

Природа компенсаційного ефекту в невідпорядкованих напівпровідниках

А. Кадащук, І. Фіщук



Institute of Physics
National Academy of Sciences of Ukraine

XLIV підсумкова наукова конференція
ІФ НАНУ, 5-6 лютого 2019

Нове покоління – Тонкоплівкова “гнучка електроніка”

Пристрої гнучкої електроніки:

RFID - NFC TAG - MEMORIES - DISPLAYS - SENSORS

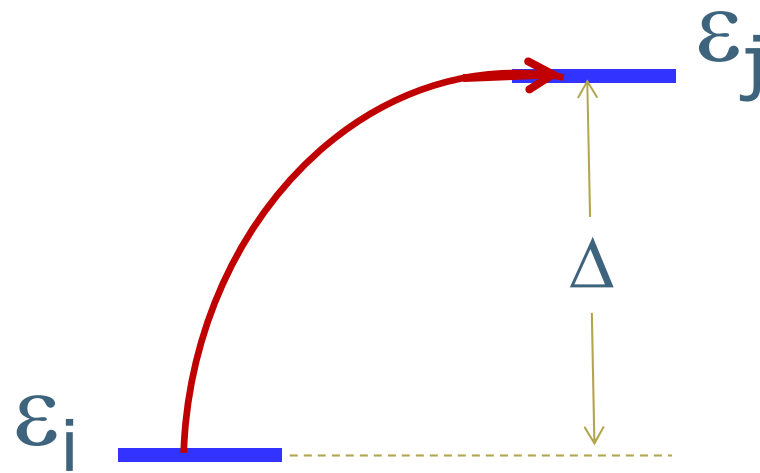
- ❑ Аморфні (невпорядковані) напівпровідники як основа тонко-плівкових транзисторів
- ❑ a-Si:H, органічні напівпровідники, метало-оксиди
- ❑ **Ряд особливостей зарядового транспорту залишається незрозумілим**



General purpose,
programmable processor

Myny *et al.*, ISSCC 1011
Myny *et al.*, ISSCC 2014

Термоактиваційний перехід в дворівневій системі

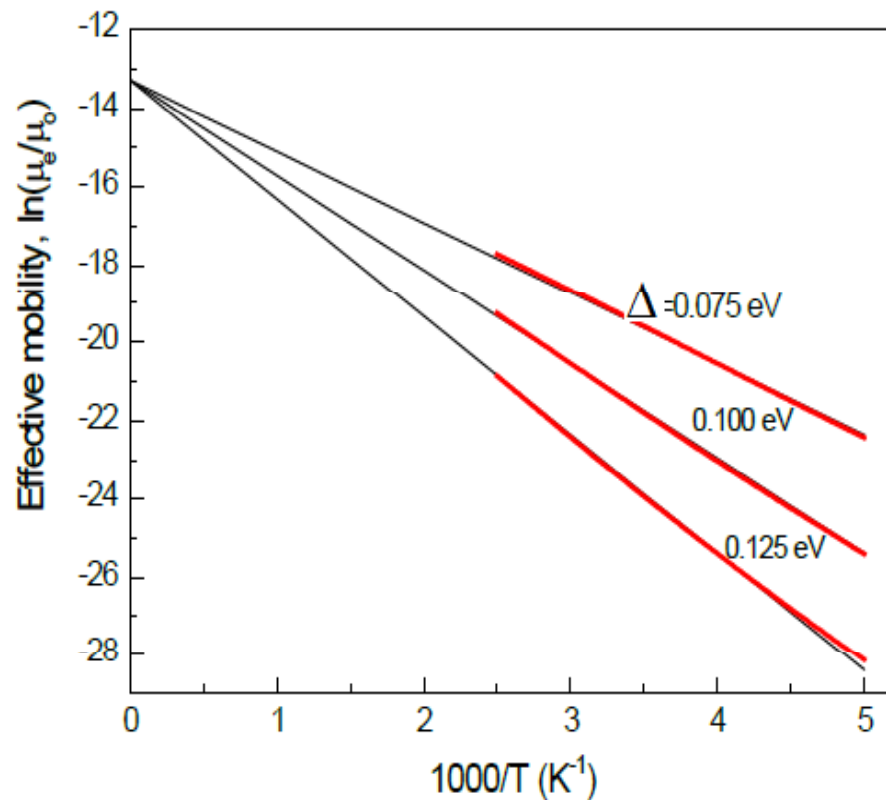


$$\Delta = E_a$$

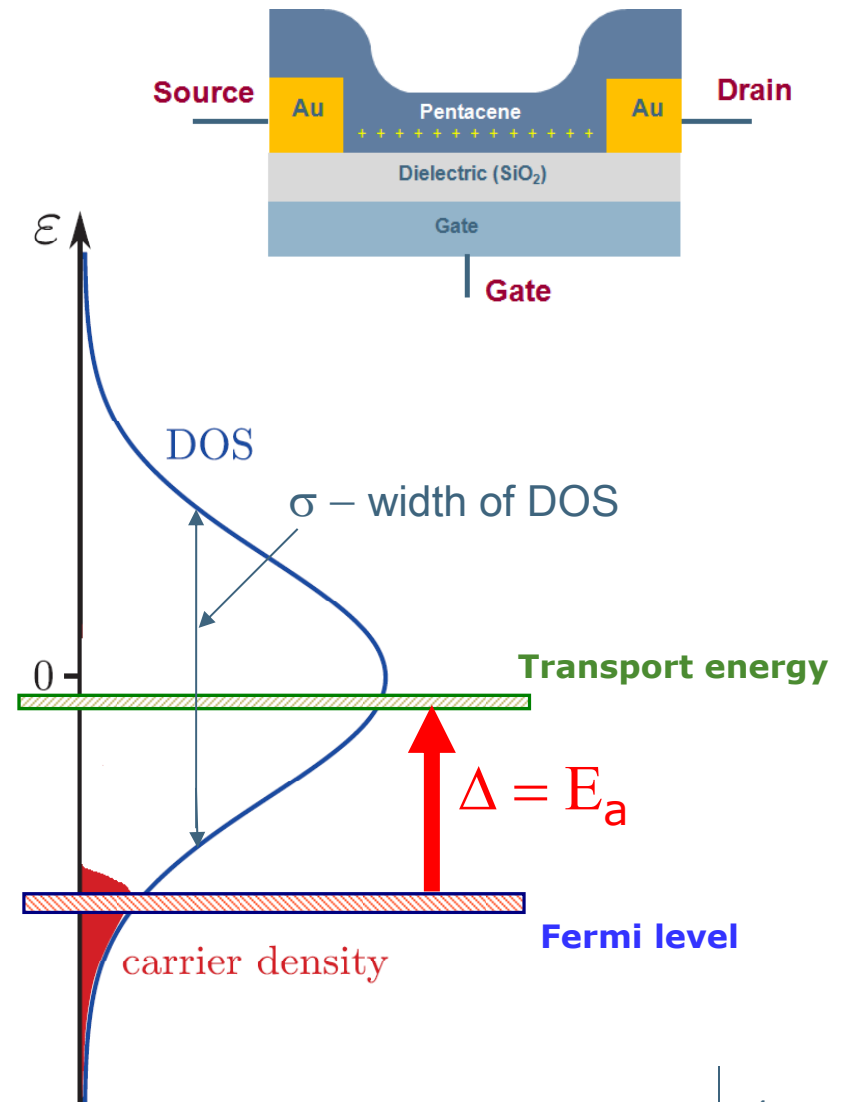
$$\mu_{FE} = \mu_o \exp \left(\frac{-E_A}{k_B T} \right)$$

