

Распределение подвижных ионов в тонких пленках диэлектрика вблизи границы диэлектрик–полупроводник

© С.Г. Дмитриев[¶], Ю.В. Маркин

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
141120 Фрязино, Россия

(Получена 2 сентября 1999 г. Принята к печати 16 февраля 1999 г.)

Рассмотрено влияние полупроводника на распределение подвижных ионов в тонких пленках диэлектрика вблизи границы диэлектрик–полупроводник. Проведен расчет степени локализации ионов у границы раздела под действием поля в пленке. Определен порог их делокализации при уменьшении напряжения на структуре. Обсуждается связь между порогами делокализации ионов и пиками ионных токов на динамических вольт-амперных характеристиках системы.

Подвижные при повышенных ($T \sim 300 \div 600$ К) температурах ионы в тонких ($d \sim 100 \div 1000$ Å) пленках диэлектрика привлекают интерес в связи с их влиянием на параметры этих структур. В Si–SiO₂ это обычно ионы щелочных металлов, в частности ионы натрия, которые становятся подвижными уже при комнатных температурах. Концентрация ионов в пленке (на единицу площади) достигает значений $N_s \sim 10^{12} \div 10^{13}$ см⁻²; они могут индуцировать как быстрые электронные поверхностные состояния на границе раздела (ГР), так и ловушки в диэлектрике [1].

При изучении этих вопросов необходима информация о степени локализации ионов вблизи ГР под действием поля, прижимающего их к ней [1], а также сведения о процессах захвата ионов на поверхность и процессах их выброса (эмиссии) в диэлектрик (см., например, [2,3]). Распределение ионов в пленке (для структур металл–диэлектрик–металл) рассматривалось в работах [4,5] в гидродинамическом приближении (в терминах концентрации ионов).

В настоящей работе анализ распределения ионов (в структурах металл–диэлектрик–полупроводник (МДП)) проводится на основе больцмановского распределения ионов по энергиям; определяются пороги делокализации ионов (при уменьшении напряжения на структуре) и влияние на них полупроводника. Рассматриваются условия, при реализации которых распределение ионов по энергиям вблизи ГР может стать вырожденным.

1. Распределение ионов в пленке

Потенциал $\varphi(z)$ в пленке (для однократно положительно заряженных ионов) определяется уравнением Пуассона

$$\varepsilon_i \frac{d^2 \varphi}{dz^2} = -4\pi q N_i(z), \quad (1)$$

где ε_i — диэлектрическая проницаемость диэлектрика, q — элементарный заряд, $N_i(z)$ — концентрация ионов. Обычно для определения распределения ионов используется условие равенства нулю (в равновесных условиях)

плотности тока $j_z(z)$:

$$j_z = q\mu\mathcal{E}_z N_i - qDdN_i/dz \quad (2)$$

(где μ — подвижность, D — коэффициент диффузии, \mathcal{E} — поле) с учетом соотношения Эйнштейна ($\mu = qD/kT$, где k — постоянная Больцмана), являющегося следствием больцмановского распределения частиц по энергиям.

При описании электронной подсистемы часто используется другой эквивалентный подход, когда концентрация электронов описывается непосредственно в терминах распределения Больцмана (или Ферми). При этом необходима дополнительная (и обычно известная) информация об эффективной плотности и спектре собственных и дефектных электронных состояний.

В случае ионов эта информация менее доступна, однако обычно ионы в твердом теле хорошо локализованы, а их движение имеет характер прыжков между соседними состояниями. Эта ситуация соответствует узкому уровню энергий, и в качестве первого шага мы рассмотрим модель с одним моноэнергетическим ионным уровнем E_i :

$$N_i(z) = N_0 \exp(-u); \quad u = (E_i + q\varphi - F_i)/kT, \quad (3)$$

где u — нормированная энергия иона, отсчитываемая от уровня Ферми F_i , а N_0 — эффективная плотность состояний, величину которой мы обсудим позже.

Вид решения уравнения (1) для потенциала (или энергии u) зависит от знака его первого интеграла I_0 :

$$I_0(z) = \varepsilon_i \mathcal{E}^2(z)/(8\pi kT) - N_i(z) = \text{const} > 0, \quad (4)$$

где интересующий нас случай локализации ионов у внутренней границы диэлектрика с полупроводником ($z = d$) соответствует $I_0 > 0$.

