

УДК 621.382

А.В. ОСАДЧУК, В.С. ОСАДЧУК, Я.А. ОСАДЧУК

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ ОБЪЁМНОГО ПРИПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ДЛЯ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ЧАСТОТНЫХ СЕНСОРОВ КОНЦЕНТРАЦИИ ГАЗА**

*Винницький національний технічний університет,  
Винниця, Хмельницькое шоссе 95, Украина. E-mail: [osadchuk.av69@gmail.com](mailto:osadchuk.av69@gmail.com)*

**Аннотация:** В работе рассмотрена математическая модель физического механизма возникновения объемного приповерхностного заряда в полупроводниках в первичных газочувствительных полупроводниковых сенсорах, описывающая зависимость активной составляющей полного сопротивления приповерхностного слоя полупроводникового газочувствительного элемента при адсорбции молекул газа. Избыточные носители заряда при адсорбции изменяют распределение электростатического поверхностного потенциала в слое пространственного заряда. Решение уравнения Пуассона позволило получить выражения для активной составляющей полного сопротивления на поверхности электронного и дырочного полупроводников газочувствительных сенсоров при адсорбции молекул газа. Представлена экспериментальная зависимость изменения сопротивления полупроводникового газочувствительного сенсора на основе ZnO от изменения концентрации метана.

**Ключевые слова:** полупроводниковые сенсоры газа, газореактивный эффект, реактивные свойства полупроводников, полное сопротивление, приповерхностный слой.

**Abstract:** In the article, a mathematical model of the physical mechanism of the occurrence of a bulk surface charge in semiconductors in primary gas sensitive semiconductor sensors is considered. The mathematical model describes the dependence of the active component of the impedance of the surface layer of a semiconductor gas-sensitive element during the adsorption of gas molecules. Excess charge carriers during adsorption change the distribution of the electrostatic surface potential in the space charge layer. The solution of the Poisson equation made it possible to obtain expressions for the active component of the impedance on the surface of the electron and hole semiconductors of gas-sensitive sensors during the adsorption of gas molecules. An experimental dependence of a change in the resistance of a semiconductor gas-sensitive sensor based on ZnO on a change in methane concentration is presented.

**Key words:** semiconductor gas sensors, gas-reactive effect, reactive properties of semiconductors, impedance, surface layer

**DOI: 10.31649/1681-7893-2019-38-2-107-112**

### **ВВЕДЕНИЕ**

В последнее десятилетие, когда многочисленные террористические акты происходят во всех уголках мира, унося жизни как военных, так и гражданских лиц очень важной стала проблема контроля окружающей среды, то есть определения и распознавания компонентов его газового состава для сохранения жизни и здоровья людей [1-4].

Разработка математических моделей, схем и конструкций частотных параметрических микроэлектронных сенсоров для контроля газовой среды, работа которых базируется на функциональной зависимости реактивных свойств и отрицательного дифференциального сопротивления полупроводниковых структур от изменения концентрации газа является актуальной задачей [5-9]. В приборах такого типа происходит преобразование электрических сигналов, пропорциональных концентрации газа в частоту, позволяет выполнить измерительные преобразователи по интегральной технологии с повышенной точностью и чувствительностью, расширить диапазон измеряемых величин

[5-9]. Кроме того, сочетание на одном кристалле частотных параметрических микроэлектронных преобразователей физических величин со схемами обработки информации делает возможным создание «smart sensor», то есть интеллектуальных сенсоров. Использование в качестве информативного параметра частоты позволяет избежать применения аналого-цифровых преобразователей и усилительных устройств при дальнейшей обработке информации, что значительно снижает стоимость информационно-измерительных систем.

### РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

При действии газа на поверхность полупроводников происходят адсорбционные процессы, которые связывают частицы газа с поверхностью. В этом случае возникает химическая и физическая адсорбция. Физическая адсорбция определяется силами электростатического происхождения (силы Ван-дер-Ваальса, силы электрического отображения), энергия связи в этом случае составляет 0,01-1 эВ. Химическая адсорбция возникает, когда адсорбированные молекулы связаны с полупроводником силами обменного типа. В силу этого энергия связи при хемосорбции является значительной и достигает 1 эВ. Таким образом, при адсорбции газа в полупроводнике возникают дополнительные поверхностные состояния. Энергетические уровни поверхностных состояний расположены в запрещенной зоне значительно ниже дна зоны проводимости и выше потолка валентной зоны [10].

Рассмотрим образование приповерхностного шара объёмного заряда на примере электронного полупроводника. На поверхности такого полупроводника существуют донорные уровни  $E_s$ , которые расположены выше уровня ферми в объеме материала. Электронные зоны проводимости стремятся заполнить поверхностные состояния. При заполнении полностью поверхностных состояний  $N_s$ , то на каждой единице площади поверхности возникает отрицательный заряд  $-qN_s$ , где  $q$  – заряд электрона.

На основании теории приповерхностного заряда определяется сопротивление электронного полупроводника, которое зависит от адсорбции газа. Наиболее широко используемыми электроникой окислами являются  $\text{Sn}_2\text{O}$  и  $\text{ZnO}$ . В общем случае проводимость полупроводников определяется выражением [11].

$$\sigma = q\mu_n^*n + q\mu_p^*p, \quad (1)$$

где  $\mu_n, \mu_p$  – подвижности электронов и дырок в шаре поверхностного заряда. Часто допускают, что они равны величинам подвижности в объеме полупроводника.

Для невырожденного полупроводника концентрации электронов и дырок в приповерхностной области определяется распределением Больцмана. Их можно выразить через поверхностный потенциал таким образом.

$$n = n_0 \exp(-\varphi_s / kT), \quad p = p_0 \exp(-\varphi_s / kT). \quad (2)$$

При подстановке выражения (2) в формулу (1), получим

$$\sigma = q\mu_n n_0 \exp(-\varphi_s / kT) + q\mu_p p_0 \exp(-\varphi_s / kT), \quad (3)$$

где  $n_0$  – концентрация электронов в объеме,  $p_0$  – концентрация дырок в объеме.

При выполнении условия минимума проводимости  $\partial\sigma/\partial\varphi = 0$ , тогда

$$\varphi_{s \min} = \frac{kT}{2q} \left[ \ln\left(\frac{\mu_n}{\mu_p}\right) + \ln\left(\frac{n_0}{p_0}\right) \right]. \quad (4)$$

Зависимость потенциала от величин заряда определяется уравнением Пуассона.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi a}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (5)$$

где  $a$  – плотность заряда,  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума,  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость полупроводника. Плотность заряда описывается выражением

$$a = q[-n_0 \exp(-q\varphi / kT) + p_0 \exp(-q\varphi / kT) - N_d + N_a], \quad (6)$$

где  $N_d = n_0$ ,  $N_a = p_0$ ,  $\varphi$  – изменение потенциала в точке  $x$  по отношению к его равновесного значению в объеме. Уравнение Пуассона (5) с учетом выражения (6) принимает вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi q}{\varepsilon\varepsilon_0} [-n_0 \exp(-q\varphi / kT) + p_0 \exp(-q\varphi / kT) - N_d + N_a]. \quad (7)$$

Заряд в приповерхностном слое определяется выражением

$$Q_{SV} = \int_{-\infty}^0 a(x) dx. \quad (8)$$

Избыточная концентрация электронов имеет вид

$$n = \int_{-\infty}^0 [n(x) - n_0] dx. \quad (9)$$

а избыточная концентрация дырок

$$p = \int_{-\infty}^0 [p(x) - p_0] dx. \quad (10)$$

Для электронного полупроводника поверхностная проводимость описывается уравнением

$$\sigma = q\mu_n^* \int_0^{\infty} [n(x) - n] dx, \quad (11)$$

где  $n(x) = n_0 \exp(-q\varphi / kT)$ , при этом  $\varphi > 0$ , так как дно зоны проводимости и потолок валентной зоны изогнуты вниз в приповерхностной энергетической диаграмме электронного полупроводника при его обогащении. Выражение (11) при подстановке  $n(x)$  можно представить в виде [11]

$$\sigma = q\mu_n^* n \int_0^{\infty} [\exp(-q\varphi / kT) - 1] dx. \quad (12)$$

