

Д.С. Карпович, доц., канд. техн. наук (БГТУ г. Минск)

М.А. Анкуда, ст. преп. (БГТУ г. Минск)

Н.М. Олиферович, ст. преп. (БГТУ г. Минск)

М.К. Анкуда, ассист. (БГТУ г. Минск)

И.О. Оробей, доц., канд. техн. наук (БГТУ г. Минск)

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПЛЕНОЧНОМ ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ СЕНСОРЕ**

Принцип действия полупроводниковых химических сенсоров основан на изменении электрических свойств чувствительного слоя полупроводникового образца при изменении состава анализируемой газовой среды. В качестве объекта исследования были выбраны газочувствительные тонкопленочные полупроводники.

Свойством резистивного полупроводникового сенсора, зависящим от концентрации газовой примеси, является электропроводность чувствительного слоя, в качестве которого используется поликристаллическая пленка полупроводниковых оксидов металла. Выходным аналитическим сигналом резистивного сенсора служит либо величина сопротивления чувствительного слоя, либо аналоговый сигнал по напряжению. В зависимости от типа детектируемой примеси (доноры или акцепторы электронов) и типа проводимости полупроводника ( $n$  или  $p$ -тип) сопротивление чувствительного слоя сенсора увеличивается или уменьшается.

Основной теорией, объясняющей процессы, происходящие на поверхности полупроводника, является теория мономолекулярной адсорбции Ленгмюра. Согласно этой теории в воздушной среде на поверхностных центрах полупроводника может адсорбироваться кислород в молекулярной или атомарной форме как акцептор электронов, из рабочей зоны поверхности полупроводника, в результате чего поверхность приобретает отрицательный заряд.

В полупроводниковых газоанализаторах используется эффект изменения электрического сопротивления пленок полупроводниковых материалов, возникающего вследствие физической и химической адсорбции газа. На поверхности полупроводникового материала существуют донорные уровни  $E_s$ , которые расположены выше уровня ферми в объеме материала. Электронные зоны проводимости стремятся заполнить поверхностные состояния. А значит теория приповерхностного заряда позволит определить сопротивление пленки полупроводникового сенсора.

Концентрация избыточных носителей в слое пространственного заряда может быть вычислена с помощью решения уравнения Пуассона [1]

для направления  $x$ , расположенном нормально к поверхности, причём за положительное направление принимается движение вглубь полупроводника от поверхности.

Тогда уравнение Пуассона:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon},$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая постоянная полупроводника,  $\rho(x)$  – плотность заряда.

Плотность заряда  $\rho(x)$  может быть представлена как:

$$\rho(x) = e(N_D - N_A + p(x) - n(x))$$

где  $N_D$  и  $N_A$  – плотности ионизированных доноров и акцепторов, которые являются постоянными величинами,  $p(x)$  и  $n(x)$  – концентрации дырок и электронов проводимости, соответственно.

Для полупроводника n-типа можно пренебречь концентрацией дырок и акцепторов. Если считать, что доноры полностью ионизованы, то уравнение Пуассона примет вид:

$$e \cdot (N_D - n(x)) = \varepsilon \cdot \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}$$

Для области обеднения в первом приближении можно пренебречь  $n(x)$  по сравнению с  $N_D$ . Тогда напряженность электрического поля:

$$E(x) = \frac{e \cdot N_D}{\varepsilon} \cdot x + C,$$

где  $E(x)$  – напряженность электрического поля,  $C$  – постоянная интегрирования.

Будем считать, что напряженность электрического поля в глубине образца, за пределами зоны обеднения, равна нулю. Тогда зависимость напряженности электрического поля от координаты имеет следующий вид:

$$E(x) = \frac{e \cdot N_D}{\varepsilon} \cdot (x - L_D)$$

Из условия электронейтральности образца в целом следует, что заряд на поверхности по абсолютной величине должен совпадать с зарядом обедненного слоя.

Для нахождения распределения потенциала проинтегрируем выражение для напряженности электрического поля, приняв потенциал в объеме за ноль:

$$\varphi(x) = \frac{e \cdot N_D}{2 \cdot \varepsilon} \cdot (x - L_D)^2$$

где  $L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon k_B T}{2e^2 N_C}}$  – длина Дебая, которая характеризует размер зоны обеднения.