При заданной поверхностной концентрации ионов в пленке N_s вид распределения $\varphi(z)$

$$\varphi(z) - \varphi_0 = kT [u(z) - u_0]/q;$$

$$u(z) - u_0 = \ln \{ \text{sh}^2[A(z)] / \text{sh}^2 \alpha \} \quad (5)$$

[¶] E-mail: sgd177@ire216.msk.su

определяется параметром α :

$$\alpha = \ln \left[(\beta^2 - 1)^{1/2} + \beta \right]; \quad \beta = q\mathcal{E}_0 r_0 / kT = \text{ch } \alpha;$$

$$A(z) = \alpha - q\mathcal{E}_0 z \text{th } \alpha / (2kT), \quad (6)$$

$$r_0^2 = \varepsilon_i kT / [8\pi q^2 N_0 \exp(-u_0)]. \quad (7)$$

Здесь индекс 0 у φ_0 , u_0 , \mathcal{E}_0 и r_0 относится к внешней границе диэлектрика ($z = 0$), а r_0 — дебаевский радиус. Из условия $I_0 > 0$ следует, что $\beta > 1$ и $A(z) > 0$ (при $0 \leq z \leq d$), а само условие означает, что полевая длина $l_{\mathcal{E}} = kT / (q\mathcal{E})$ везде меньше дебаевского радиуса r ; при этом экранирование существенно нелинейно.

Для вычисления α можно использовать равенство

$$I_0(0) = I_0(d), \quad (8)$$

$$\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_i; \quad \mathcal{E}_i = 4\pi q N_s / \varepsilon_i, \quad (9)$$

где (9) является следствием теоремы Гаусса для пленки, индекс 1 относится к внутренней поверхности ($z = d$) диэлектрика, а \mathcal{E}_i — поле ионов. В терминах α уравнение (8) принимает следующий вид:

$$\exp(\Delta u) - 1 = [(1 + \mathcal{E}_i / \mathcal{E}_0)^2 - 1] \text{ch}^2 \alpha, \quad (10)$$

где $\Delta u = u_0 - u_1$. Теперь из (10) и (5) (рассматриваемом при $z = d$) можно получить уравнение для α (при заданных N_s и \mathcal{E}_0):

$$\alpha = (\mathcal{E}_0 / \mathcal{E}_d) \text{th } \alpha + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + \mathcal{E}_i / \mathcal{E}_0 + \text{th } \alpha}{1 + \mathcal{E}_i / \mathcal{E}_0 - \text{th } \alpha} \right), \quad (11)$$

$$\mathcal{E}_d = 2kT / (qd), \quad (12)$$

где \mathcal{E}_d — характерное поле пленки. Остальные величины ($\Delta\varphi = \varphi_0 - \varphi_1$, u_0 и u_1) могут быть найдены из уравнений (10) и (6), а распределение $N_i(z)$ — из уравнений (4) и (8).

Заметим, что концентрация ионов $N_i(z)$ и падение напряжения на пленке $\Delta\varphi$ (а значит, и напряжение V_g на всей системе) на самом деле не зависят от эффективной плотности состояний N_0 . Действительно, уже из (3) следует, что изменения N_0 всегда могут быть компенсированы изменением положения (перенормировкой) уровня Ферми. Возможность нарушения этого положения мы обсудим позже, после расчета $N_i(z)$.

Далее, случай (вырожденный) $\alpha = 0$ соответствует $\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_{\text{th}}$; из (11) при $\alpha \rightarrow 0$ можно получить

$$\mathcal{E}_{\text{th}} = \frac{1}{2} \mathcal{E}_i \left[-1 + (1 + 4\mathcal{E}_d / \mathcal{E}_i)^{1/2} \right], \quad (13)$$

$$(\Delta u)_{\text{th}} = 2 \ln(1 + \mathcal{E}_i / \mathcal{E}_{\text{th}}). \quad (13a)$$

При этом решение имеет вырожденный вид

$$u(z) - u_0 = 2 \ln [1 - (\mathcal{E}_{\text{th}} / \mathcal{E}_d)(z/d)].$$

Обычно $\mathcal{E}_{\text{th}} \approx \mathcal{E}_d$. Действительно, проведем оценки: при $kT = 50$ мэВ, $d = 1000$ Å, $N_s = 10^{12}$ см⁻² и $\varepsilon_i = 3.9$ (для SiO₂ [7]), величина $\mathcal{E}_d \approx 0.86 \cdot 10^4$ В/см, а $\mathcal{E}_i \approx 4.6 \cdot 10^5$ В/см, так что $\lambda = \mathcal{E}_d / \mathcal{E}_i \ll 1$. Этот случай ($\lambda \ll 1$) наиболее интересен экспериментально [1], и мы будем рассматривать его в дальнейшем. При этом $\mathcal{E}_{\text{th}} \approx \mathcal{E}_d(1 - \lambda)$, т.е. $\mathcal{E}_{\text{th}} \approx \mathcal{E}_d$. В области вблизи \mathcal{E}_{th} величина $\alpha^2 \approx 3(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_{\text{th}}) / \mathcal{E}_d$ (см. (П.1.2)).

