

# INTERPRETACIÓN DE LOS MECANISMOS DE TRANSPORTE EN SILICIO MICROCRISTALINO INTRÍNSECO Y DOPADO

**S. B. Concari<sup>1</sup>, R. H. Buitrago<sup>1,2</sup>**

<sup>(1)</sup>Departamento de Física - Facultad de Ingeniería Química (UNL) Stgo. del Estero 2829

<sup>(2)</sup>Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (CONICET - UNL) Güemes 3450

(3000) Santa Fe - Argentina

e-mail: [sconcari@fiqus.unl.edu.ar](mailto:sconcari@fiqus.unl.edu.ar)

Se realizaron medidas de conductividad en un gran número de películas delgadas de silicio microcristalino con características de semiconductor intrínseco y tipo *p* dopado con boro. En todas ellas la conductividad en función de la inversa de la temperatura presentó un comportamiento de los portadores térmicamente activado, con energías de activación constante en todo el rango estudiado. Siguiendo el método propuesto por Godet, se estableció que el mecanismo de transporte electrónico predominante para este conjunto de diferentes muestras es el de hopping de rango fonónico variable.

A partir del modelo de Godet y con ecuaciones clásicas de la Teoría de Percolaciones, se calculó la densidad de estados en el nivel de Fermi, obteniendo valores que son consistentes con los obtenidos en otros experimentos independientes.

Conductivity measurements of a great number of intrinsic microcrystalline Silicon thin films as well as *p* type doped with Boron were done. Conductivity as a function of the inverse of temperature showed a thermally activated behavior of electric carriers with constant activation energy in all the range studied. Following the method proposed by Godet, the predominant electronic transport mechanism for this group of different films was established, being a phononic variable range hopping.

Using classical equations of Percolation Theory, the density of states near the Fermi level was calculated obtaining values that are consistent with the results of other independent experiments.

## I. INTRODUCCIÓN

El silicio microcristalino ( $\mu\text{-Si}$ ) en forma de láminas delgadas depositado por técnicas de plasma en fase gaseosa, se presenta como un material promisorio en aplicaciones como celdas solares y dispositivos optoelectrónicos. Se ha probado que los filmes microcristalinos pueden reemplazar al silicio amorfo como material absorbedor en celdas solares de capas delgadas, mejorando sustancialmente su estabilidad en el tiempo y utilizando toda la tecnología desarrollada para estas láminas.

Como todo material nuevo es necesario profundizar el conocimiento de sus propiedades ópticas, estructurales y de transporte, lo que permitirá un mejor diseño de los dispositivos electrónicos.

En publicaciones previas se informó sobre mediciones de propiedades ópticas y estructurales<sup>1</sup>; en este trabajo se presentan resultados experimentales orientados a estudiar los posibles mecanismos de transporte electrónico de cargas en las láminas de silicio microcristalino, preparado en forma intrínseca bajo distintas condiciones y dopado con boro a diferentes concentraciones.

En materiales desordenados, tanto semiconductores como poliméricos, el transporte eléctrico se produce entre estados localizados y depende del nivel energético de dichos estados, de la forma de la Densidad de Estados

(DOS), del nivel de Fermi y de la temperatura. Al salto o tunelamiento de los portadores entre un estado ocupado a otro desocupado se conoce como "hopping". La energía involucrada puede corresponderse con la absorción de uno o más fonones.

Mott<sup>2</sup> estableció para el caso de transiciones por fonones de rango variable una dependencia de la conductividad con la temperatura de  $T^{-1/(d+1)}$ , donde  $d$  es la dimensión del espacio. En el caso tridimensional la conductividad  $\sigma$  puede expresarse según:

$$\sigma = \sigma_{00} \exp [(-T_0 / T)^{1/4}] \quad (1)$$

donde  $\sigma_{00}$  y  $T_0$  son constantes y  $T$  es la temperatura absoluta.

