

Numerisches Modell zur Berechnung der Bandverbiegung von Halbleiter-Gas-Sensoren

Peter Bonanati¹, Nicolae Bârsan¹, Udo Weimar¹

¹ *Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Auf der Morgenstelle 15, Tübingen, Germany, Peter.Bonanati@ipc.uni-tuebingen.de*

Zusammenfassung:

Jüngste Forschungen haben gezeigt [1], dass bei Dickfilm-Metalloxid-Halbleiter-Gassensoren selbst unter anwendungsnahen Umgebungsbedingungen einen Wechsel des Leitungsmechanismus stattfinden kann. Dieses Phänomen hat u.a. großen Einfluss auf die Empfindlichkeit des Sensors. In dieser Arbeit wurde untersucht welche Konsequenzen aus einem solchen Wechsel resultieren. Anhand unseres Modells werden die Halbleitereigenschaften der Metalloxidschicht numerisch berechnet und die Auswirkungen auf das Sensorverhalten bei einem Wechsel von Verarmungs- zu Anreicherungsschicht vorhersagbar.

Durch den Abgleich der Modelldaten mit realen Messergebnissen lassen sich zusätzlich die sensorrelevant Parameter wie die Dotierungsgrad, Korngröße, Debyelänge und Position des Fermi-niveaus bestimmen.

Schlagwörter: Halbleiter-Gassensor, Leitungsmechanismus, numerische Berechnung, Bandverbiegung

Einleitung

Die untersuchten Dickfilm-Halbleiter-Gassensoren bestehen aus polykristallinen Körnern mit sphärischer Geometrie, deren Durchmesser meist zwischen 5nm-100nm liegen. Die Halbleiterkörner sind lose miteinander verbunden und bilden je nach Sensorarchitektur auf dem Sensorsubstrat ein leitendes Netzwerk aus. Abhängig von Temperatur und Umgebungs-Atmosphäre ändern sich die elektrischen Eigenschaften der Halbleiterkörner und führen somit zu einem messbaren Signal.

Zur Beschreibung des Sensorverhaltens von solchen Sensoren lassen sich die relevanten Prozesse in zwei abstrakte Elemente unterteilen. Rezeptor und Transduktor. Der Rezeptor setzt sich aus der Summe der Reaktionen, die an der Oberfläche des Halbleiters mit der Umgebungsatmosphäre stattfinden, und dem daraus resultierenden Ladungstransfer zusammen. Der Transduktor wiederum aus den Vorgängen, welche die Prozesse an der Oberfläche in eine Änderung des Sensorsignals umwandelt.

Aus Ladungstransfer zwischen Oberfläche und Kristall resultiert typischer Weise eine Verbiegung des Leitungsbandes und folglich eine Änderung der Leitfähigkeit. Bisherige Modelle zur Beschreibung der elektrischen Eigenschaften verwendeten zur vereinfachten Berechnung meist die Schottky-Approximation

([2], [3]). Diese Approximation hat ihre berechnete Anwendung unter bestimmten Bedingungen, wobei eine vollständige Beschreibung des Sensorverhaltens damit nicht möglich ist.

Das nun hier vorgestellte Modell kommt ohne diese Approximation aus und lässt somit eine allgemeinere Beschreibung des Transduktors zu. Darunter fallen u.a. die Grenzfälle von vollständig verarmten Halbleitern oder Halbleitern, bei denen sich aufgrund der Oberflächenreaktionen eine Verarmungsschicht in eine Anreicherungsschicht umwandelt.

Beschreibung des numerischen Modells im Detail

Zur genaueren Modellierung der einzelnen Halbleiter wurde die Poisson-Gleichung für eine sphärische Geometrie basierend auf einer Ladungsverteilung nach Fermi-Dirac numerisch gelöst.

In einem ersten Schritt wurde hierfür ein einheitsloses Gleichungssystem aufgestellt. Ein zentraler Parameter des Modells ist dabei die relative Größe (Radius des Kristalls/ Debyelänge) des Halbleiterkorns.

Anschließend wurde die Poisson-Gleichung für verschiedene Startparameter des Gleichungssystems gelöst. Für alle konvergierenden Lösungen wurde jeweils die entsprechende Ladungsverteilung bestimmt.

Diese wiederum wurden mit der notwendigen Randbedingung, welche das Gauß-Gesetz (1) vorgibt, abgeglichen.

$$\left. \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r=R} = \frac{Q}{R^2 \epsilon_0} \quad (1)$$

Durch diese Modellierung kann für verschiedene relative Korngrößen eine Lösung der Ladungsverteilung im Halbleiter gefunden werden.