Степень локализации ионов у границы раздела определяется их средним расстоянием от нее: $\delta z_i = d - \bar{z}_i$, где

$$N_s \bar{z}_i = \int_0^d z N_i(z) dz,$$

которое с помощью уравнения Пуассона удобно представить в виде

$$\delta z_i = (\Delta\varphi - \mathcal{E}_0 d) / \mathcal{E}_i, \quad (14)$$

т.е. степень делокализации ионов определяется нелинейной частью распределения потенциала.

В случае больших полей ($\alpha \gg 1$, $\mathcal{E}_0 \gg \mathcal{E}_d$) значения α определяются формулой (11) с $\text{th } \alpha = 1$:

$$\Delta u \approx q\mathcal{E}_0 d / (kT) + 2 \ln [1 + \mathcal{E}_i / (2\mathcal{E}_0)], \quad (15)$$

$$\delta z_i \approx l_i \ln [1 + \mathcal{E}_i / (2\mathcal{E}_0)], \quad (16)$$

$$l_i = 2kT / (q\mathcal{E}_i). \quad (17)$$

Величина $l_i \sim 10$ Å ($l_i \approx 20$ Å при $kT = 50$ мэВ, $N_s = 10^{12}$ см⁻²). Случай $\delta z_i \ll l_i$ возможен при $\mathcal{E}_0 \gg \mathcal{E}_i$, когда $\delta z_i \approx kT / (q\mathcal{E}_0) \rightarrow 0$, однако вряд ли реален. Кроме того, толщины нарушенных слоев вблизи ГР порядка 10 Å [6], что также ограничивает возможность более сильной локализации.

Интересно отметить, что и в области $\mathcal{E}_0 \ll \mathcal{E}_i$ зависимость $\delta z_i(\mathcal{E}_0)$ слабая, и $\delta z_i \sim 100$ Å лишь при $\mathcal{E}_i / \mathcal{E}_0 \sim 100$. В этом случае ионы удерживаются у границы уже не внешним полем, а полем электронов полупроводника.

В экспериментах на МДП структурах снимаются зависимости токов или емкостей от $V_g = \Delta\varphi(\mathcal{E}_0) + \varphi_s(\mathcal{E}_0)$, где φ_s — потенциал ГР (отсчитываемый от объема полупроводника). Реально такие зависимости "сдвинуты" на величину контактной разности потенциалов (КРП), $\varphi_c \sim (0.1 \div 1)$ В [7,8], между металлом и полупроводником. Зависимость φ_s от V_g будет рассмотрена в следующем разделе.

2. Изгиб зон в полупроводнике

Величина изгиба зон в полупроводнике определяется полем $\mathcal{E}_s = (\varepsilon_i \mathcal{E}_0 + 4\pi q N_s) / \varepsilon_s$ на его поверхности (где ε_s — диэлектрическая проницаемость полупроводника) и может быть найдена с помощью первого интеграла

уравнения Пуассона:

$$\mathcal{E}_s^2 = (8\pi kT/q\epsilon_s) \int_0^{v_s} \rho(v)dv, \quad (18)$$

где $v_s = -q\varphi_s/kT < 0$, $\rho(v)$ — плотность заряда в полупроводнике. Рассмотрим донорный полупроводник с концентрацией доноров N_D и энергией ионизации E_d .

При повышенных ($T \sim 600$ К) температурах полупроводник становится собственным, и необходимо учитывать заряд дырок, а в больших полях $\mathcal{E}_s \sim 10^5 \div 10^6$ В/см вблизи поверхности нужно учитывать вырождение электронов на донорных уровнях и в зоне проводимости. При этом [7]

$$\rho(v) = qN_D \left[1 + (g_1/g_0) \exp(\varepsilon_d + f_0 - v) \right]^{-1} + qN_v \exp(v - \varepsilon_g - f_0) - qN_c \Phi_{1/2}(f_0 - v), \quad (19)$$

где $\Phi_{1/2}$ — интеграл Ферми–Дирака, $\varepsilon_d = E_d/kT$, $\varepsilon_g = E_g/kT$, $f_0 = F_e/kT$, E_g — ширина запрещенной зоны, F_e — уровень Ферми электронов, отсчитываемый от дна зоны проводимости, $N_c(N_v)$ — плотность состояний в зоне проводимости (валентной зоне), $g_0(g_1)$ — факторы вырождения для пустого (заполненного) уровней.