Este comportamiento se observa en una gran cantidad de materiales, y no sólo a bajas temperaturas y DOS constante, como fue la predicción original de Mott<sup>2</sup>, sino como en el caso de algunos polímeros, hasta 1000 K, por lo que la hipótesis de una distribución de la DOS independiente de la energía en la vecindad del nivel de Fermi debe descartarse, y considerar su forma.

Consideremos el parámetro de localización (LP) definido por:

$$LP = N(E_F) \cdot \gamma^{-3} \quad (2)$$

donde  $N(E_F)$  es la DOS en el nivel de Fermi (con una variación exponencial con la energía) y  $l/\gamma$  es la longitud de decaimiento o superposición de las funciones de onda. Godet<sup>3</sup> demostró que para un valor alto de LP (rango  $10^{-5} - 1$ ), si el mecanismo de transporte es de hopping monofonónico de rango variable, para una DOS de forma exponencial, debe existir una correlación lineal entre los parámetros  $Ln\sigma_{00}$  y  $To^{1/4}$ .

El parámetro de la pendiente  $To^{1/4}$  contiene información sobre la DOS. En la literatura se proponen diversas relaciones dependiendo del modelo. Utilizando un modelo teórico clásico de percolación<sup>4</sup>, tenemos:

$$To = 21,3 \cdot \gamma^2 / k \cdot g(E_F) \quad (3)$$

Ecuación de la que puede calcularse  $g(E_F)$  que es la DOS por unidad de energía, teniendo como parámetro de ajuste la longitud de decaimiento ( $l/\gamma$ ) de la función de onda electrónica para estados localizados. Esta longitud varía típicamente entre 3-30 Å.

## II. EXPERIMENTAL

Las láminas se depositaron sobre un sustrato de vidrio (Corning 7059) en un reactor de descarga luminiscente asistido por plasma (PECVD), de tipo capacitivo a una frecuencia de trabajo de 50 MHz. Los electrodos median 20 cm de diámetro y se encontraban separados 13 mm. Como gas de reacción se utilizó silano diluido en hidrógeno en el caso de los intrínsecos, y se agregó diborano para los dopados. La dilución del silano se varió de 2 a 6 % y la concentración de diborano respecto al silano desde 12 ppm a 1%.

La potencia de RF fue de 110 mW/cm<sup>2</sup>, el caudal de gases 40 sccm y la temperatura y presión 150 C y 60 Pa respectivamente.

En un criostato con rango de temperatura -100 a 200 C se midieron las conductividades utilizando una estructura de contactos planar.

## III. RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra la dependencia de la conductividad de silicio microcristalino preparado bajo distintas diluciones de hidrógeno con  $T^{-1/4}$ . El comportamiento es lineal para todas las muestras, aún cuando las características estructurales de tamaño de grano y fracción de cristalinidad varían sustancialmente desde una dilución 6% a 2%<sup>1</sup>.

En la Figura 2 también se muestra la dependencia de la conductividad con  $T^{-1/4}$  para las láminas de silicio microcristalino dopado con boro. Es de notar que el silicio microcristalino intrínseco es ligeramente de carácter  $n$ , al doparlo con pequeñas cantidades de boro (25 y 50 ppm) se produce un material compensado, con nivel de Fermi cerca del medio del gap, por lo que su resistividad es alta.

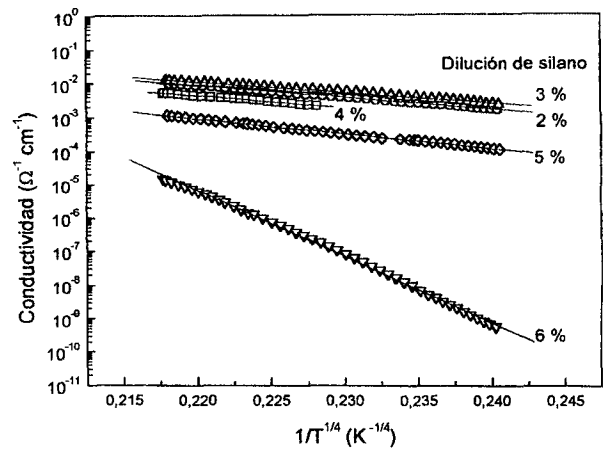


Figura 1: Conductividad en función de la temperatura para muestras intrínsecas. Las líneas llenas son ajustes para un modelo de hopping de rango variable.