Тогда потенциал на поверхности можно определить:

$$\varphi_s = \frac{e^2 \cdot N_s^2}{2 \cdot \varepsilon \cdot N_D}$$

Если электрофизические свойства контактирующих зерен одинаковы, то через них будет протекать один и тот же ток. Тогда выражение для сопротивления одной межзеренной границы можно будет записать:

$$R_{ГР} = \frac{2k_B T}{eI_0}$$

где  $I_0$  – обратный ток запирающего слоя, протекающий по цепочке приводящих зерен.

Если просуммировать все сопротивления вдоль одной проводящей цепочки и определить общее число всех проводящих цепочек, то можно получить выражение для общей проводимости сенсора между контактами:

$$G_0 = K \cdot \frac{eI_0}{2k_B T}$$

где  $K$  – постоянная величина, которая определяется геометрическими размерами пленки и числом проводящих зерен.

Обратный ток запирающего слоя описывается выражением [3]

$$I_0 = S_k \cdot \frac{e \cdot \mu_n \cdot E \cdot n_0}{1 + 4 \cdot \frac{\mu_n \cdot E}{v_n}} \cdot e^{-\frac{e \cdot \varphi_s}{k_B \cdot T}}$$

где  $S_k$  – площадь контакта зерен,  $T$  – температура,  $E$  – максимальная напряженность электрического поля,  $n_0$  – концентрация электронов,  $v_n$  – средняя тепловая скорость электронов.

Тогда проводимость сенсора можно описать [2]

$$G_0 = K \cdot \frac{e \cdot S_k}{2 \cdot k_B \cdot T} \cdot \frac{e \cdot \mu_n \cdot E \cdot n_0}{1 + 4 \cdot \frac{\mu_n \cdot E}{v_n}} \cdot e^{-\frac{e \cdot \varphi_s}{k_B \cdot T}} = G_{00} \cdot e^{-\frac{e \cdot \varphi_s}{k_B \cdot T}}$$

Полученное выражение для  $G_0$  справедливо только в стационарном случае, когда после появления газа около поверхности сенсора пройдет время, достаточное для установления адсорбционного равновесия. Динамическое уравнение для проводимости можно будет записать:

$$G_0(t) = G_{00} \cdot e^{-\frac{e \cdot \varphi_s(t)}{k_B \cdot T}}$$

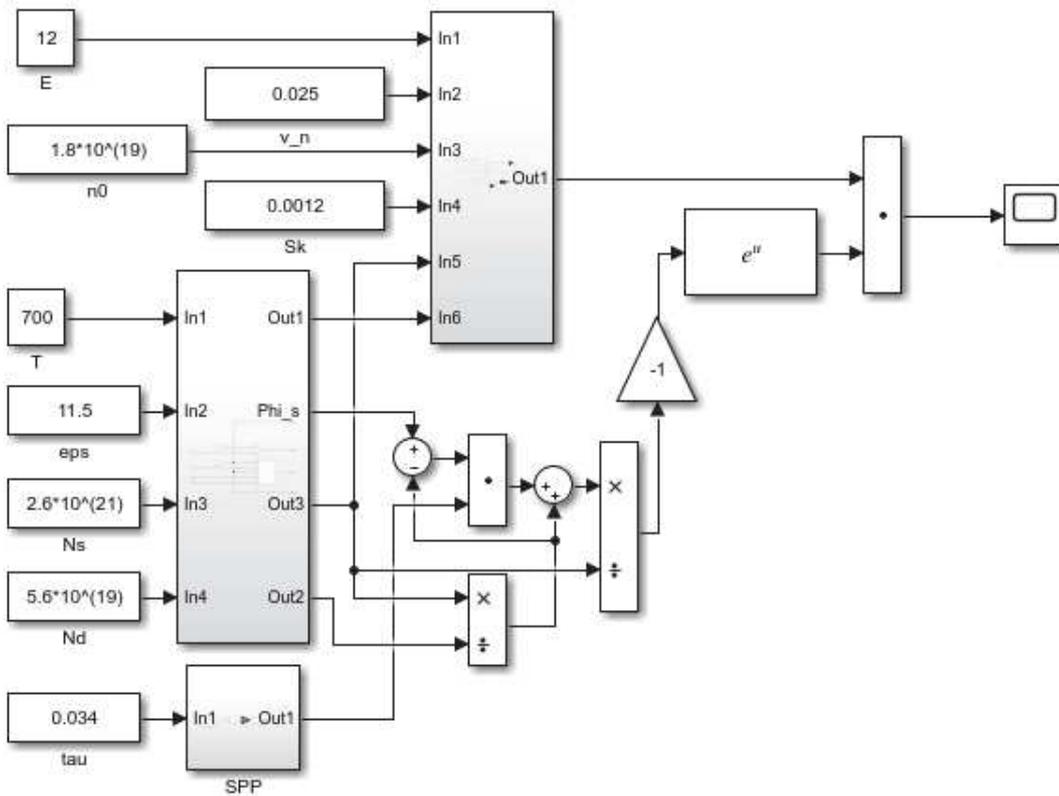
При этом

$$\varphi_s(t) = \left( \varphi_s - \frac{k_B \cdot T}{e} \right) \cdot \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right)^2 + \frac{k_B \cdot T}{e},$$

где  $\tau$  – время релаксации процесса адсорбции атомов газа на поверхности полупроводникового сенсора.

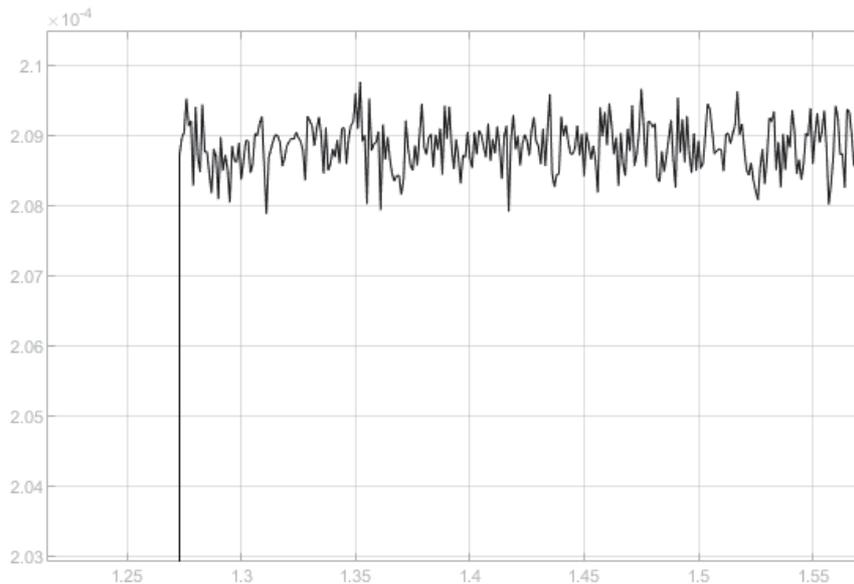
Таким образом получили математическую модель энергетических процессов, протекающих в приповерхностной области полупроводникового сенсора от действия газа на основе уравнения Пуассона. Что позволило получить зависимость изменения активной проводимости приповерхностного слоя от полупроводников при адсорбции молекул газа среды.

Составим математическую модель энергетических процессов, протекающих в приповерхностной области полупроводникового сенсора от действия газа на основе уравнения Пуассона в среде MATLAB.



**Рисунок 2 – Структурная модель энергетических процессов полупроводникового сенсора**

Моделирование изменения проводимости сенсора при действии статического электрического поля в условиях генерации постоянного шумового сигнала представлено на рис. 3.



**Рисунок 3 – Зависимость проводимости сенсора при статическом воздействии электрического поля в условиях шумовой генерации**

Таким образом получили математическую модель энергетических процессов, протекающих в приповерхностной области полупроводникового сенсора от действия газа на основе уравнения Пуассона. Что позволило получить зависимость изменения активной проводимости приповерхностного слоя от полупроводников при адсорбции молекул газа среды.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Young С.Е. Extended curves of the space charge, electric field, and free carrier concentration at the surface of a semiconductor, and curves of the electrostatic potential inside a semiconductor // J. Appl. Phys. – 1961. – V. 32. – P. 329-332.
2. Описание и моделирование энергетических процессов в полупроводниковом сенсоре / М. А. Анкуда [и др.] // Химическая технология и техника : материалы 88-й науч.-техн. конф. профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием), Минск, 29 января – 16 февраля 2024 г. – Минск: БГТУ, 2024. – С. 340-344.