Для кремния [8]: $\varepsilon_i = 3.9$; $\varepsilon_s = 11.9$; $N_c = 2.8 \cdot 10^{19} \times (T/300)^{3/2} \text{ см}^{-3}$; $N_v = 1.04 \cdot 10^{19} \cdot (T/300)^{3/2} \text{ см}^{-3}$; $E_g = 1.12$ эВ, $E_d = 0.045$ эВ (для атомов фосфора); $g_0 = 1$ и $g_1 = 2$.

Для этих параметров и $N_D \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ значения $|f_0| \gg 1$ (см. Приложение 2): $|f_0|(500 \text{ К}) \approx 11$ (0.47 эВ); $|f_0|(300 \text{ К}) \approx 10.2$ (0.26 эВ). При этом в реальном диапазоне температур ($T \sim 200 \div 600$ К) заполнением донорных уровней в объеме полупроводника

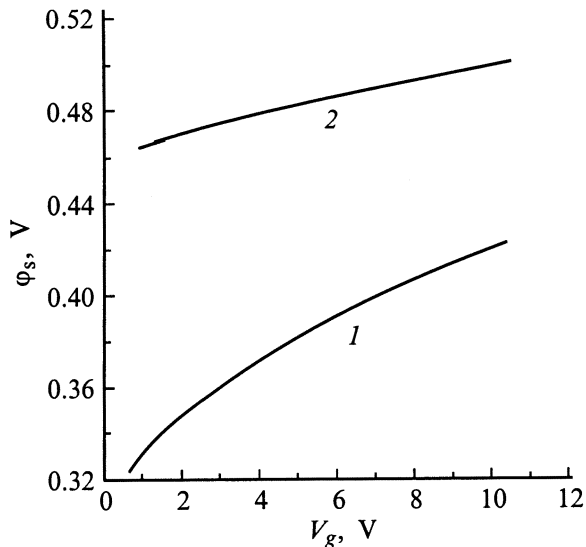


Рис. 1. Величина изгиба зон φ_s в полупроводнике. V_g — напряжение; 1 — $N_s = 10^{12} \text{ см}^{-2}$, 2 — $N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. $T = 500$ К, $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $d = 1000$ Å.

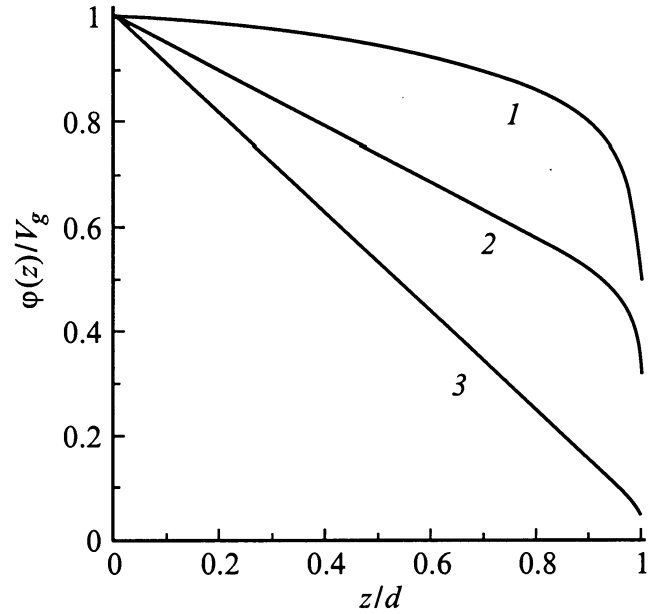


Рис. 2. Распределение потенциала $\varphi(z)$ в пленке. V_g — напряжение; 1 — $V_g = 0.95$ В, 2 — $V_g = 1.5$ В, 3 — $V_g = 10$ В. $N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$; $T = 500$ К, $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $d = 1000$ Å.

можно пренебречь, а влияние дырок сказывается лишь при температурах $T \sim 500 \div 600$ К.

После определения $\varphi_s(\mathcal{E}_0)$ распределение $\varphi(z)$ потенциала в пленке можно найти по формуле

$$\varphi(z) = \varphi_s + kT[u(z) - u_1]/q;$$

в частности, $V_g = \varphi(d)$. Заметим, что $kTu_1/q \neq \varphi_s + |f_0|$.

Полученная таким образом зависимость $\varphi_s(V_g)$ при $T = 500$ К приведена на рис. 1. Как показывает сравнение φ_s и $|f_0|$, вырождение на поверхности сказывается уже при этих температурах.

Нормированное (на V_g) распределение потенциала в пленке при различных значениях V_g приведено на рис. 2. При больших V_g величина $\varphi_s \sim (0.01 \div 0.1)V_g$ относительно мала, а в случае $V_g \sim 1$ В величина $\varphi_s \sim \Delta\varphi$, и влияние полупроводника существенно.

