

## МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗРЫВА ЗОН НА ГЕТЕРОГРАНИЦЕ ПО ИЗМЕРЕНИЯМ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК $m-s$ -ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Бычковский Д. Н., Константинов О. В., Панахов М. М.

Предложена методика определения зон на гетерогранице по зависимостям концентрации легирующей примеси от напряжения, полученных путем численного дифференцирования вольт-фарадных характеристик  $m-s$ -структур с изотипным гетеропереходом. Данный метод отличается высокой точностью (ошибка не превосходит 3%) и простотой. Построены аппроксимационные выражения для интегральной функции  $K(u)$ , которая описывает толщину проводящей области. Использование аппроксимационных выражений для  $K(u)$  позволяет значительно уменьшить время расчета.

*Введение.* В настоящее время существуют три экспериментальных метода определения разрыва зон на гетеропереходе. Наиболее признанным методом является рентгеновская фотоэмиссия [1]. При этом измеряется спектр электронов, эмитируемых при облучении полупроводника монохроматическим рентгеновским излучением. Как видно из рис. 1, а, максимальной кинетической энергией  $E_{\max}$  будут обладать электроны, вырванные фотоном с вершины валентной зоны. Для определения энергии  $E_{\max}$  производится экстраполяция высокоэнергетического участка спектра электронов (рис. 1, б). При покрытии полупроводника тонким эпитаксиальным слоем, образующим с ним гетеропару, происходит сдвиг максимальной энергии спектра  $E_{\max}$ . Этот сдвиг и определяет величину разрыва в валентной зоне. Этот метод обладает довольно значительной погрешностью (не менее 0.05 эВ).

Другой метод основан на измерении дискретного спектра электронов в квантовой яме [2]. При этом параметры спектра зависят от ширины ямы и величины разрыва зон на гетеропереходе. Этот метод также обладает значительной погрешностью. Его недостатком являются неточности, возникающие из-за флуктуаций ширины ямы.

Третий метод — термоэмиссионный [3]. Он основан на измерении зависимости сквозного электрического тока, протекающего от контакта А к контакту В в гетероструктуре, изображенной на рис. 2, а. Протеканию дырок препятствует потенциальный барьер  $\Delta E_v$ , из-за которого зависимость электрического тока через структуру от температуры приобретает форму закона Ричардсона:

$$I = I_0 \exp(-\Delta E_v/kT), \quad (1)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана. Измерения производятся при низких температурах, и по зависимости  $\ln I$  от  $1/T$ , которая схематически показана на рис. 2, б, находится величина разрыва валентной зоны  $\Delta E_v$ .

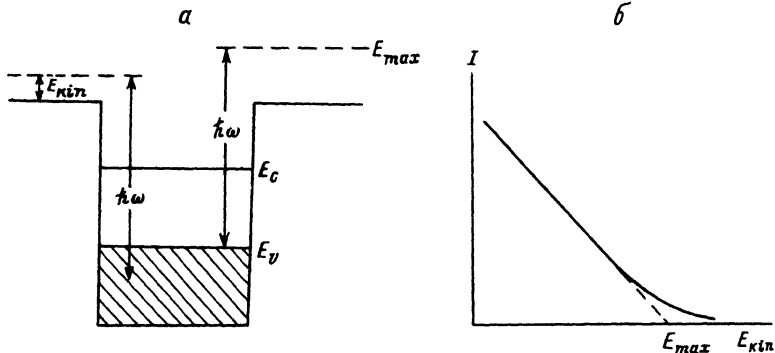


Рис. 1. Изображение метода рентгеновской фотоэмиссии измерения разрыва зон на гетерогранице. а — взаимодействие фотона, обладающего энергией  $\omega$ , с полупроводником; б — спектральная зависимость эмитируемых электронов.

$$\ln I = \ln I_0 - \Delta E_v / kT, \quad (2)$$

и, таким образом, тангенс угла наклона характеристики ( $\operatorname{tg} \alpha$ ) равен  $\Delta E_v / k$ . Поэтому для определения  $\Delta E_v$  достаточно измерить угол наклона характеристики. При таком способе измерения получается величина  $\Delta E_v$  с погрешностью 0.02—0.03 эВ ( $\sim 10\%$ ).

Для измерения разрыва зон  $\Delta E_v$  или  $\Delta E_c$  может быть использован емкостной метод. Он был впервые предложен для этой цели в работе [4]. Предметом исследования являлись вольт-фарадные характеристики (ВФХ) структуры металл—широкозонный полупроводник—узкозонный полупроводник. Однако в этой работе не было произведено полного теоретического анализа ВФХ, измерение которой позволяет в принципе определить величину разрыва  $\Delta E_c$ , если широкозонный и узкозонный полупроводники легированы донорной примесью. В более поздней работе Кремера [5] было даже высказано мнение о том, что вольт-фарадные измерения вряд ли могут позволить извлекать информацию о величине разрыва зон.