Очікувана температурна залежність рухливості носіїв заряду

$$\mu_{FE} = \mu_o \exp \left(\frac{-E_A}{k_B T} \right)$$



Причина активаційної залежності $\mu(T)$ в органічних транзисторах



Компенсаційне правило Meyer-Neldel (MNR)

$$\mu_{FE} = \mu_o \exp \left(\frac{-E_A}{k_B T} \right) \quad (1)$$

$$\mu_o = \mu_{MN} \exp \left(\frac{E_A}{k_B T_{MN}} \right) \quad (2)$$

**Компенсаційний
фактор**

$$\mu_{FE} = \mu_{MN} \exp \left(\frac{E_A}{k_B T_{MN}} \right) \exp \left(-\frac{E_A}{k_B T} \right) \quad (3)$$

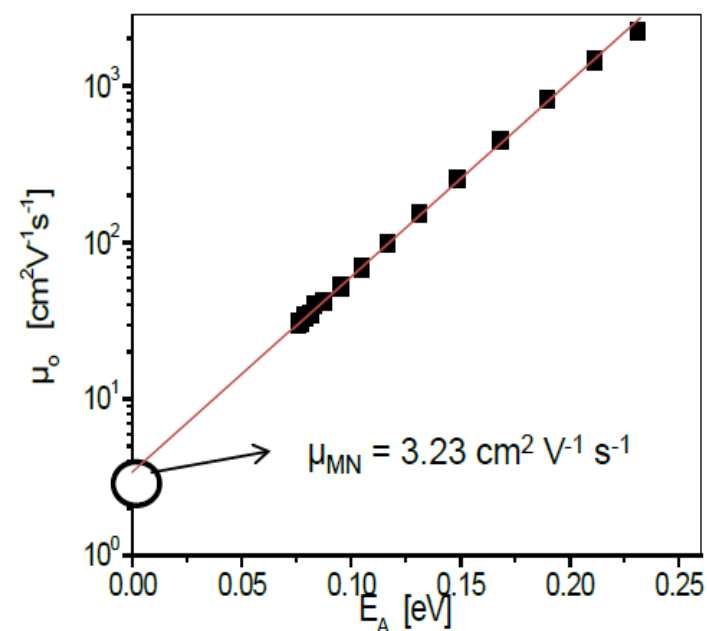
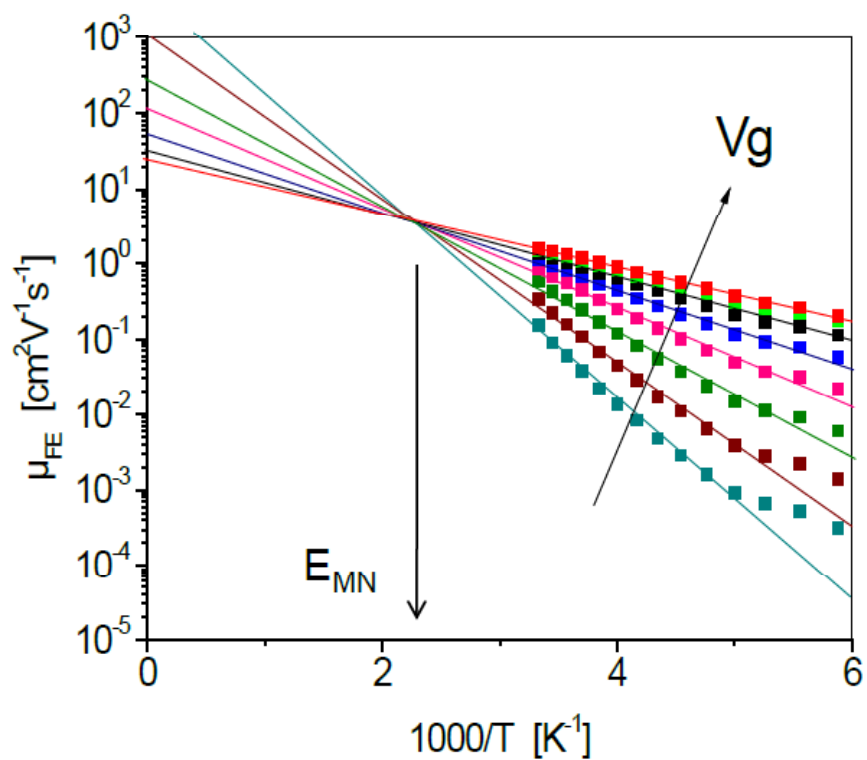
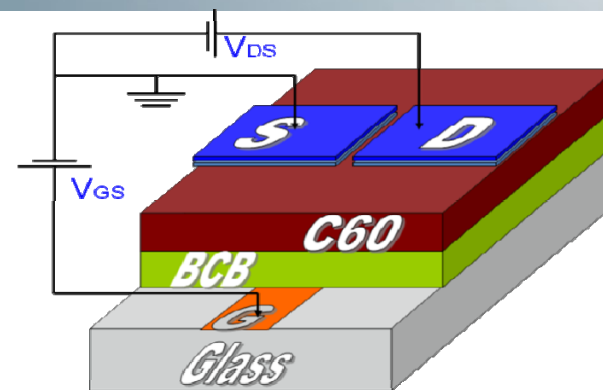
$$\mu_{FE} = \mu_{MN} \exp \left[-E_A \left(\frac{1}{k_B T} - \frac{1}{E_{MN}} \right) \right]$$

MNR is purely phenomenological model suggested in 1937.