3. Пороги делокализации ионов в пленке вблизи границы раздела

Расстояние центра тяжести ионов δz_i от ГР в зависимости от V_g приведено на рис. 3. В области напряжений $V_g \sim 1$ В наблюдается пороговый рост смещений ионов — делокализация; пороговые поля при этом $\mathcal{E}_0 \sim \mathcal{E}_d$. Точки на рисунке соответствуют расчету по формуле (16); отличия ($\sim 10\%$) заметны лишь вблизи порога.

В экспериментах это проявится в виде порогового роста квазистатических ионных токов на динамической вольт-амперной характеристике (ВАХ). Плотность тока в МДП структуре можно определить по формуле

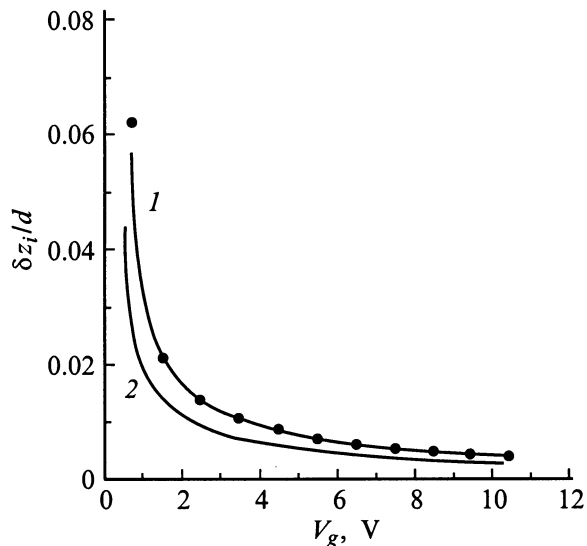


Рис. 3. Среднее расстояние δz_i ионов от границы раздела диэлектрик–полупроводник. V_g — напряжение; 1 — $T = 500$ К, 2 — $T = 350$ К. $N_s = 10^{12}$ см $^{-2}$; $N_D = 10^{15}$ см $^{-3}$, $d = 1000$ Å. Точки — расчет по формуле (16).

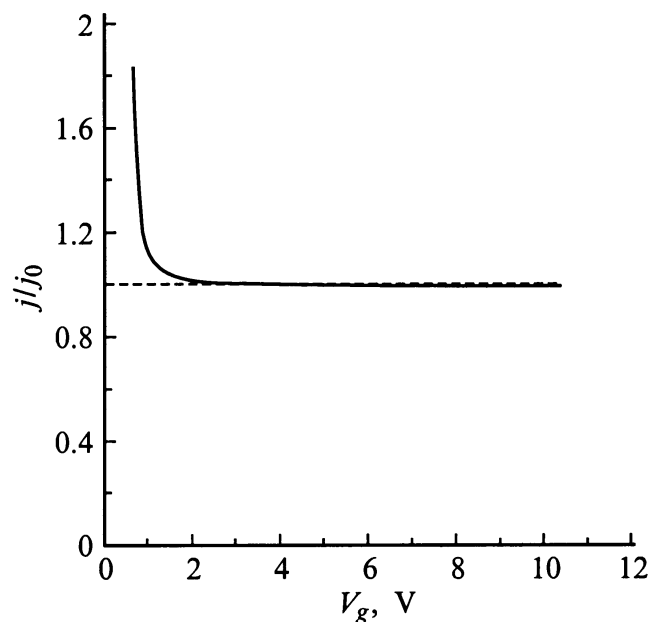


Рис. 4. Зависимость квазистатического тока j от напряжения вблизи порога делокализации. V_g — напряжение, $N_s = 10^{12}$ см $^{-2}$, $N_d = 10^{15}$ см $^{-3}$, $d = 1000$ Å, $T = 500$ К. Штриховая линия — уровень емкостного тока j_0 диэлектрической пленки.

$j = d\sigma/dt$, где $\sigma = \epsilon_i \mathcal{E}_0 / 4\pi$ — плотность поверхностного заряда на металле. Для линейной развертки напряжения ($\partial V_g / \partial t = \beta_v$)

$$j = (\epsilon_i \beta_v / 4\pi) \partial \mathcal{E}_0 / \partial V_g;$$

$$\partial \mathcal{E}_0 / \partial V_g = (1 - \partial \varphi_s / \partial V_g) \partial \mathcal{E}_0 / \partial (\Delta \varphi). \quad (20)$$

В условиях обогащения ($\varphi_s \gg kT$) величина $\partial \varphi_s / \partial V_g \sim 0.01 \div 0.1$ (см. рис. 1), а в больших полях ($\mathcal{E}_0 \gg \mathcal{E}_d$) величина $\partial \mathcal{E}_0 / \partial (\Delta \varphi) \approx d^{-1}$. Тогда ток $j \approx j_0$, где

$$j_0 = C_0 \beta_v; \quad C_0 = \epsilon_i / (4\pi d), \quad (21)$$

а C_0 — емкость (на единицу площади) диэлектрика (см. (П.1.4–5)). При $\beta_v = 20$ мВ/с $d = 1000$ Å, например, $j_0 \approx 7 \cdot 10^{-10}$ А/см 2 .