В наших работах [6—8], однако, было теоретически показано, что измерение ВФХ позволяет определить величину разрыва зон  $\Delta E_c$  как в случае широкозонной, так и в случае узкозонной прослойки. Энергетические диаграммы  $m$ — $s$ -гетероструктур  $n$ -типа в термодинамическом равновесии схематически изображены на рис. 3. Следует обратить внимание на то, что в прослойке имеется квазинейтральная область, так что прослойка должна быть достаточно толстой. С другой

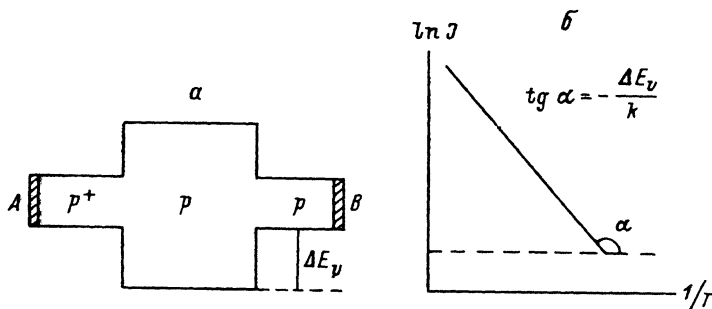


Рис. 2. Изображение термоэмиссионного метода определения разрыва зон на гетерогранице. а — исследуемая гетероструктура (ток протекает от контакта А к контакту В); б — зависимость электрического тока через структуру от температуры.

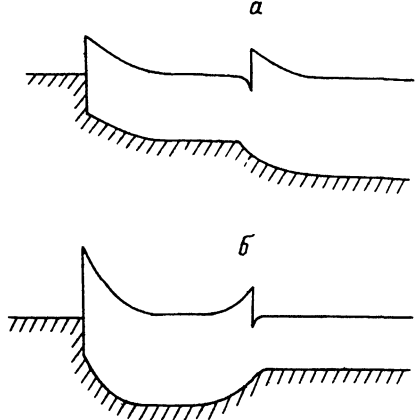


Рис. 3. Зонная диаграмма структуры металл—полупроводник с гетеропереходом.

*a* — с узкозонной прослойкой под металлом; *б* — с широкозонной прослойкой.

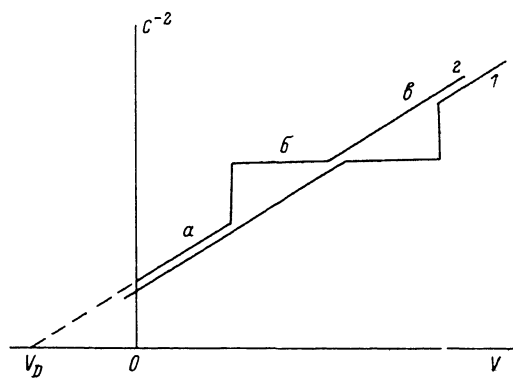


Рис. 4. Схематические изображения ВФХ *m-s* гетероструктур.

1 — для структуры с узкозонной прослойкой; 2 — с широкозонной.

стороны, при наложении запорного смещения область пространственного заряда (ОПЗ) должна пересечь гетеропереход, что в свою очередь ограничивает толщину прослойки, так как в противном случае может наступить лавинный пробой, прежде чем ОПЗ пересечет гетеропереход и выйдет в толщу. Таким образом, существует некоторый оптимальный интервал значений толщины прослойки, который зависит от концентрации легирующей примеси, величины разрыва зоны на гетеропереходе и напряжения пробоя. Если интервал прослойки попадает в этот интервал, то на ВФХ гетероструктуры может наблюдаться ступенчатая особенность, вид которой схематически показан на рис. 4. На ВФХ структуры с широкозонной прослойкой присутствует ступенчатый выступ, тогда как на ВФХ структуры с узкозонной прослойкой — ступенчатая впадина. В обоих случаях имеется горизонтальный участок, который мы назвали в [6] «моттовским» плато (рис. 4, б). Величина емкости на плато  $C_a$  определяется только толщиной прослойки:

$$C_a = \epsilon_1 S / 4\pi a, \quad (3)$$

где  $\epsilon_1$  и  $a$  — диэлектрическая проницаемость и толщина прослойки,  $S$  — площадь структуры. В приближении истощенного слоя для ширины плато были получены следующие выражения:

$$\Delta V_{y3} = 2 \sqrt{V_a \Delta \Psi / \alpha}; \quad \Delta V_{ш3} = 2 \sqrt{V_a \Delta \Psi}, \quad (4)$$