W. Meyer and H. Neldel, Z. Tech. 18, 588 (1937).

Компенсаційний ефект в органічних польових транзисторах

Арреніуські $\mu(T)$ залежності в польових транзисторах на основі C_{60}



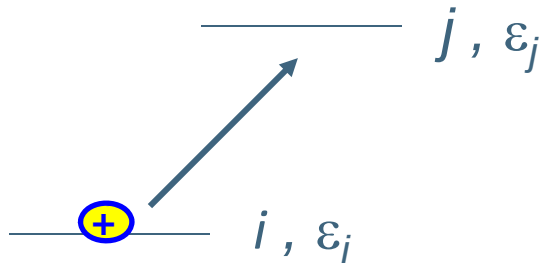
Fishchuk, Kadashchuk, et al., *Phys. Rev. B.*, Vol. 81, 045202 (2010).

Класичне пояснення ефекту: “Модель ентропії множинних збуджень”

- D. Emin, Generalized Adiabatic Polaron Hopping: Meyer-Neldel Compensation and Poole-Frenkel Behavior, **Phys. Rev. Lett.**, **100**, 166602 (2008).
- D. Emin, Phonon-assisted transition rates. 1. Optical-phonon-assisted hopping in solids, **Advan. Phys.** **24**, 305 (1975).
- E. Gorham-Bergeron and D. Emin, Phonon-assisted hopping due to interaction with both acoustical and optical phonons, **Phys. Rev. B**, **15**, 3667 (1977).
- A. Yelon, B. Movaghar, Microscopic Explanation of the Compensation (Meyer-Neldel) Rule, **Phys. Rev. Lett.**, **65**, 618 (1990).
- A. Yelon, B. Movaghar, and H. M. Branz, Origin and consequences of the compensation (Meyer-Neldel) law, **Phys. Rev. B**, **46**, 12244 (1992).
- A. Yelon, B. Movaghar and R. S. Crandall, Multi-excitation entropy: its role in thermodynamics and kinetics, **Rep. Prog. Phys.** **69**, 1145 (2006).

Термодинамічне пояснення ефекту МН

Jump rate from site to site



Jump rate:

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{\delta G}{k_B T}\right) = v_0 \exp\left(\frac{\delta S}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{\delta H}{k_B T}\right)$$

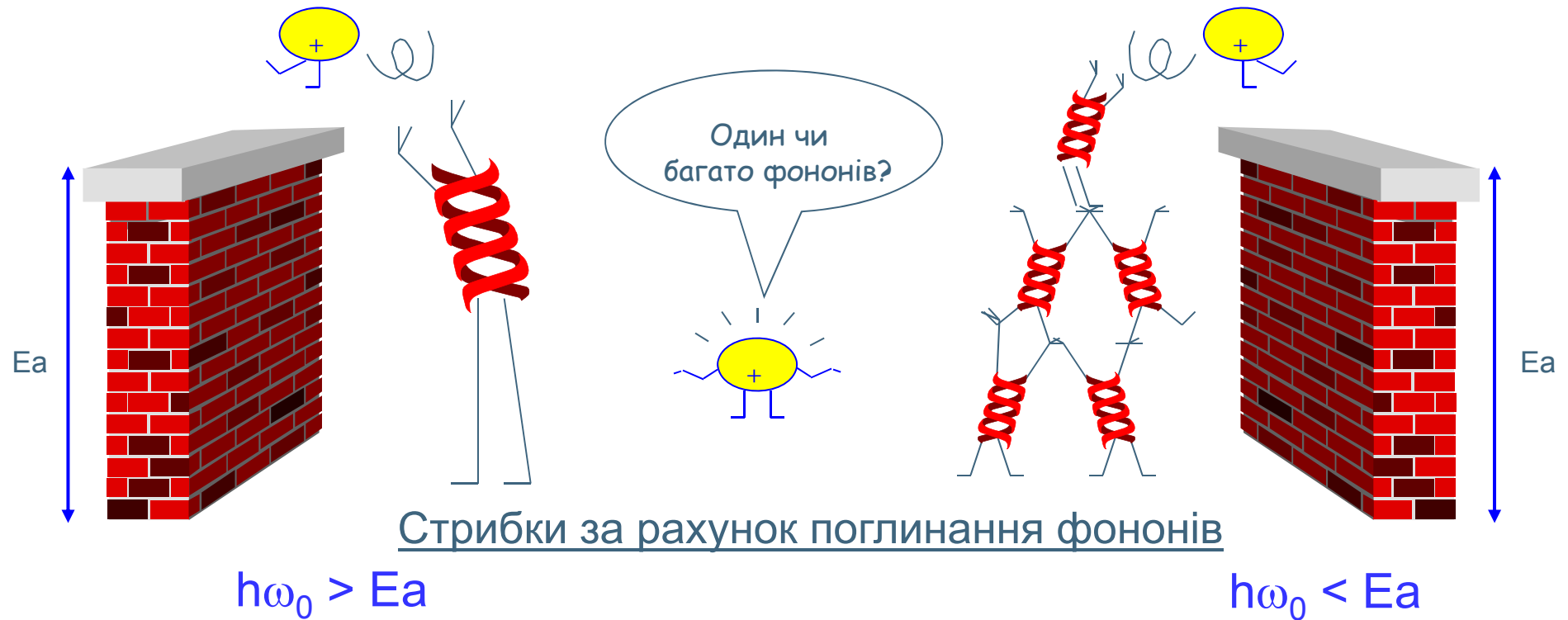
Компенсаційний
фактор

with $\delta G = \delta H - T\delta S$

Entropy change results in Meyer-Neldel rule

Модель ентропії множинних збуджень

Multi Excitation Entropy (MEE) model



$$\nu_{ij}(T) = \nu_0 \exp(-2\gamma R_{ij}) \begin{cases} \exp\left(-\frac{(\varepsilon_j - \varepsilon_i)}{k_B T}\right), & \varepsilon_j \geq \varepsilon_i \\ 1, & \varepsilon_j \leq \varepsilon_i \end{cases}$$