Выражение (12) легко преобразуется к виду

$$\sigma = q\mu_n^* n \int_0^{\varphi_s} \frac{\exp(-q\varphi / kT) - 1}{d\varphi / dx} d\varphi. \quad (13)$$

Значение  $d\varphi / dx$  находится из решения уравнения Пуассона (7), которое принимает вид

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi q}{\varepsilon\varepsilon_0} n [\exp(-q\varphi / kT) - 1], \quad (14)$$

при следующих граничных условиях

$$\varphi(x)|_{x=0} = \varphi_s, \quad \varphi(x)|_{x=\infty} = 0, \quad (15)$$

Из уравнения (13) вытекает

$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 = \frac{8\pi qn}{\varepsilon\varepsilon_0} \int (\exp(-q\varphi/kT) - 1) d\varphi = -\frac{8\pi qn}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{kT}{q} (\exp(-q\varphi/kT) - \varphi + C), \quad (16)$$

где  $C$  – постоянная интегрирования. При  $x \rightarrow \infty, \varphi \rightarrow 0$  соответственно,  $C = -kT/q$ , тогда

$$\frac{d\varphi}{dx} = \sqrt{\frac{8\pi nkT}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \exp(-q\varphi/kT) - \frac{q\varphi}{kT} - 1 \right]}. \quad (17)$$

При подстановке выражения (17) в выражение (13), получаем [12, 13]

$$\sigma = q\mu_n^* n \int_0^{\varphi_s} \frac{(\exp(-q\varphi/kT) - 1) d\varphi}{\sqrt{\frac{8\pi nkT}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \exp(-q\varphi/kT) - \frac{q\varphi}{kT} - 1 \right]}}. \quad (18)$$

Выражения (18) можно упростить, считая, что основной вклад в интеграл дает область значений  $\varphi$ , которая близка к  $\varphi_s$ , следовательно [12]

$$\sigma = q\mu_n^* n \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{8\pi nkT}} \int_0^{\varphi_s} \frac{\exp(-q\varphi_s/kT) - 1}{\exp(-q\varphi/2kT)} d\varphi. \quad (19)$$

Проинтегрировав выражение (19). Получим

$$\sigma = q\mu_n^* n \sqrt{\frac{4\varepsilon\varepsilon_0(kT)^2}{8\pi nkTq^2}} \exp(-q\varphi_s/kT) = \sqrt{2}L_D q\mu_n^* \exp(-q\varphi_s/kT). \quad (20)$$

где  $L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{4\pi q^2 n}}$  толщина пространственного заряда, которая равна длине Дебая.

Таким образом, поверхностное сопротивление электронного полупроводника описывается выражением

$$R_n = \frac{1}{\sqrt{2}L_D q\mu_n^* \exp(-q\varphi_s/kT)}, \quad (21)$$

а для дырочного полупроводника

$$R_p = \frac{1}{\sqrt{2}L_D q\mu_p^* \exp(-q\varphi_s/kT)}, \quad (22)$$

На основании выражения (21) рассчитана зависимость сопротивления сенсора газа на основе ZnO при изменении концентрации метана, которая представлена на рис. 1.