где  $\Delta V_{y3}$  и  $\Delta V_{ш3}$  — ширины моттовского плато по шкале напряжений для структур с узкозонной и широкозонной прослойкой,

$$V_a = 2\Pi e N_1 a^2 \epsilon_1 \quad (5)$$

— характерный параметр напряжения,  $N_1$  — концентрация доноров в прослойке,

— параметр асимметрии легирования,  $\varepsilon_2$ ,  $N_2$  — диэлектрическая проницаемость и концентрация доноров подложки. Абсолютная величина разрыва потенциала  $\Delta\psi$  связана с разрывом зон на гетеропереходе соотношением

$$\Delta\psi = \Delta E_c \pm kT \ln (N_2 N_{c1} / N_1 N_{c2}) / e. \quad (7)$$

Здесь  $\Delta E$  — величина разрыва зоны проводимости,  $N_{c1}$  и  $N_{c2}$  — эффективные плотности состояний в прослойке и подложке соответственно. Знаки (+) и (—) в (7) относятся соответственно к структурам с узкозонной и широкозонной прослойкой.

По наклонам ВФХ на участках *a* и *b* (рис. 4) можно определить концентрации легирующей примеси в прослойке  $N_1$  и в подложке  $N_2$ . Значение емкости на плато позволяет по формуле (3) определить толщину прослойки *a*, а по формуле (5) — значение параметра  $V_a$ . Наконец, по ширине плато мы можем вычислить величину разрыва потенциала  $\Delta\psi$ , согласно выражению (4), который связан с величиной разрыва зоны проводимости  $\Delta E_c$  выражением (7).

Ступенчатые характеристики, изображенные на рис. 4, получены в приближении истощенного слоя, которое справедливо лишь при очень низких температурах. В работах [7, 8] было показано, что ступенчатая особенность сглаживается при повышении температуры. Что касается ВФХ гетероструктур с широкозонной прослойкой, являющихся предметом изучения в работе [7], то теория, учитывающая размытие ступени, оказывается достаточно громоздкой. Структуры с узкозонной прослойкой, рассматриваемые в [8], представляют собой более простой объект, поскольку пространственный ход потенциала внутри прослойки при любых внешних смещениях оказывается монотонным (рис. 3, а) в отличие от структур с широкозонной прослойкой. В последних при малых смещениях потенциал внутри прослойки имеет минимум (рис. 3, б), а при больших смещениях становится монотонным. Таким образом, изучение гетероструктур с широкозонной прослойкой требует рассмотрения двух режимов: первого режима, при котором потенциал внутри прослойки имеет минимум, и второго режима, при котором потенциал становится монотонным. При изучении же структур с узкозонной прослойкой достаточно рассмотрения лишь одного режима, поскольку потенциал будет монотонным при любых смещениях, причем эта теория остается справедливой и для второго режима ВФХ структур с широкозонной прослойкой. Поэтому представляется актуальным расширение знаний о ВФХ *m-s*-гетероструктур с узкозонной прослойкой.

На рис. 5 представлены ВФХ для *m-s*-гетероструктур с узкозонной прослойкой при трех температурах. Эти приведенные характеристики  $X(V)$  имеют размерность напряжения:

$$X(V) = (S^2 \varepsilon \varepsilon_1 N_1 / 8\pi) c^{-2} (V). \quad (8)$$

Штрихпунктирная зависимость 1 рассчитана в приближении истощенного слоя и соответствует случаю  $T = 0$ . Сплошная кривая 2 и штриховая кривая 3 относятся к случаю  $T = 77$  и 300 К. Эти кривые рассчитаны по точной теории, изложенной в [8]. Согласно этой теории,

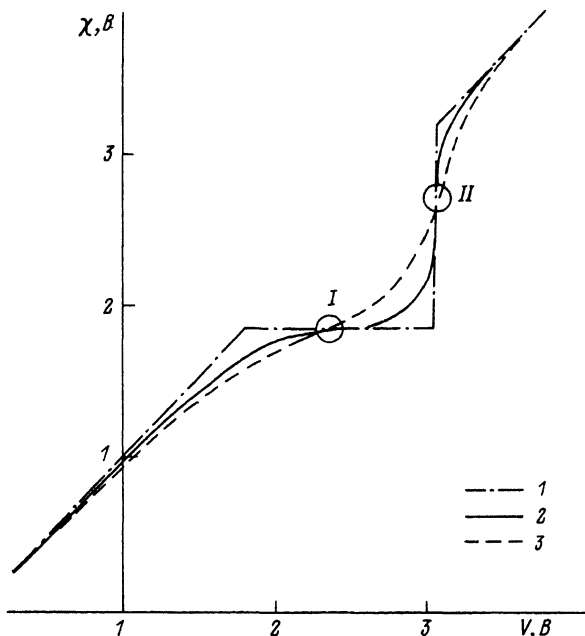


Рис. 5. ВФХ гетероструктуры с узкозонной прослойкой GaAs при различных температурах.