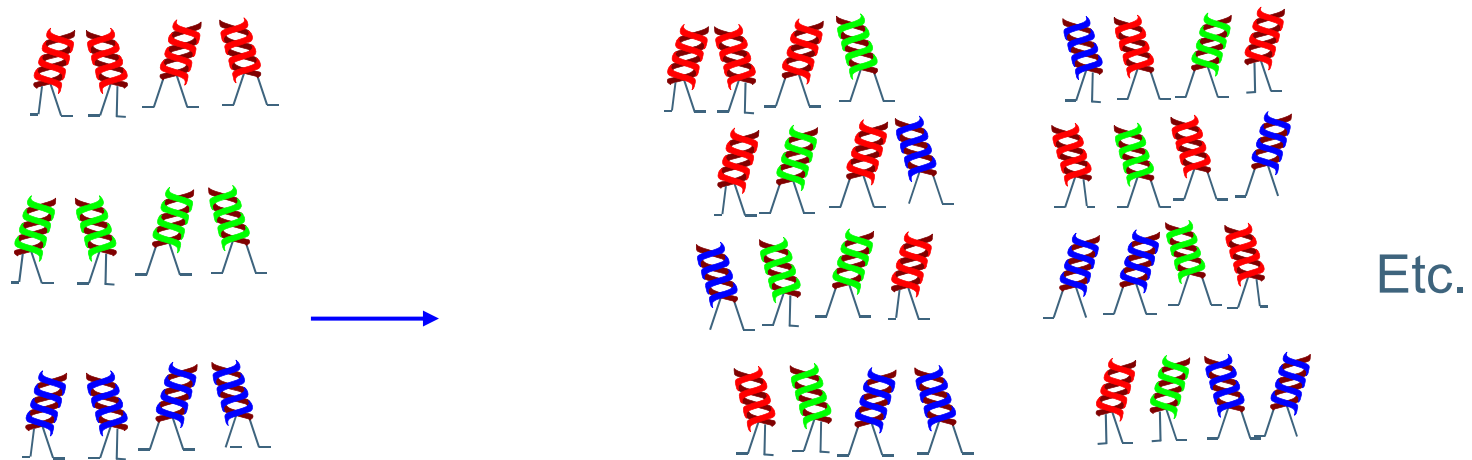
D. Emin, **Phys. Rev. Lett.** **32**, 303 (1974).

A. Miller and E. Abrahams, **Phys. Rev.** **120**, 745 (1960).

Модель ентропії множинних збуджень

$$\ln(\mu_0) \sim E_a$$

Багато фононів $\rightarrow$ ентропія $\uparrow$



1) Ймовірність елементарного переходу носія – випадок стрибків стимульованих **акустичними** фононами

low-temperature limit ($\hbar\omega_D > |\Delta| \gg k_B T$,

Результат квантово-механічних розрахунків:

Transition rate (or kinetic equation):

$$W_{12} = W_0 \exp\left(-\frac{\Delta + |\Delta|}{2k_B T}\right) \left(\frac{2\pi}{\hbar|\Delta|}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B^n(\Delta)}{n!(2n-1)!}$$

$$B(\Delta) = 3\gamma(\Delta/\eta\omega_D)^2$$

γ - константа електрон-фононної взаємодії

Single-phonon (acoustic) process

low-temperature limit

$$W_{12} = W_0 \frac{6\pi\gamma|\Delta|}{\hbar^3 \omega_D^2} \exp\left(-\frac{\Delta + |\Delta|}{2k_B T}\right)$$

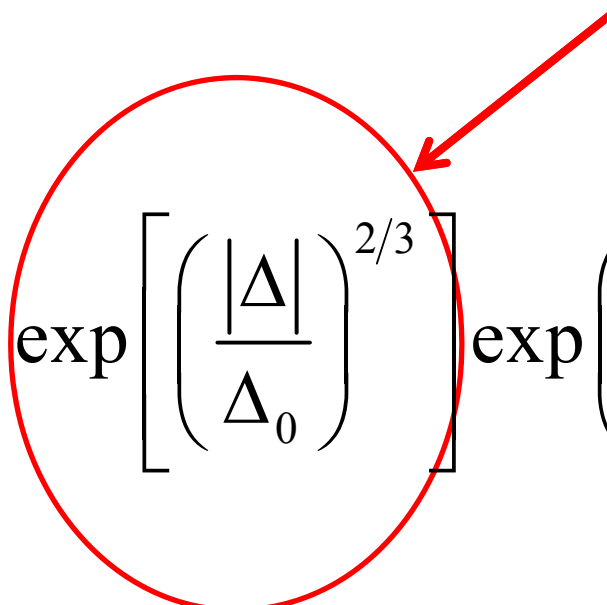
Similar to Miller-Abrahams model

$$W_{ij} = W_1 \exp\left[-\frac{|\varepsilon_j - \varepsilon_i| + (\varepsilon_j - \varepsilon_i)}{2k_B T}\right]$$

Multi-phonon (acoustic) process

$$W_{12} = W_1 \exp \left[\left(\frac{|\Delta|}{\Delta_0} \right)^{2/3} \right] \exp \left(- \frac{\Delta + |\Delta|}{2k_B T} \right)$$

Компенсаційний фактор



2) Ймовірність елементарного переходу носія – випадок стрибків стимульованих **ОПТИЧНИМИ** фононами

low-temperature limit

$$W_{12} = W_2 \frac{\exp(-S)}{(|\Delta|/\hbar\omega_0)!} \exp\left(\frac{|\Delta|}{E_{MN}^0}\right) \exp\left(-\frac{\Delta + |\Delta|}{2k_B T}\right)$$

Компенсаційний фактор



$$E_{MN}^0 = \frac{\eta\omega_0}{\ln(S)} \quad S = \frac{2E_p}{\eta\omega_0}$$

For $S > 1$

E_p - polaron binding energy

Якщо електрон-фононна взаємодія слабка ($S \rightarrow 1$)

$$W_{12} = W_2 \exp(-1) \exp\left(-\frac{\Delta + |\Delta|}{2k_B T}\right)$$



Similar to Miller-Abrahams model



For $S \rightarrow 1$

$$W_{ij} = W_1 \exp\left[-\frac{|\varepsilon_j - \varepsilon_i| + (\varepsilon_j - \varepsilon_i)}{2k_B T}\right]$$

