sqrt{3},$$

— „obciętego” gaussowskiego rozkładu,

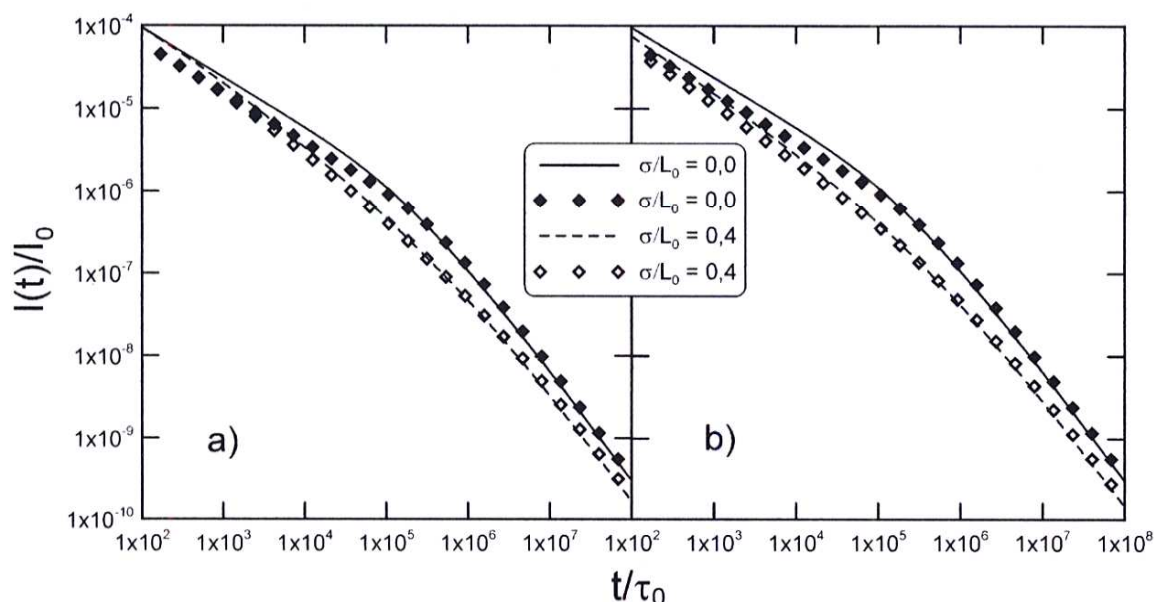
$$h(L) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(L-L_0)^2}{2\sigma^2}\right], \quad L \geq L_{\min}, \quad (11)$$

i wykładniczego rozkładu pułapek w przerwie energetycznej,

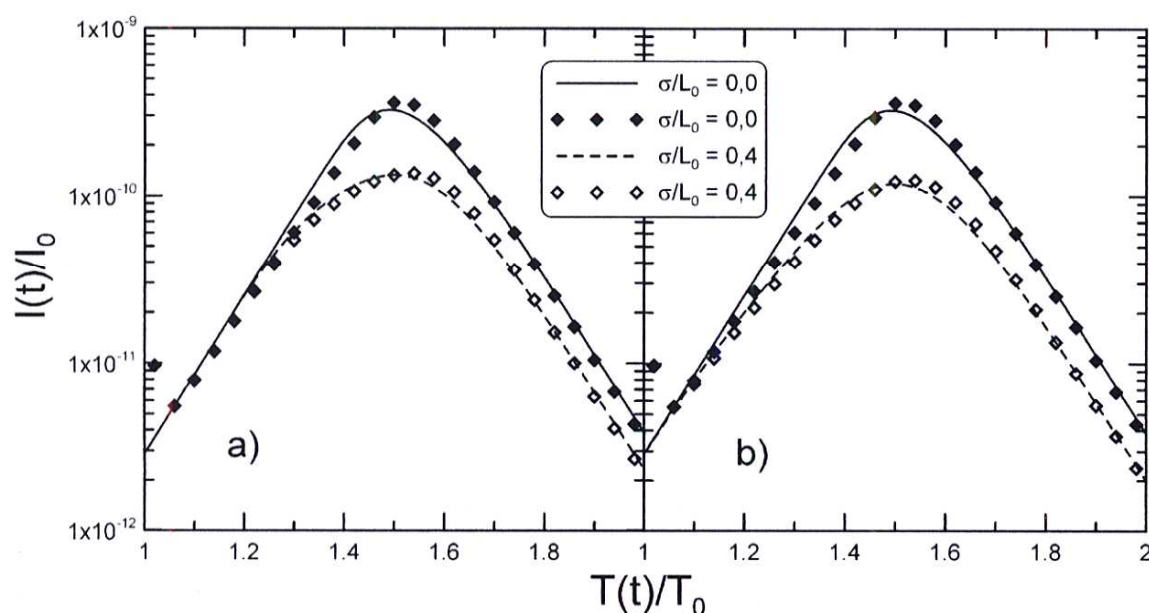
$$N_t(\varepsilon) = \frac{N_{tot}}{kT_c} \exp\left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_t^0}{kT_c}\right), \quad \varepsilon \geq \varepsilon_t^0. \quad (12)$$