$T, K$ : 1 — 0, 2 — 77, 3 — 300. Изотипный гетеропереход легирован симметрично ( $\alpha = 1$ ). Толщина прослойки равна 12 дебаевским радиусам при  $T = 300 K$  ( $A = 12$ ). Величина разрыва на гетеропереходе составляет  $\Delta E = 0.21$  эВ ( $\beta = 7$ ).

$$X = \frac{kT}{e} \frac{v - \dot{u} - \exp(-u) + (\beta + u)/\alpha}{\left[ 1 - (1 - \exp(-u) - 1/\alpha) \frac{du}{dv} \right]^{-2}}. \quad (9)$$

Здесь  $u$  — безразмерное значение потенциала в провале в непосредственной близости слева от гетерограницы;  $v$  — безразмерное внешнее смещение:

$$v = y_0 + u = (V + V_d) e / kT, \quad (10)$$

где  $V_d$  — диффузионный потенциал со стороны полупроводника,  $y_0$  — безразмерная функция потенциала металлического контакта. Величина  $u$  зависит от внешнего смещения  $V$ . Эта зависимость дается обратной функцией уравнения

$$v = u + \exp(-u) - \frac{\beta + u}{\alpha} + \frac{1}{2} \left[ A + \sqrt{2(\beta + u)/\alpha} - \exp(-u) \frac{K(u)}{\sqrt{2}} \right]^2, \quad (11)$$

где  $\beta$  — безразмерный параметр, характеризующий разрыв потенциала на гетерогранице:

$$\beta = \beta_0 - \ln \alpha; \quad \beta_0 = (\Delta E_c e / kT) + \ln(\epsilon_1 N_{c1} / \epsilon_2 N_{c2}), \quad (12)$$

$A$  — безразмерная толщина прослойки:

$$A = \kappa_1 a; \quad \kappa_1^2 = 4\pi e^2 N_1 / \epsilon_1 kT, \quad (13)$$

$\kappa_1$  — обратный дебаевский радиус узкозонного полупроводника. Функция  $K(u)$ , входящая в правую часть (11), определяет толщину проводящей области и задается интегралом:

$$K(u) = \int_0^{\infty} (\exp(-y) / \sqrt{f(y)}) dy. \quad (14)$$

Здесь  $f(y)$  дается формулой

$$f(y) = y - (1 - \exp(-y)) \exp(-u) + \frac{\beta + u}{\alpha}. \quad (15)$$

По формулам (11), (9), (14) были вычислены кривые 2 и 3 на рис. 5.

Как видно из этого рисунка, ни при азотной, ни тем более при комнатной температуре, идеальная ступенчатая особенность на ВФХ не реализуется. Однако, как было показано в [8], анализ сглаженных ВФХ, полученных при конечных температурах, оставляет возможности для определения параметров  $m$ — $s$ -гетероструктуры. В качестве характерных точек теперь уже выступают точки перегиба на ВФХ. На рис. 5 они обведены кружками и помечены римскими цифрами I и II. Ордината первой точки перегиба (точка I) с большой точностью совпадает с уровнем плато, у второй точки перегиба (точка II) абсцисса с хорошей точностью совпадает с правой границей плато  $V_2$ . Этих двух условий достаточно для определения величины разрыва зоны проводимости  $E_c$  на гетеропереходе. Толщина прослойки  $a$  находится по формуле (3) емкости структуры в первой точке перегиба. Уровни легирования  $N_1$  и  $N_2$ , а также диффузионный потенциал  $V_d$  находятся по линейным участкам  $a$  и  $b$  на ВФХ (рис. 4). После этого можно рассчитать параметр напряжения  $V_a$  по формуле (5). Определив  $V_d$  и  $V_a$ , положение левой границы можно рассчитать по формуле

$$V_1 = V_a - V_d. \quad (16)$$

Напряжение правой границы плато  $V_2$  определяется абсциссой второй точки перегиба. Ширина плато  $\Delta V = V_2 - V_1$  позволяет вычислить разрыв потенциала  $\Delta\psi$  по формуле (4) и найти величину разрыва зоны  $\Delta E_c$  на гетеропереходе по формуле (7).