Aus der resultierenden Ladungsverteilung wurde ein Leitfähigkeits-Modell postuliert, welches in erster Näherung den erwarteten Stromfluss abhängig von der lokalen Leitfähigkeit berücksichtigt. Hieraus konnte eine theoretische Widerstandsänderung abhängig vom dem Oberflächenpotential des Halbleiters bestimmt werden (Fig. 1).

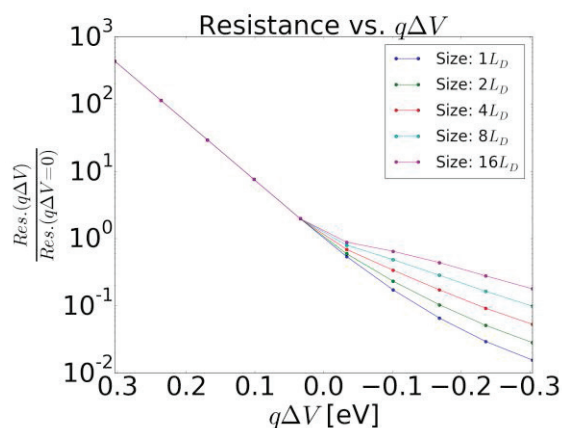


Fig. 1 Numerisch bestimmter Widerstand eines Sensors in Abhängigkeit zu der Änderung der Austrittsarbeit für verschiedene relative Korngrößen (R/L_D)

Vergleich der Modell-Daten mit realen Messungen

Durch simultane Operando-Austrittsarbeit- und Widerstandsmessungen eines Sensors wurden experimentell die Widerstandsänderungen des Sensors bei Änderungen des Oberflächenpotentials bestimmt (Fig. 2). Aus dem Vergleich dieser gemessenen Wertepaare mit den theoretischen und numerisch bestimmten Ergebnissen können mehrere Rückschlüsse auf sensorspezifische Eigenschaften getroffen werden.

Die gemessene Austrittsarbeit setzt sich einerseits aus der, vom Modell berücksichtigten, Bandverbiegungen und andererseits aus der elektrischen Affinität, die im Modell keinen Einfluss hat, zusammen. Der Vergleich von Modelldaten mit den Experimentdaten lässt somit eine Bestimmung

der elektrischen Affinität an der Oberfläche zu, welche z.B. aus Dipolen resultieren könnte, die durch Hydroxylgruppen an der Oberfläche gebildet werden.

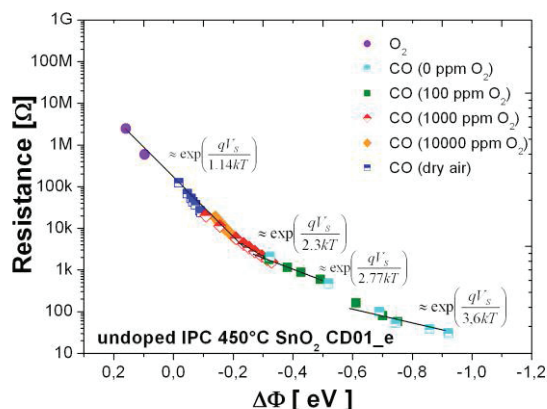


Fig. 2 Experimentell bestimmter Widerstand eines Sensors in Abhängigkeit zu der Änderung der Austrittsarbeit

Des Weiteren können durch einen Fit der Modelldaten an die Messdaten halbleiterspezifischen Parameter wie der Abstand von Fermilevel zum Leitungsband bestimmt werden.

References

- [1] N. Barsan, J. Rebolz, and U. Weimar, "Conduction mechanism switch for SnO₂ based sensors during operation in application relevant conditions; implications for modeling of sensing," *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 207, pp. 455–459, Feb. 2015.
- [2] N. Yamazoe and K. Shimano, "Roles of Shape and Size of Component Crystals in Semiconducto Gas Sensors I. Response to Oxygen," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 155, no. 4, pp. 85–92, 2008.
- [3] N. Barsan, M. Hübner, and U. Weimar, "Conduction mechanisms in SnO₂ based polycrystalline thick film gas sensors exposed to CO and H₂ in different oxygen backgrounds," *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 157, no. 2, pp. 510–517, Oct. 2011.
- [4] J. Rebolz, P. Bonanati, C. Jaeschke, M. Hübner, L. Mädler, U. Weimar, and N. Barsan, "Conduction mechanism in undoped and antimony doped SnO₂ based FSP gas sensors," *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 188, pp. 631–636, 2013.