W podanych wzorach σ jest odchyleniem standardowym grubości „mikropróbek”, N_{tot} — całkowitą gęstością pułapek, T_c — tzw. charakterystyczną temperaturą, określającą szybkość spadku gęstości pułapek ze wzrostem energii, ε_t^0 — minimalną głębokością pułapek.

Wykresy natężenia prądu, odpowiadające metodom TOF i TSC, są pokazane na rysunkach 2 i 3. Rezultaty otrzymane ze wzorów (1)-(4) i (6) są oznaczone liniami a wyniki symulacji Monte Carlo — punktami. Jest widoczne, że nierównomierności grubości próbki mają znaczny wpływ na kształt impulsów prądowych, za wyjątkiem początkowego i końcowego przedziału czasu. Przebiegi natężenia prądu, otrzymane dla jednorodnego i gaussowskiego rozkładu grubości „mikropróbek” nieco się różnią. Możemy jednak stwierdzić, że względne odchylenie standardowe ich grubości σ/L_0 jest głównym parametrem wpływającym na czasową zależność prądu. Widoczne są ponadto pewne różnice pomiędzy przebiegami natężenia prądu, obliczonymi analitycznie i otrzymanymi metodą Monte Carlo. Końcowy zanik natężenia prądu jest jednak prawie identyczny. Wspomniane różnice wynikają z przybliżonego charakteru podanych wzorów, których dokładność wzrasta, w miarę jak gęstość pułapek zmienia się coraz wolniej z energią (por. [4, 6]).



Rys. 2. Przebiegi prądu, odpowiadające metodzie TOF, dla jednorodnego (a) i gaussowskiego (b) rozkładu grubości „mikropróbek.” Parametry obliczeń: $C_t N_{\text{tot}} \tau_0 = 3,33 \cdot 10^2$, $v_0 \tau_0 = 1$, $T_c/T = 2,5$, $\varepsilon_i^0 = 0$, $L/L_{\text{min}} = 0,1$ (b)



Rys. 3. Przebiegi prądu, odpowiadające metodzie TSC, dla jednorodnego (a) i gaussowskiego (b) rozkładu grubości „mikropróbek.” Parametry obliczeń: $C_t N_{\text{tot}} \tau_0 = 2 \cdot 10^2$, $v_0 \tau_0 = 10^5$, $T_c/T_0 = 3$, $\varepsilon_i^0 = 30$, $\beta \tau_0/T_0 = 10^{-10}$, $T_0 = 100$ K, $L/L_{\text{min}} = 0,1$ (b). T_0 oznacza początkową temperaturę próbki

Wnioski

Przedstawione w komunikacie rezultaty pokazują, że nierównomierności grubości próbek mogą mieć znaczny wpływ na przebiegi natężenia prądów, rejestrowanych metodami TOF i TSC. Przy interpretacji wyników pomiarów w bardzo cienkich próbkach wskazana jest więc pewna ostrożność. Można zalecić określanie energetycznego rozkładu pułapek na podstawie końcowego

zaniku prądu, który, za wyjątkiem stałego czynnika, nie zależy od kształtu powierzchni próbki. Odpowiednie metody były omówione w pracach [3-4, 6].

Literatura

1. Novikov, S.V., *Macromol. Symp.*, **212**, 191 (2004).
2. Grygiel, P. i Tomaszewicz, W., *Proceedings of ISPCS'03*, 29 (Częstochowa, Polska 2003).
3. Arkhipov, V.I. i Rudenko, A.I., *Philos. Mag., B* **45**, 189 (1982).
4. Tomaszewicz, W. i Jachym, B., *J. Non-Cryst. Solids*, **65**, 193 (1984).
5. Marshall, J.M., *Philos. Mag.*, **36**, 95 (1977).
6. Tomaszewicz, W., *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**, 3967, 3985 (1992).