### 1. Недостатки $C$ — $V$ -методов определения параметров $m$ — $s$ -гетероструктур

Изложенные во Введении емкостные методы определения параметров  $m$ — $s$ -гетероструктур обладают рядом недостатков, которые осложняют их применение. Как уже неоднократно отмечалось, идеальная ступенчатая особенность на ВФХ не реализуется. На ВФХ, снятых при конечных температурах, она оказывается размытой. Степень размытия растет с повышением температуры, что показано на рис. 5. Для точного определения параметров  $m$ — $s$ -гетероструктуры требуется с большой точностью определить точки перегиба (точки I и II на рис. 5). На рис. 5 показано, что это с большей степенью точности можно сделать для ВФХ, снятой при азотной температуре (кривая 2), по сравнению с ВФХ, снятой при комнатной температуре (кривая 3). Поэтому ВФХ, снятые при азотной темпе-

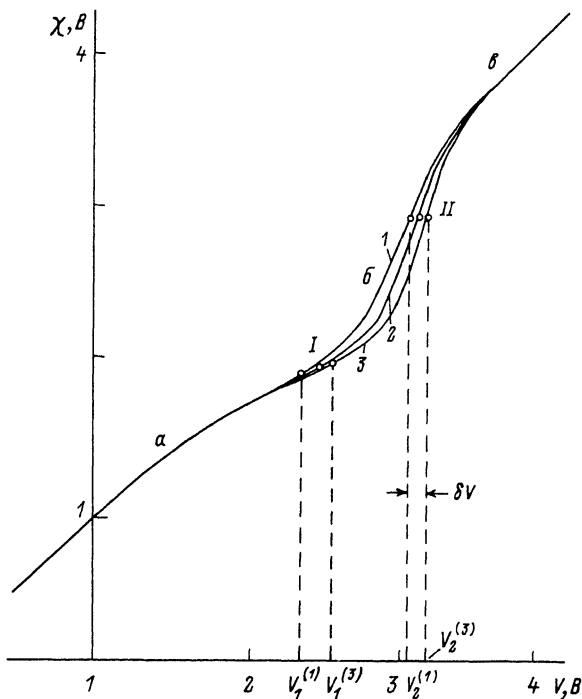


Рис. 6. ВФХ гетероструктуры с узкозонной прослойкой GaAs при различных значениях параметра  $\beta_0$ .

$\beta_0$ : 1 — 6, 2 — 7, 3 — 8. Толщина прослойки равна 12 дебаевским радиусам ( $A = 12$ ); легирование симметричное ( $\alpha = -1$ );  $T = 300$  К.

ратуре, могли бы быть вполне пригодными для определения разрыва зон на гетеропереходе. Однако уменьшение температуры до азотной и ниже может привести к дополнительным сложностям, связанным с вымораживанием свободных носителей в твердом растворе за счет влияния  $DX$ -центров, поскольку в нашей теории [8] концентрация носителей предполагается не зависящей от температуры. Таким образом, лишь построение семейства ВФХ структуры и делает ее непригодной для определения разрыва зоны.

Работая при температурах, незначительно отличающихся от комнатных, влиянием  $DX$ -центров можно пренебречь. Однако в этом случае кажется затруднительным определение точек перегиба на ВФХ. Для их определения с хорошей степенью точности требуется построить семейство ВФХ для одной и той же гетероструктуры (типа изображенных на рис. 5), снятых при различных температурах (значительно выше комнатной). Эти ВФХ, как видно из рисунка, дважды пересекутся. Точки пересечения кривых совпадают с точками перегиба. Таким образом, лишь построение семейства ВФХ дает возможность определения точек перегиба с достаточной степенью точности, а вместе с тем и параметров структуры. Однако такой подход к проблеме кажется нам слишком трудоемким, поскольку требует большого количества измерений.