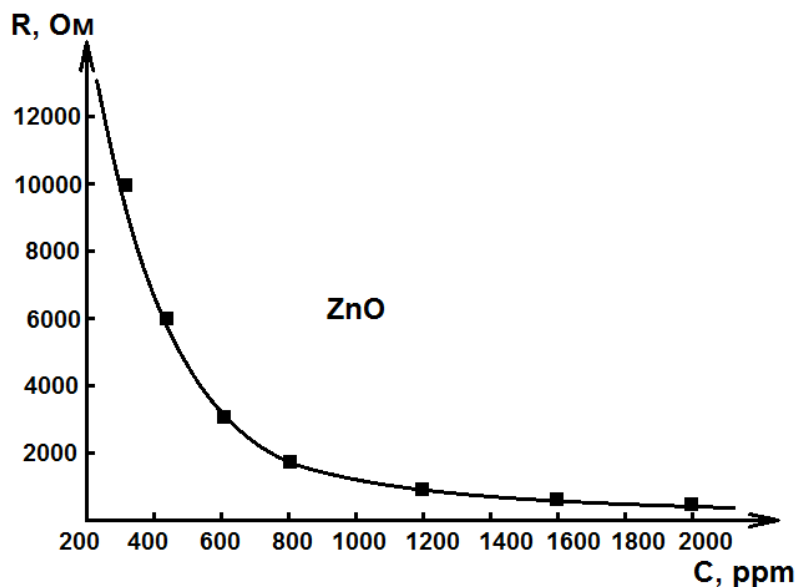


Рисунок 1 – Расчетная зависимость сопротивления газочувствительного сенсора ZnO от изменения концентрации метана

### ВЫВОДЫ

Математическая модель физического механизма возникновения объемного приповерхностного заряда в полупроводниках в первичных газочувствительных полупроводниковых сенсорах описывает зависимость полного приповерхностного сопротивления от действия газа (в нашем случае зависимость его активной составляющей), которая определяется физическими процессами на поверхности полупроводника, описываются распределением электростатического потенциала в слое пространственного заряда на основе уравнения Пуассона. Решение уравнения Пуассона позволило определить зависимость изменения активной составляющей полного сопротивления приповерхностного слоя от заряда на поверхности электронного и дырочного полупроводников при адсорбции молекул газа. Изменение активной составляющей полного сопротивления приповерхностного слоя первичных полупроводниковых газовых сенсоров при адсорбции молекул газа связано с переменной поверхностного потенциала, который однозначно связан с измеряемой концентрацией газа.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мікроелектронні сенсори фізичних величин / за ред. З. Ю. Готри.-Львів: Ліга-Прес, 2002. – 475 с.
2. Датчики: Справочное пособие / Под общ. ред. В.М. Шарапова, Е.С. Полищука. –Москва: Техносфера, 2012. – 624с.
3. Джексон Р.Г. Новейшие датчики / Джексон Р.Г. –Москва: Техносфера, 2007. – 384 с.
4. Schaumburg H. Sensoren / Schaumburg H. – Stuttgart: V.G.Teubner. 1992. – 517 p.
5. Осадчук В.С., Осадчук О.В., Прокопова М.О. Математична модель мікроелектронного частотного газового перетворювача // Вісник Вінницького політехнічного інституту. – 2003, –№4. – с. 94-98.
6. Осадчук О.В., Осадчук В.С., Осадчук Я.О. Математична модель газореактивного ефекту в напівпровідникових сенсорах газу // Вісник Хмельницького Національного університету. Серія: Технічні науки. Хмельницький, 2019, № 2 (271). –С. 160-166. DOI 10.31891/2307-5732-2019-271-2-160-166
7. Осадчук О.В. Радіовиміррювальний перетворювач концентрації газу на транзисторній структурі з від'ємним опором / Осадчук О.В., Осадчук В.С., Осадчук Я.О. // Матеріали МНТК "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання". м. Івано-Франківськ, 15-20 травня 2017 р. – С.12-15.
8. Osadchuk A. Microelectronic Transducer of Gas Concentration based on MOSFET with an Active Inductive Element / Osadchuk A., Osadchuk V., Seletskaya O., Krylik L. // PRZEGLAD ELEKTROTECHNICZNY, ISSN 0033-2097, R. 95 NR 4/2019. –P.237-241
9. Осадчук В.С. Частотний перетворювач газу на основі двох біполярних транзисторів з активним індуктивним елементом / Осадчук В.С., Осадчук О.В., Прокопова М.О. // Вісник Вінницького політехнічного інституту. – 2005, – №2. – С.86-90.