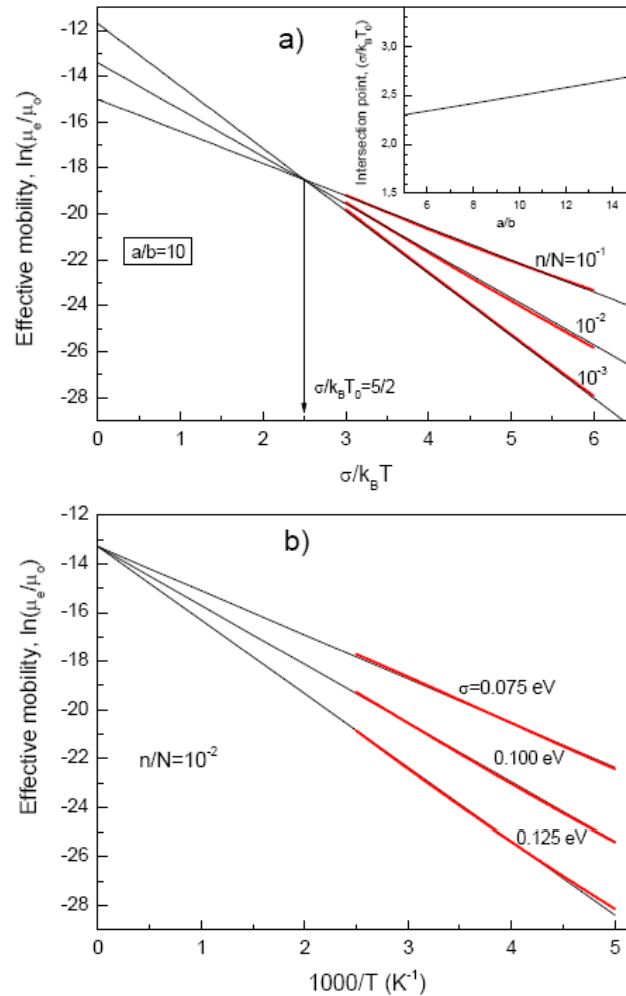


Альтернативна модель:

стрибковий транспорт в системі із
енергетичним безпорядком

Розрахунок методом Ефективного середовища в рамках моделі Міллера-Абрахамса (одно-фононне наближення)

Fig.1



Функція густини станів (ДОС):

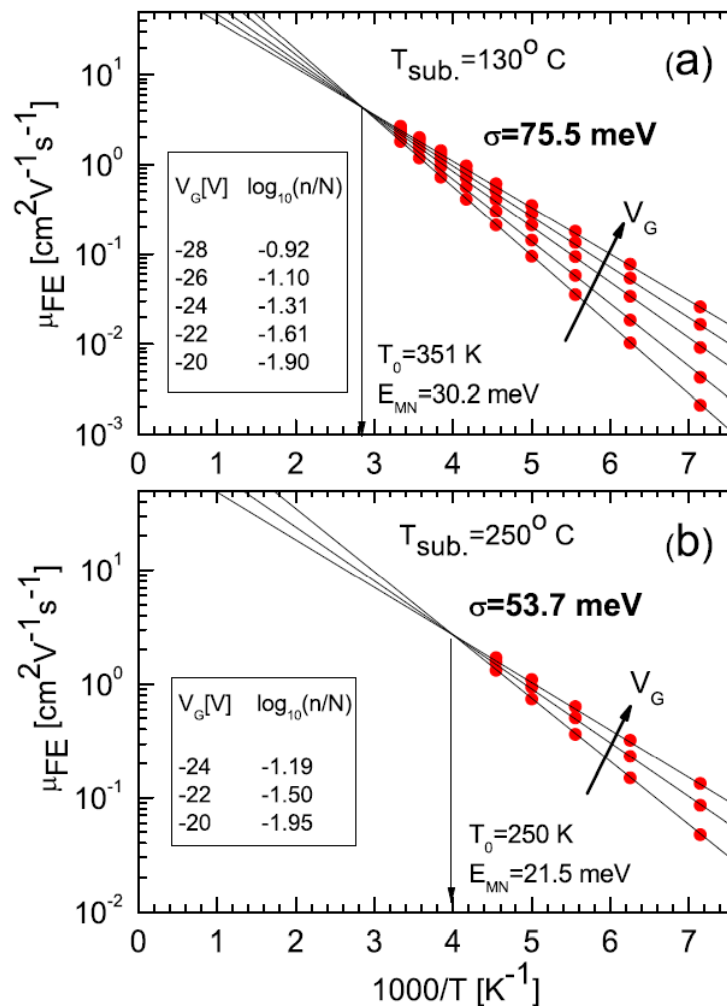
$$g(\varepsilon) = \frac{N}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{\sigma}\right)^2\right]$$

$$\mu_e = \mu_0 \exp\left(-2\frac{a}{b} + \frac{3}{2}\right) \exp\left[-E_a\left(\frac{1}{k_B T} - \frac{1}{E_{MN}}\right)\right]$$