Кроме недостатков, связанных с размытием плато и скачка, оказывается, что ВФХ, снятые при комнатной температуре, обладают крайне низкой чувствительностью плато и скачка к изменению  $\Delta E_c$ . На рис. 6 изображено семейство приведенных ВФХ, построенных при комнатной температуре и при различных значениях параметра  $\beta_0$ . Напомним, что параметр  $\beta_0$  однозначно связан с величиной разрыва зон  $\Delta E_c$  соотношением (12). Для удобства выбран

случай симметричного легирования ( $\alpha = 1$ ). Кривая 1 построена при значении параметра  $\beta_0 = 6$ , что соответствует величине  $\Delta E_c = 0.21$  эВ. Кривая 2 соответствует значению  $\beta_0 = 7$  ( $\Delta E_c = 0.24$  эВ), кривая 3 построена для случая  $\beta_0 = 8$  ( $\Delta E_c = 0.27$  эВ). Точки перегиба отмечены цифрами I и II. Как показывает анализ рис. 6, при изменении величины  $\Delta E_c$  от 0.21 (кривая 1) до 0.27 эВ (кривая 3), т. е. приблизительно на 25%, абсцисса второй точки перегиба изменится всего на величину  $\delta V = 0.1$  В, что составляет примерно 5%. Это значение соответствует погрешности при определении самих точек перегиба. То же самое относится и к ординате первой точки перегиба. Таким образом, погрешность при определении точек перегиба влечет за собой ошибку в величине  $\Delta E_c$  около 25%. Подчеркнем, что это связано со слабой чувствительностью ВФХ, снятых при температурах, близких к комнатным, к изменению параметра  $\Delta E_c$ .

Итак, изложенные выше недостатки описанных в работах [6-8] C—V-методов определения разрыва зон в гетероструктурах осложняют их применение. Для экспериментального определения разрыва зон желательно было бы иметь метод, сочетающий в себе большую точность и малую трудоемкость. Изложение такого метода и является целью данной работы.

## 2. Методика определения параметров $m-s$ -гетероструктур

### 2.1. Чувствительность к изменению $\Delta E_c$ существенно повышается при экспериментальном определении производной от ВФХ по напряжению $\frac{dC^{-2}}{dV}$ . В этом случае идеальному плато на ВФХ соответствует нулевая производная, а идеальному скачку — бесконечная производная. В силу сглаженности ВФХ ни нулевая, ни бесконечная производные не реализуются. Они принимают конечные значения. Наглядный физический смысл имеют зависимости обратной производной приведенной емкости $(dX/dV)^{-1}$ . Они отражают связь числа свободных носителей в структуре с напряжением:

$$N = N_1 \left[ \frac{dX}{dV} \right]^{-1}, \quad (17)$$

где  $N_1$  — концентрация доноров в узкозонном материале в термодинамическом равновесии. Будем называть отношение  $N/N_1 = n$  приведенной концентрацией свободных носителей. На рис. 7 изображены зависимости  $n(V)$ , которые получены путем численного дифференцирования кривых ВФХ, приведенных на рис. 6. Линейным участкам  $a$  и  $b$  ВФХ на рис. 6 соответствуют участки  $n = 1$  на рис. 7. Как видно из этого рисунка, на зависимостях  $n(V)$  имеются характерные максимумы, соответствующие размытому плато, и минимумы, соответствующие размытому скачку. Следует отметить, что абсциссы экстремумов на  $n-V$ -зависимости совпадают с абсциссами точек перегиба на ВФХ, как это видно из сравнения рис. 6 и 7. В принципе этот факт позволяет уже без затруднений определять параметры  $m-s$ -гетероструктуры. Мы можем из анализа зависимости  $n(V)$  с большой степенью точности определить абсциссы точек перегиба. Абсцисса минимума  $n-V$ -зависимости даст нам значение правого конца плато  $V_2$ . Зная абсциссу первой точки перегиба, мы без труда определим ее ординату на ВФХ, что даст нам значение емкости на плато. Как уже отмечалось во Введении, этой информации достаточно для определения разрыва зоны проводимости  $\Delta E_c$ . Следует подчеркнуть, что определение точек перегиба с помощью зависимостей приведенной концентрации  $n(V)$  освобождает от необходимости построения семейства ВФХ и значительно уменьшает погрешность при определении величины разрыва зоны  $\Delta E_c$ .



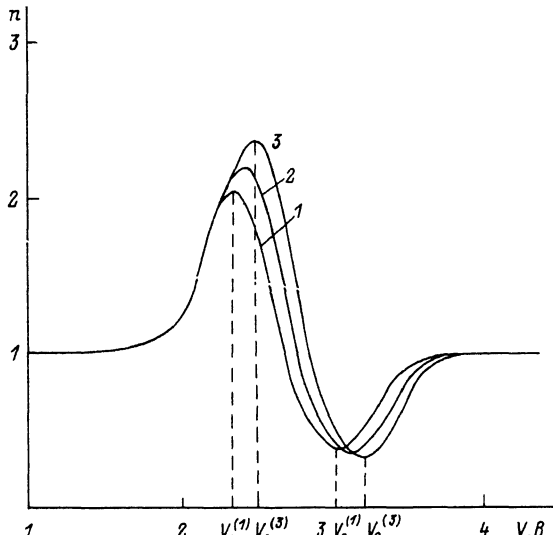


Рис. 7. Концентрационные зависимости гетероструктуры с узкозонной прослойкой GaAs, полученные путем численного дифференцирования ВФХ при различных значениях параметра  $\beta_0$ .