10. Heiland G. Zum Einfluss von adsorbiertem Sauerstoff auf dielektrische Leitfähigkeit von Zinkoxidkristallen / Heiland G. – Berlin: Z.phys., 1954. – 459 p.
11. Бонч-Бруевич В.Л. Физика полупроводников / Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. – М.: Наука, 1990. – 688 с.
12. Шалимова К.В. Физика полупроводников / Шалимова К.В. – М.: Энергия, 1985. – 392 с.
13. Ржанов А.В. Электронные процессы на поверхности полупроводников / Ржанов А.В. – М.: Наука, 1971. – 480 с.

#### REFERENCES

1. Microelectronic sensors of physical quantities / ed. Z. Yu. Gotry.-Lviv: League-Press, 2002. - 475 p.
2. Sensors: Reference / Under total. ed. V.M. Sharapova, ES Polishchuk. –Moscow: Technosphere, 2012. - 624s.
3. Jackson R.G. The latest sensors / Jackson R.G. –Moscow: Technosphere, 2007. - 384 p.
4. Schaumburg H. Sensoren / Schaumburg H. - Stuttgart: B.G.Teubner. 1992. - 517 p.
5. Osadchuk VS, Osadchuk OV, Prokopova MO Mathematical model of microelectronic frequency gas converter // Bulletin of the Vinnitsa Polytechnic Institute. - 2003, –№4. - with. 94-98.
6. Osadchuk OV, Osadchuk VS, Osadchuk YA Mathematical model of gas-reactive effect in semiconductor gas sensors // Bulletin of the Khmelnytsky National University. Series: Technical Sciences. Khmelnytsky, 2019, No. 2 (271). –С. 160-166. DOI 10.31891 / 2307-5732-2019-271-2-160-166
7. Osadchuk OV Radiomeasuring converter of gas concentration on transistor structure with negative resistance / Osadchuk OV, Osadchuk VS, Osadchuk YA // Materials of ISTC "Information Technologies and Computer Modeling". Ivano-Frankivsk, May 15-20, 2017 - P.12-15.
8. Osadchuk A. Microelectronic Transducer of Gas Concentration Based on MOSFET with an Active Inductive Element / Osadchuk A., Osadchuk V., Seletskaya O., Krylik L. // PRZEGLAD ELEKTROTECHNICZNY, ISSN 0033-2097, R. 95 NR 4 / 2019 –P.237-241
9. Osadchuk V.S. Frequency converter of gas based on two bipolar transistors with active inductive element / Osadchuk VS, Osadchuk OV, Prokopova MO // Bulletin of Vinnitsa Polytechnic Institute. - 2005, - №2. - P.86-90.
10. Heiland G. Zum Einfluss von adsorbiertem Sauerstoff auf dielektrische Leitfähigkeit von Zinkoxidkristallen / Heiland G. - Berlin: Z.phys., 1954. - 459 p.
11. Bonch-Bruevich VL Semiconductor Physics / VL Bonch-Bruevich, SG Kalashnikov - Moscow: Nauka, 1990. - 688 p.
12. Shalimova KV Semiconductor Physics / Shalimova KV –М.: Energy, 1985. - 392 p.
13. Rzhzanov AV Electronic processes on the surface of semiconductors / AV Rzhzanov - М.: Science, 1971 - 480 p.

Надійшла в редакцію: 24.07.2019р.

**ОСАДЧУК АЛЕКСАНДР ВЛАДИМИРОВИЧ** – д.т.н., профессор, Винницький національний технічний університет, г. Винниця, Україна

**ОСАДЧУК ВЛАДИМИР СТЕПАНОВИЧ** – д.т.н., профессор, Винницький національний технічний університет, г. Винниця, Україна

**ОСАДЧУК ЯРОСЛАВ АЛЕКСАНДРОВИЧ** – к.т.н., доцент, Винницький національний технічний університет, г. Винниця, Україна