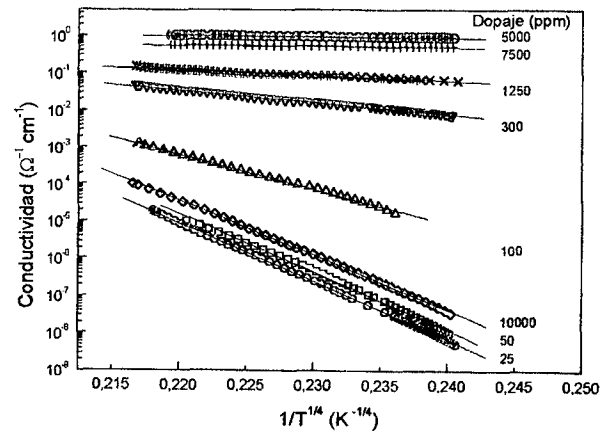


Figura 2: Conductividad en función de la temperatura para muestras dopadas tipo p. Las líneas llenas son ajustes para un modelo de hopping de rango variable.

A medida que aumenta el dopaje el material se convierte en tipo  $p$  y su conductividad aumenta en la misma medida que su cristalinidad y tamaño de grano<sup>1</sup>. Cuando la concentración de diborano en el gas reactivo alcanza valores cercanos al 1% respecto al silano, el exceso de boro induce un mayor desorden que el efecto de dopaje, conduciendo a un material amorfo.

A partir de las Figuras 1 y 2, se obtienen los valores de  $\sigma_{00}$  y  $To$ , los que se representan en las Figuras 3 y 4. Las relaciones entre los valores de  $\sigma_{00}$  y  $To$  pueden ajustarse con el modelo desarrollado por Godet<sup>3</sup>, quien demostró que si el mecanismo de transporte dominante es el de hopping de rango fonónico variable, y la DOS sobre el nivel de Fermi es exponencial, entonces hay una relación lineal entre  $Ln\sigma_{00}$  y  $To$ .

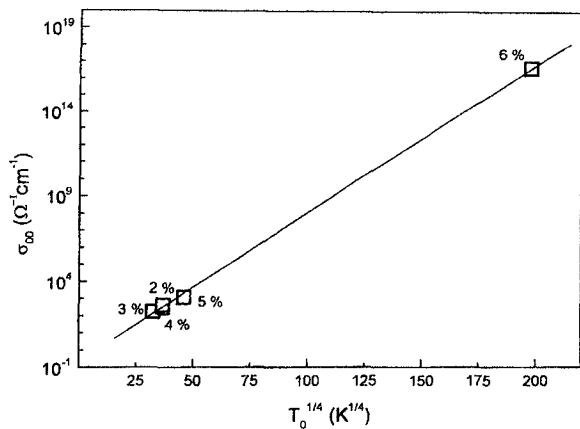


Figura 3: Dependencia de los parámetros de ajuste  $\sigma_{00}$  y  $T_0$  para muestras intrínsecas cuya dilución se indica. La línea llena es un ajuste lineal.

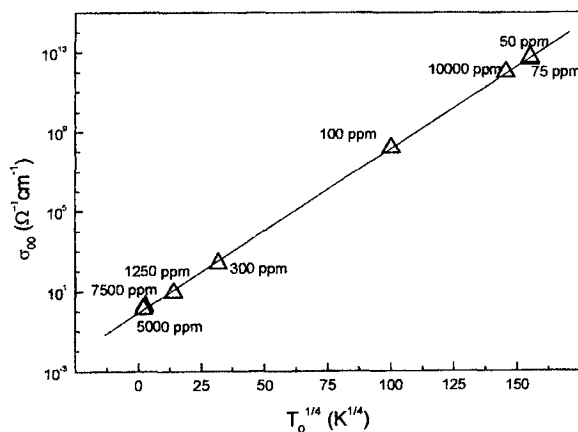


Figura 4: Dependencia de los parámetros de ajuste  $\sigma_{00}$  y  $T_0$  para muestras dopadas tipo p. La línea llena es un ajuste lineal.