$\beta_0: 1 - 6, 2 - 7, 3 - 8; T = 300 \text{ K}; A = 12; \alpha = 1.$

2.2. Анализ зависимостей, приведенных на рис. 7, показывает, что значение концентрации  $n$  в экстремумах однозначно связано с величиной характерного параметра  $\beta_0$ , т. е. с величиной разрыва зон  $\Delta E_c$ . Этот факт указывает способ определения параметра  $\Delta E_c$  по значению концентрации в экстремумах без дополнительных вычислений, используя зависимости  $n_{\text{extr}}(\beta_0)$ . На первый взгляд, наибольшей чувствительностью к изменению параметра  $\beta_0$  ( $E_c$ ) обладает значение концентрации в максимуме  $n_{\text{max}}$ . Однако при углубленном рассмотрении оказывается, что для определения параметра  $\Delta E_c$  удобнее пользоваться зависимостями обратного значения концентрации в минимуме  $n_{\text{min}}^{-1}$ . При этом зависимости  $n_{\text{min}}^{-1}(\beta_0)$  имеют идеальный линейный вид. На рис. 8 построено семейство зависимостей  $n_{\text{min}}^{-1}$  от  $\beta_0$  при различных значениях параметра асимметрии легирования  $\alpha$ . Этой рисунка оказывается достаточно для определения параметра разрыва зон  $\Delta E_c$ . Предварительно задавшись определенным значением  $\alpha$ , мы выберем необходимую прямую. Найдя на этой прямой точку, которая соответствует нашему значению  $n_{\text{min}}$ , мы без труда определим ее абсциссу, которая определяет значение параметра  $\beta_0$ . Далее, по известной формуле (12) мы найдем разрыв зоны проводимости  $\Delta E_c$ . Таким образом, для экспериментального определения  $\Delta E_c$  достаточно всего лишь зависимостей, приведенных на рис. 8. Проконтролировать полученные значения можно, определяя точки перегиба и используя методику, изложенную в п. 2.1.

2.3. Для теоретического построения семейства зависимостей, изображенных на рис. 8, которые являются инструментом для определения разрыва зон на гетеропереходе, следует произвести ряд вычислений. Для этого необходимо, во-первых, задать значениями параметров асимметрии легирования  $\alpha$  (6), безразмерного разрыва потенциала на гетерогранице  $\beta_0$  (12) и толщины прослойки  $A$  (13). Далее следует задать значение безразмерного потенциала в провале  $u$ . Тогда по формуле (11) можно определить безразмерное смещение  $v$ , которое связано со смещением, выраженным в вольтах, формулой (10). Зная значения  $v$  и  $u$ , по формуле (9) мы определим приведенную емкость. Меняя значения  $u$ , мы таким образом можем построить ВФХ структуры. Производя численное

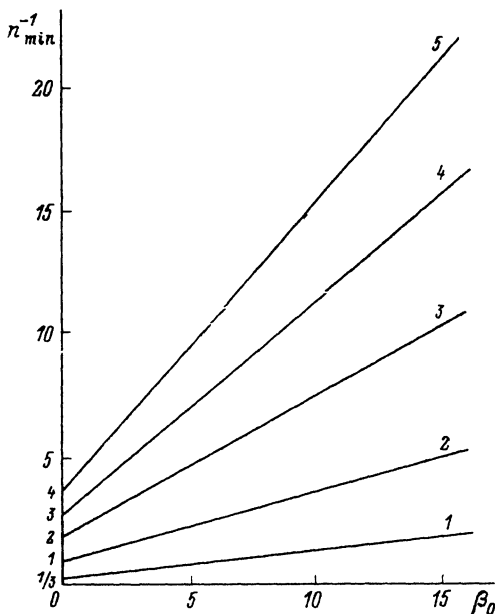


Рис. 8. Зависимости обратного значения концентрации в минимуме от  $\beta_0$ , используемые для определения разрыва зон на гетеропереходе, для различных значений параметра асимметрии легирования.

$\alpha$ : 1 — 1/3, 2 — 1, 3 — 2, 4 — 3, 5 — 4.