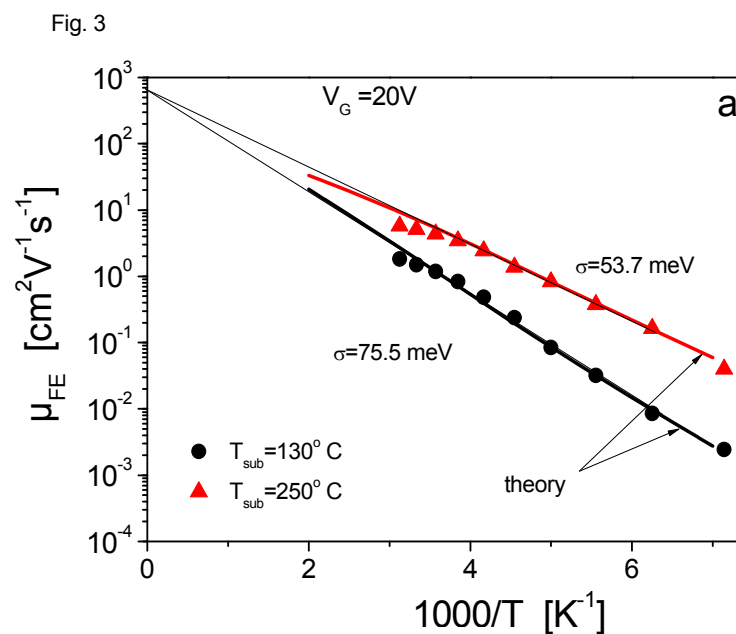
$$E_{MN} = \frac{2}{5}\sigma$$

Експериментальне підтвердження нашої моделі

Компенсаційний ефект **з'являється**
При зміні концентрації носіїв



Компенсаційний ефект **відсутній** при
зміні концентрації носіїв

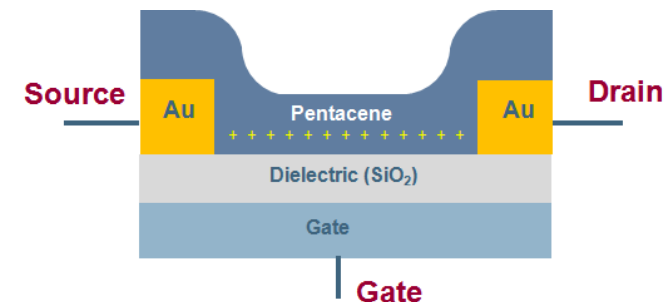
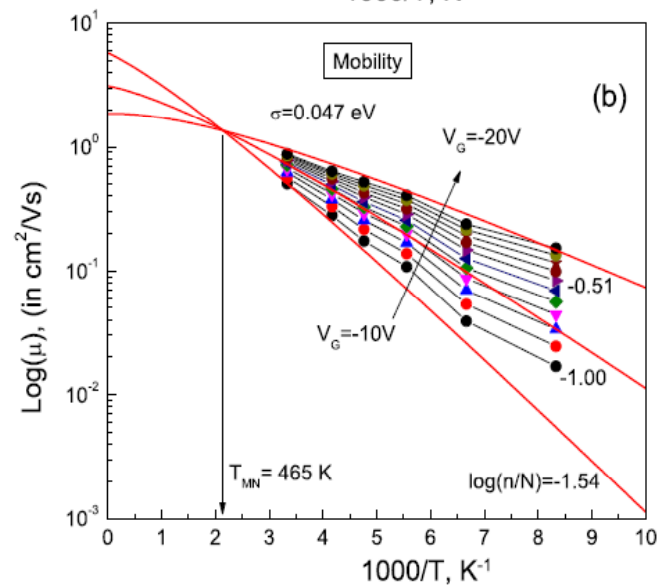
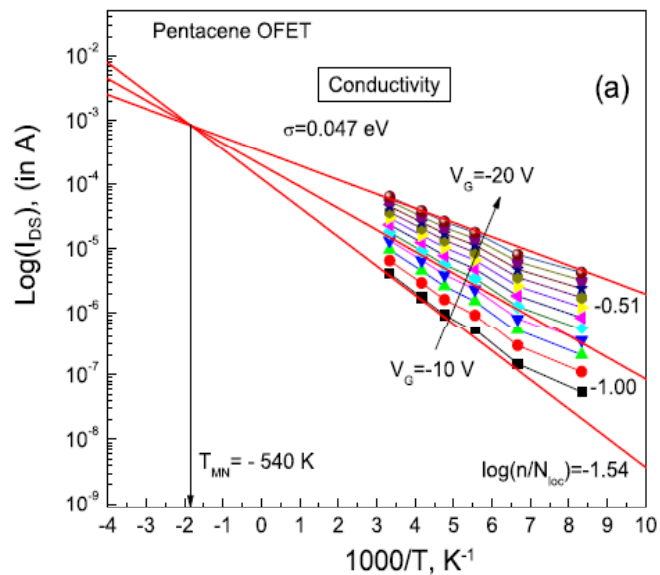




Фундаментальне питання:

Чому модель ЕМЗ виявляється не
придатною для невідпорядкованих систем?

Звичайний і аномальний компенсаційний ефект



Від'ємна ізокінетична температура
для провідності

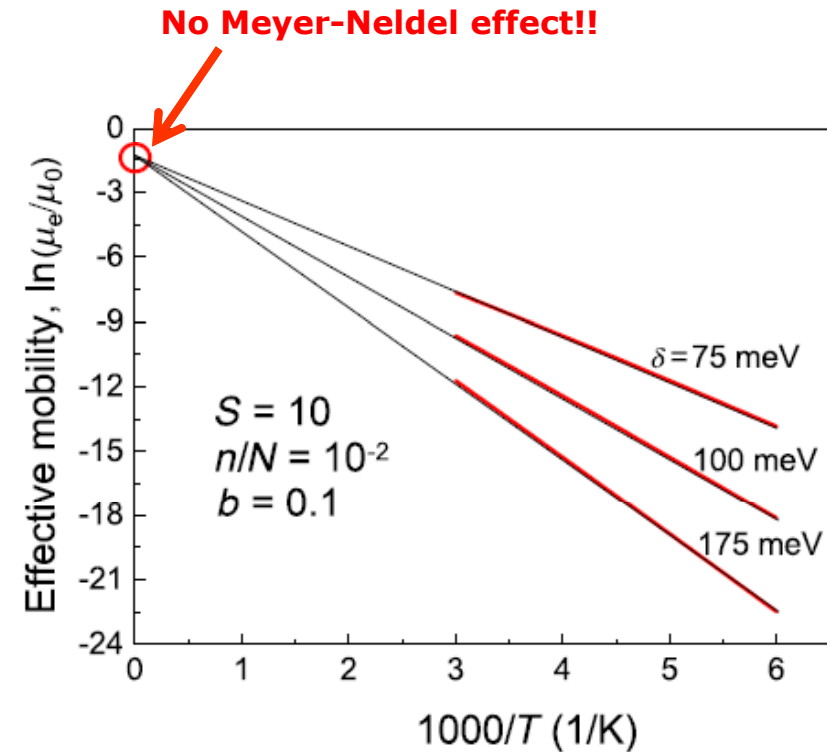
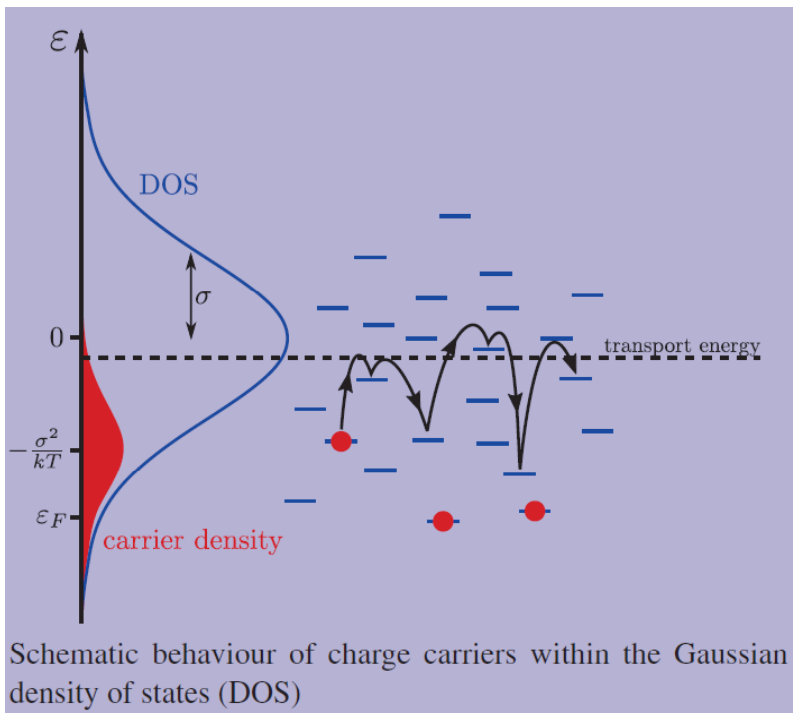
Позитивна ізокінетична температура
для рухливості