Отношение j/j_0 не зависит от β_v , и результат расчета этой величины представлен на рис. 4. Как видно из рис. 3–4, пороговый рост токов соответствует порогу делокализации ионов, и $j \approx 2j_0$, при $\alpha = 0$ (см. П.1.6–7). Однако вид кривой обусловлен не столько ростом величины тока, сколько тем, что этот рост происходит в узкой области напряжений, отвечающей диапазону полей $\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_d \sim 0.1 \mathcal{E}_d$ (см. Приложение 1). Таким образом явление связано с изменением характера экранирования поля в пленке в указанной области параметров (т.е. с изменением зависимости $\Delta \varphi(\mathcal{E}_0)$). Более подробное исследование ионных пиков требует дополнительных выкладок и будет проведено в другой работе.

4. Концентрация ионов вблизи границы раздела и их распределение по энергиям

Концентрацию ионов $N_i(d)$ вблизи ГР можно определить из формулы (8) (с учетом формул (3)–(4), (9)):

$$N_i(d) = N_i^0 (1 + 2\mathcal{E}_0 / \mathcal{E}_i) [1 - \exp(-\Delta u)]^{-1}, \quad (22)$$

$$N_i^0 = 2\pi q^2 N_s^2 / (\epsilon_i kT), \quad (23)$$

где характерная концентрация $N_i^0 \approx 0.94 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$ ($kT = 25$ мэВ, $N_s = 10^{12}$ см $^{-2}$) и $N_i^0 \approx 2.35 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$ ($N_s = 5 \cdot 10^{12}$ см $^{-2}$). Как и отмечалось ранее, $N_i(d)$ не зависит от эффективной плотности состояний N_0 . Зависимость $N_i(d)$ от напряжения представлена на рис. 5. Точки соответствуют расчету по формуле

$$N_i(d) = N_i^0 (1 + 2\mathcal{E}_0 / \mathcal{E}_i), \quad (22')$$

следующей из (22) в пренебрежении $\exp(-\Delta u)$ (при $\Delta u \gg 1$).

При диффузии ионов по междоузлиям в решетке $N_0 \sim a_0^{-3}$, где a_0 — размер элементарной ячейки кристалла ($a_0 = 3.3$ Å для SiO $_2$ [9]), т.е. $N_0 \sim 10^{22} \div 10^{23}$ см $^{-3}$. Поскольку характерные значения $N_i(d) \sim 10^{19} \div 10^{21}$ см $^{-3}$, величина $u_1 = -\ln[N_i(d)/N_0] \sim 4 \div 5$ или больше, и вырождение отсутствует даже на поверхности.

В таком случае система может быть описана в терминах концентрации ионов (гидродинамическом приближении) без явного учета плотности состояний. При этом распределение ионов по энергиям оказывается бoльцмановским автоматически (при учете соотношения Эйнштейна).

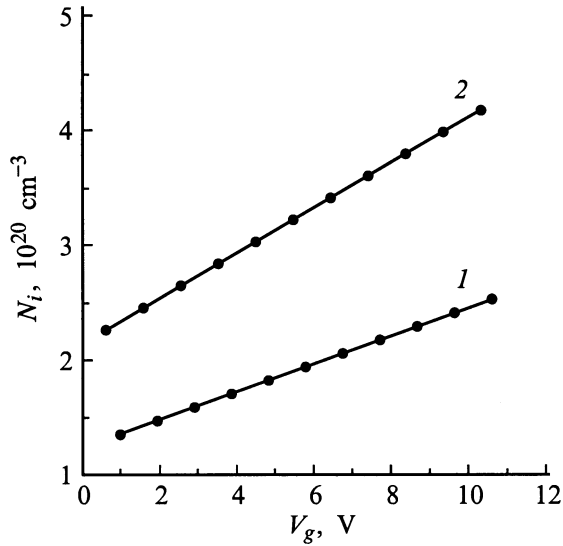


Рис. 5. Концентрация ионов N_i на границе раздела диэлектрик–полупроводник. V_g — напряжение; 1 — $T = 500$ К, 2 — $T = 300$ К. $N_s = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²; $N_d = 10^{15}$ см⁻³, $d = 1000$ Å. Точки — расчет по формуле (22').