Si utilizamos la ecuación (3) para el cálculo de  $g(E_F)$ , encontramos que para valores del parámetro de decaimiento de la función de onda de 20 Å para las muestras con fracción de cristalinidad menor a 80 % se obtienen resultados razonables. Para aquellas con cristalinidad mayor como las dopadas con 5000 y 7500 ppm, con un valor del parámetro de decaimiento de 30 Å, se obtienen también valores razonables de la DOS. Los resultados se muestran en las Tablas 1 y 2. En particular los valores obtenidos para las láminas dopadas con 50 y 100 ppm dan una muy buena correlación con medidas independientes realizadas por nuestro grupo por técnicas de MPC<sup>5</sup>.

TABLA 1: DOS CALCULADA CON LA ECUACIÓN (3) PARA LAS LÁMINAS INTRÍNSECAS.

Dilución en H <sub>2</sub> (%)	$\sigma_{00}$ ( $\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ )	$T_0$ (K)	$g(E_F)$ ( $eV^{-1} \text{cm}^{-3}$ )
2	4.1E2	1.8E6	1.7E19
3	1.8E2	1.1E6	2.8E19
4	3.0E2	1.8E6	1.7E19
5	1.2E3	4.5E6	6.9E18
6	4.3E16	1.5E9	2.0E16

TABLA 2: DOS CALCULADA CON LA ECUACIÓN (3) PARA MUESTRAS DOPADAS TIPO P.

Concentración de Daborano (ppm)	$\sigma_{00}$ ( $\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ )	$T_0$ (K)	$g(E_F)$ ( $eV^{-1} \text{cm}^{-3}$ )
25	4.4E12	5.8E8	5.3E16
50	5.5E12	5.8E8	5.3E16
100	1.5E8	1.0E8	3.1E17
300	2.4E2	1.0E6	3.1E19
1250	8.5E0	3.7E4	8.3E20
5000	1.8E0	4.9E1	1.8E23
7500	1.3E0	2.4E1	3.8E23
10 <sup>4</sup>	9.7E11	4.5E8	6.9E16

## V. CONCLUSIONES

El conjunto de medidas realizadas indican que el mecanismo de transporte más apropiado para explicar las propiedades eléctricas en láminas delgadas de silicio microcristalino intrínseco y dopado es el de hopping con rango de fonones variable entre estados de defectos próximos al nivel de Fermi, y no una conducción electrónica por los estados extendidos en la banda, a pesar del alto grado de cristalinidad y el amplio rango de valores de conductividad que presentan algunas láminas.

Es interesante notar que este modelo permite además obtener información sobre forma y magnitud de la DOS a partir de medidas simples de conductividad en función de la temperatura.

## Agradecimientos

Este trabajo se realizó en el marco del proyecto subsidiado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET-PICT 4808) y la Universidad Nacional del Litoral (CAI+D 96/97 E-014).

## Referencias

- Concari, S.B, Buitrago R.H, Risso G, Cutrera M, Battioni M, *Anales AFA*, 11, 220 (1999)
- Mott N.F. *Philos. Mag.* **19**, 835 (1969)
- Godet C. *J. of Non-Crystalline Sol.* **299**, 333 (2002)
- Böttger H, Bryksin V.V. *Hopping conduction in solids*. VCH (1985)
- Dussan A, Koropecki, R.R, Schmidt J.A, Arce R.D, Buitrago R.H. 87<sup>o</sup> Reunión AFA.