Теорія стрибкового транспорту для одно - та багато-фононних процесів: **різний енергетичний безпорядок**

Різний параметр ширини ДОС, σ

$$g(\varepsilon) = \frac{N}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{\sigma}\right)^2\right]$$

Стрибковий транспорт в Гауссовій ДОС

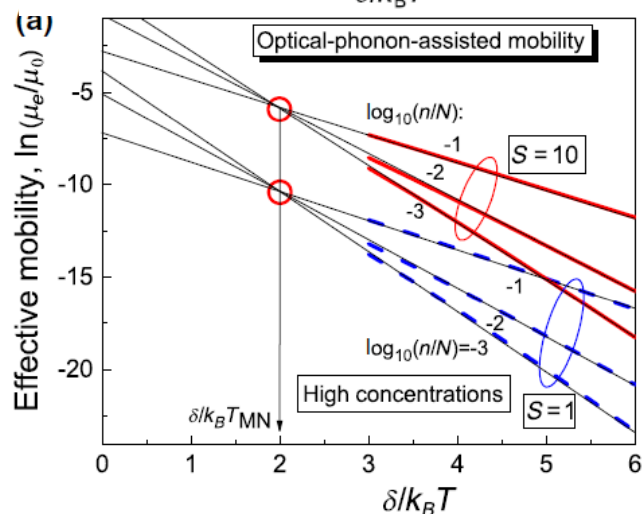
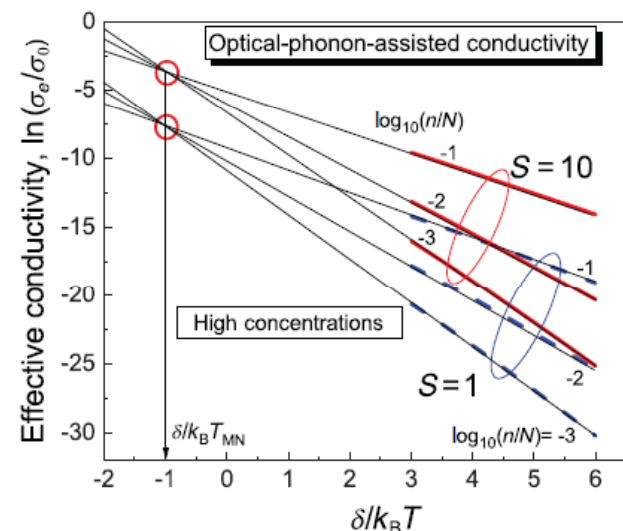


Багато-фононні процеси
(оптичні фонони)

Розрахунки стрибкового транспорту для одно- та багато-фононних процесів: **різна концентрація носіїв**

Оптические фононы

Від'ємна ізокінетична температура для провідності

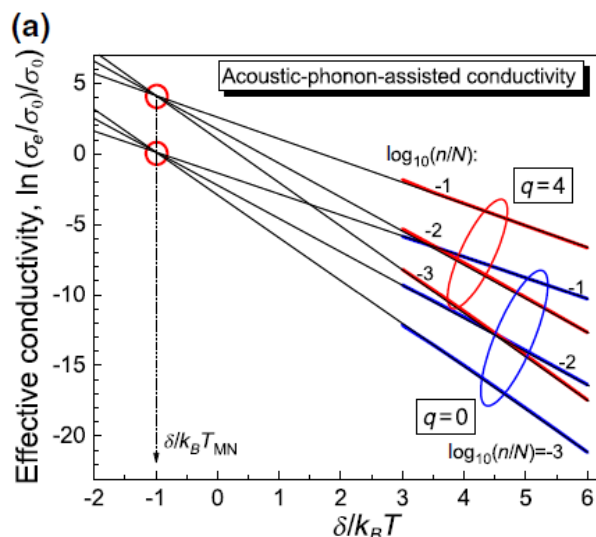


Позитивна ізокінетична температура для рухливості

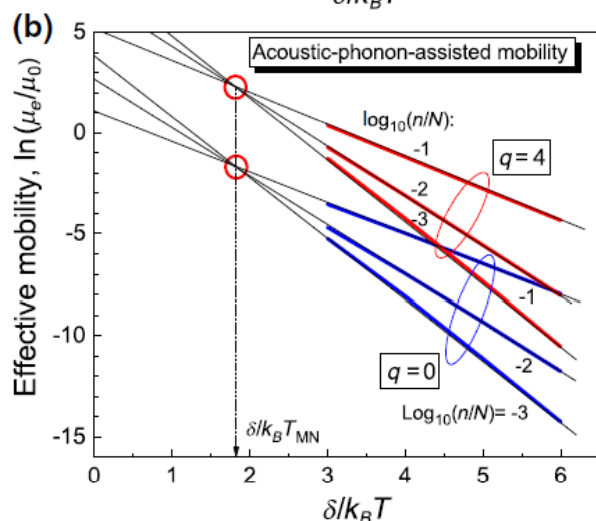
Компенсаційний ефект отримується незалежно від одно- чи багато- фононної природи переходів