Однако при наличии на поверхности еще одного ионного состояния с большей энергией связи E_2 ,

$$E_1 - E_2 > kT u_1, \quad (24)$$

уровень этого состояния окажется расположенным ниже уровня Ферми ионов. В таком случае необходимо учитывать эффекты вырождения и использовать распределение Гиббса (учитывая, что одно состояние в решетке может занимать только один ион).

Ионные состояния могут быть индуцированы границей раздела и дефектами решетки. Концентрация дефектов на ГР Si–SiO₂ довольно велика (порядка атомной) из-за расогласования решеток [10], дефектные ионные состояния существуют и в объеме диэлектрика [11]. Информация о спектре ионных состояний обычно отсутствует, однако характерные масштабы энергий связи ионов в решетке и энергий активации ионных процессов порядка $0.1 \div 1$ эВ или больше. Поскольку величина $kT u_1$ из (24) может достигать значений $\sim 0.1 \div 0.2$ эВ, возможность реализации этого условия вполне реальна. Его следствием будет накопление ионов на обсуждаемых состояниях.

В заключение отметим: в работе проведен расчет распределения потенциала в МДП структурах с подвижными ионами в диэлектрике (рис. 2). Показано, что в больших полях порядка поля ионов \mathcal{E}_i (см. (9)) ионы локализованы на расстояниях порядка $l_i \sim 10$ Å от ГР (см. (16), (17)). Однако их смещение на большие (~ 100 Å) расстояния при изменении напряжения происходит в слабых $\sim \mathcal{E}_d \ll \mathcal{E}_i$ (см. (12)) полях (на металле) пороговым образом (рис. 3) при напряжениях ~ 1 В. При этом вблизи порога ионы удерживаются у ГР полем электронов полупроводника (а не внешним полем). Этот

процесс соответствует пороговому росту ионных токов на квазистатических ВАХ системы (рис. 4).

В работе определена также объемная концентрация ионов вблизи ГР (см. (22), (23) и рис. 5). Обсуждены условия применимости гидродинамического приближения для описания пространственного распределения ионов и возможность вырождения распределения ионов по энергиям вблизи ГР (см. (24)).

Приложение 1

При малых $\alpha \ll 1$ уравнение (11) можно, с точностью до слагаемых $\sim \alpha^2 \lambda^3$ (где $\lambda = \mathcal{E}_d / \mathcal{E}_i$), представить в виде $\alpha \approx (1 + x) \text{th } \alpha$, где

$$x = \mathcal{E}_0 / \mathcal{E}_d - 1 + (1 + \mathcal{E}_i / \mathcal{E}_0)^{-1}. \quad (\text{П.1.1})$$

Его решение при малых x имеет вид

$$\alpha^2 \approx 3x \left(1 + \frac{1}{5}x \right). \quad (\text{П.1.2})$$

Аналогичным образом можно получить и выражение для производной $\partial(\alpha^2) / \partial \mathcal{E}_0$ при $\alpha = 0$:

$$\partial(\alpha^2) / \partial \mathcal{E}_0 = (3 / \mathcal{E}_d)(1 + \gamma_1^2 \gamma_2) / (1 - \gamma_1^3), \quad (\text{П.1.3})$$

где $\gamma_1 = \mathcal{E}_{\text{th}} / (\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_{\text{th}})$, $\gamma_2 = \mathcal{E}_d \mathcal{E}_i / (\mathcal{E}_{\text{th}})^2$.

В больших полях ($\mathcal{E}_0 \gg \mathcal{E}_d$) выражение для производной $\partial \mathcal{E}_0 / \partial (\Delta \varphi)$ можно получить из формулы (15):

$$\partial \mathcal{E}_0 / \partial (\Delta \varphi) \approx d^{-1} (1 - \gamma_3)^{-1}, \quad (\text{П.1.4})$$

где $\gamma_3 = \mathcal{E}_d \mathcal{E}_i / [(2\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_i) \mathcal{E}_0]$, а выражение для тока — из формулы (20)

$$j \approx j_0 (1 - \partial \varphi_s / \partial V_g) (1 - \gamma_3)^{-1}. \quad (\text{П.1.5})$$

Факторы $\partial \varphi_s / \partial V_g$ и γ_3 в скобках имеют один порядок величины (~ 0.01), а их влияние на ток компенсирует друг друга; при этом $j \approx j_0$. В больших полях $\Delta j = j - j_0 < 0$.

При $\alpha = 0$, используя формулы (П.1.2)–(П.1.3) и пренебрегая относительно малыми слагаемыми $\sim \lambda^2$, получаем

$$\partial \mathcal{E}_0 / \partial (\Delta \varphi) \approx 2d^{-1} (1 + 3\lambda)^{-1}, \quad (\text{П.1.6})$$

$$j \approx 2j_0 (1 - \partial \varphi_s / \partial V_g) (1 + 3\lambda)^{-1}. \quad (\text{П.1.7})$$

Здесь $j \approx 2j_0$ ($j < 2j_0$), однако отличия j от $2j_0$ могут достигать величин $\sim (1 \div 10)\%$.

Приложение 2

Интеграл $J = \int_0^{v_s} \rho(v) d(v)$ из формулы (18) с $\rho(v)$ из формулы (19) можно представить в виде

$$J = qN_D \left\{ v_s + \ln [1 + (g_1/g_0) \exp(\varepsilon_d + f_0 - v_s)] - \ln [1 + (g_1/g_0) \exp(\varepsilon_d + f_0)] \right\} + qN_V \exp(-\varepsilon_g - f_0) \times (-1 + \exp v_s) - qN_c [\Phi_{3/2}(f_0) - \Phi_{3/2}(f_0 - v_s)]; \quad (\text{П.2.1})$$

$$\Phi_v(x) = [1/\Gamma(v+1)] \int_0^{\infty} \frac{z^v dz}{1 + \exp(z-x)},$$

где $\Gamma(v)$ — гамма-функция. Последнее слагаемое может быть получено интегрированием по потенциалу с последующим интегрированием по энергии по частям.

Положение уровня Ферми f_0 в объеме полупроводника определяется условием электронейтральности $\rho(0) = 0$. Однако при $\lambda_1 \ll 1$, где

$$\lambda_1 = (g_1/g_0)(N_D/N_c) \exp \varepsilon_d, \quad (\text{П.2.2})$$

можно пренебречь вырождением электронов на донорном уровне ($\exp(\varepsilon_d + f_0) \ll 1$) и тем более в зоне проводимости. При этом (все доноры заряжены) уравнение для f_0 упрощается, и (в рамках статистики Больцмана для электронов и дырок) можно получить

$$f_0 = \ln(\delta N_D/N_c),$$

$$\delta = \left\{ 1 + [1 + \lambda_2^2(1 + \lambda_1)]^{1/2} \right\} / [2(1 + \lambda_1)], \quad (\text{П.2.3})$$

где $\lambda_2 = 2n_i/N_D$, $n_i^2 = N_c N_v \exp(-\varepsilon_g)$, n_i — собственная концентрация, а λ_2 определяет степень влияния дырок на f_0 . Таким образом, в случае мелких уровней малой концентрации ($\lambda_1 \ll 1$) заполнением донорных уровней можно пренебречь вплоть до температур $T \sim 200$ К, а влияние дырок может сказаться ($\lambda_2 \sim 1$) лишь при высоких температурах $T \sim 600$ К и малых концентрациях $N_D \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

После определения f_0 величину v_s можно найти из (18) с помощью (П.2.1).

Список литературы

- [1] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [2] С.Г. Дмитриев, Ю.В. Маркин. ФТП, **30**, 1231 (1996).
- [3] С.Г. Дмитриев, Ю.В. Маркин. ФТП, **32**, 1439 (1998).
- [4] A.G. Tangena, J. Middelhoek, N.F. de Rooij. J. Appl. Phys., **49**, 2876 (1978).
- [5] V.P. Romanov, Yu.A. Chaplygin. Phys. St. Sol. (a), **53**, 493 (1979).
- [6] Ф. Бехшгедт, Р. Эндерлайн. *Поверхность и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1900).
- [7] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [8] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984).
- [9] В.А. Гриценко. *Строение и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП структурах* (Новосибирск, Наука, 1993).
- [10] F.J. Himpsel, F.R. McFeely, A. Taled-Ibrahimi, J.A. Yarmoff, G. Hollander. Phys. Rev. B, **38**, 6084 (1988).
- [11] Д.К. Белашенко. УФН, **169**, 361 (1999).

Редактор В.В. Чалдышев

Distribution of mobile ions in thin dielectric films near the dielectric–semiconductor interface

S.G. Dmitriev, Yu.V. Markin

Institute of Radio Engineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences,
141120 Fryazino, Russia

Abstract The influence of the semiconductor on the mobile ion distribution in thin dielectric films near the dielectric–semiconductor interface is considered. Calculation of ion localization degree near the interface under the electric field action in a film is carried out. The delocalization threshold is determined when the voltage drop on the structure is decreasing. The relationship between delocalization thresholds and ionic current peaks peculiar to dynamic current-voltage characteristics of the system is discussed.