Розрахунки стрибкового транспорту для одно- та багато-фононних процесів: **різна концентрація носіїв**

Акустичні фонони



Від'ємна ізокінетична температура
для провідності



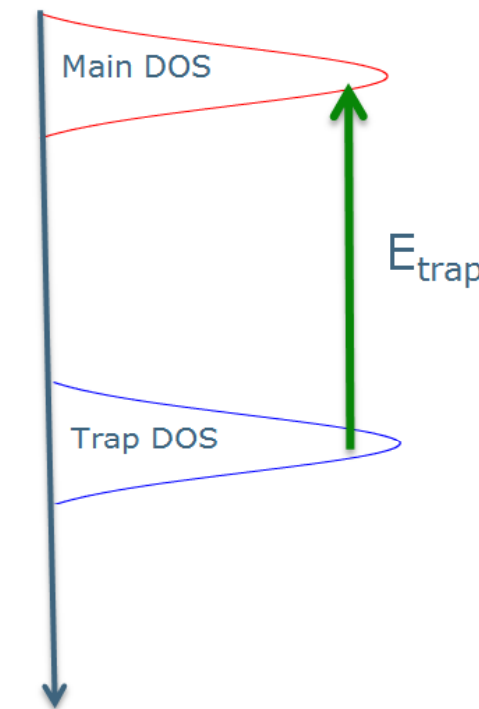
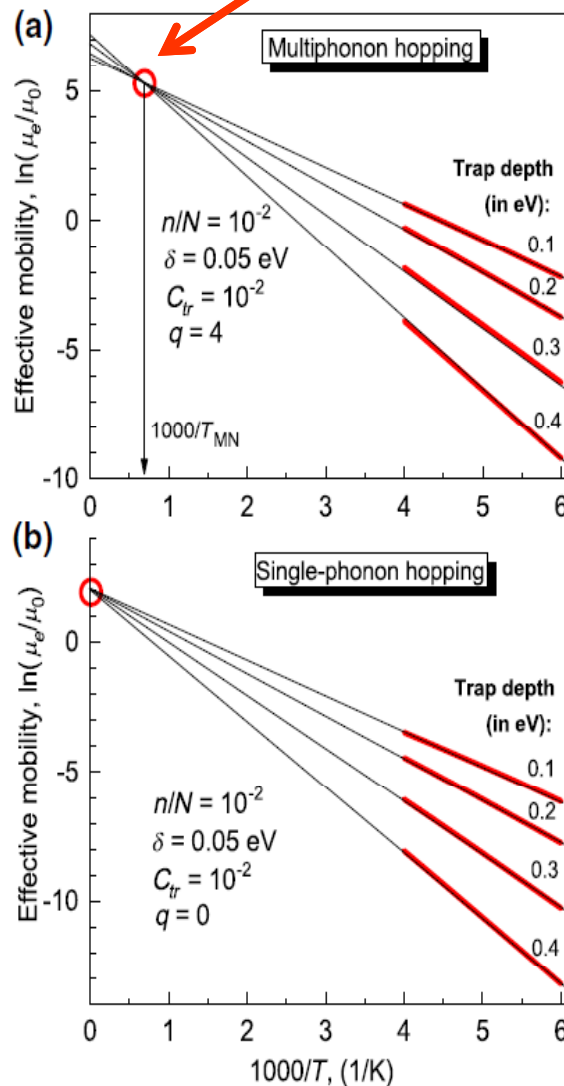
Позитивна ізокінетична температура
для рухливості

Компенсаційний ефект отримується незалежно від
одно- чи багато- фононної природи переходів

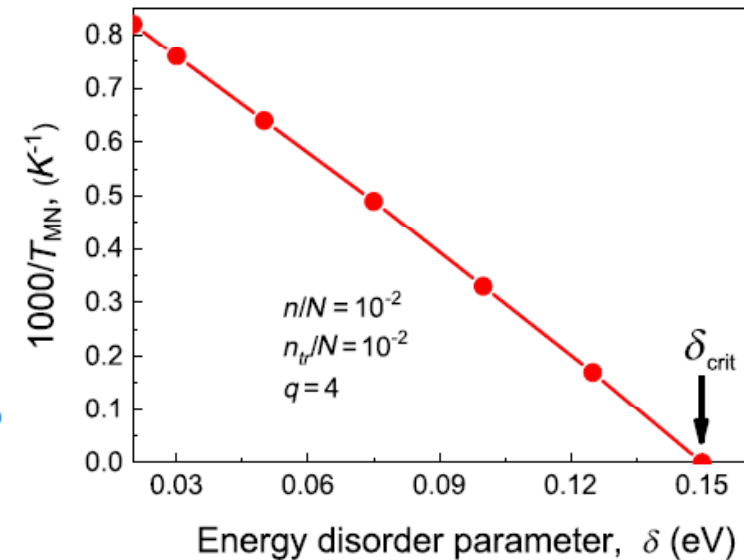
Аморфний напівпровідник із глибокими пастками

Компенсаційний МН ефект!!

Критичний безпорядок для появи ефекту



Глибокі пастки імітують дворівневу систему



Висновки

- ❑ Мікроскопічна дворівнева модель переходу є надто спрощеною і нездатна описати **макроскопічний** транспорт носіїв в реальних неупорядкованих напівпровідниках, тому класична теорія ЕМЗ є для них непридатною
- ❑ Багато-фононні процеси не є визначальними для появи компенсаційного ефекту
- ❑ Даний ефект успішно пояснюється в рамках моделі енергетичного безпорядку також і для одно-фононних термоактиваційних переходів
- ❑ Ізокінетична температура є **мірою енергетичного безпорядку** і дає можливість кількісно оцінити ширину функції густини станів в АОМ



Дякую за увагу!