дифференцирование ВФХ, мы получим зависимость  $n(V)$ , по которой определим значение концентрации в минимуме  $n_{\min}$ . Это нам даст точку на графике зависимости  $n_{\min}^{-1}(\beta_0)$ . Изменяя значения параметров  $\alpha$  и  $\beta_0$ , мы получим необходимое семейство зависимостей  $n_{\min}^{-1}(\beta_0)$  типа приведенных на рис. 8.

Следует отметить, что каждый раз при вычислении величины  $\nu$  по формуле (11) необходимо вычислять интегральную функцию  $K(u)$ , которая задается соотношением (14). В принципе это можно сделать, используя численные методы. Однако совместить численное интегрирование при вычислении  $K(u)$  и численное дифференцирование ВФХ для определения  $n$  оказывается затруднительным. Это требует большого количества времени. Так, например, проведение подобных расчетов на персональных компьютерах IBM-PC-AT, даже оснащенных сопроцессором, требует месяца непрерывной работы. Если не использовать более мощные ЭВМ, то единственный выход — это написание аппроксимационных выражений для  $K(u)$ .

### 3. Теория проводящего слоя

Как уже неоднократно отмечалось, интеграл  $K(u)$  определяет толщину проводящей области. Проанализируем особенности функции, стоящей под интегралом  $K(u)$ . Обозначим подынтегральную функцию через  $F(y)$ :

$$F(y) = \exp(-y)/\sqrt{f(y)}; \quad K(u) = \int_0^{\infty} F(y) dy, \quad (18)$$

где  $f(y)$  дается выражением (15). Если глубина провала потенциальной функции  $\Psi$  положительна ( $u > 0$ ), то функция  $F(y)$  не имеет особенностей. Если же

потенциал провала отрицателен ( $u < 0$ ), то такая особенность уже может возникнуть. Она связана с тем обстоятельством, что функция  $f(y)$  при  $u < 0$  имеет минимум в точке

$$y = y_{\min} = \nu; \quad f(y_{\min}) = f_m. \quad (19)$$

Здесь введены обозначения для абсциссы и ординаты минимума:

$$-u = \nu; \quad f_m = \nu + 1 - \exp(\nu) + E_a^2; \quad E_a^2 = \frac{\beta - u}{\alpha}, \quad (20)$$

где  $E_a$  — безразмерный параметр, пропорциональный напряженности поля слева на гетерогранице, т. е. при  $x = a - \delta$ . Функцию  $f(y)$  при  $u < 0$  удобно записать в форме

$$f(y) = y - \exp(\nu)(1 - \exp(-y)) + E_a^2. \quad (21)$$

Вблизи минимума ее можно представить квадратичным разложением в ряд Тейлора:

$$f(y) \approx f_m + \frac{(y - \nu)^2}{2}. \quad (22)$$

Особенности в интеграле (18) возникают тогда, когда значение  $f_m$  функции  $f(y)$  в минимуме стремится к нулю. Этому соответствует некоторое определенное значение  $\nu = \nu_a$ , при котором  $f_m = 0$ :

$$\nu_a + 1 - \exp(\nu_a) + (\beta - \nu_a)/\alpha = 0. \quad (23)$$

При  $\nu = \nu_a$  интеграл (18) логарифмически расходится. Физический смысл этой расходимости состоит в возникновении бесконечно широкой квазинейтральной области в узкозонном материале.

Наиболее сильное видоизменение подынтегральной функции  $F(y)$  происходит при значениях  $\nu$ , близких к  $\nu_a$ . Это показано на рис. 9, а, где построена зависимость  $F(y)$  при  $\beta_0 = 8$  для симметричного легирования  $\alpha = 1$ . Видно, что подынтегральная функция еще монотонна при  $\nu < 2.18$ , т. е. когда  $\nu$  всего на 0.01723 меньше значения  $\nu_a = 2.19723$ . Когда же  $\nu > 2.18$ , то на зависимости появляется пик при  $y \approx \nu_a$ , который становится все острее с приближением  $\nu$  к  $\nu_a$ . Высота пика при этом неограниченно растет. Этот пик и описывает квазинейтральную область в узкозонной прослойке. Если последняя легирована слабее, чем толщина ( $\alpha < 1$ ), то пик очень острый, и поэтому такой случай не показан на рисунке. Если же прослойка легирована сильнее, чем толщина ( $\alpha > 1$ ), то пик становится более широким, что и показано на рис. 9, б, на котором  $\alpha = 3$ , а  $\beta_0$  по-прежнему равно 8.

Поскольку появление или же исчезновение пика происходит при небольшом отклонении  $\nu$  от  $\nu_a$ , то удобно обозначить это отклонение через  $\Delta$ :

$$\Delta = \nu_a - \nu \quad (24)$$

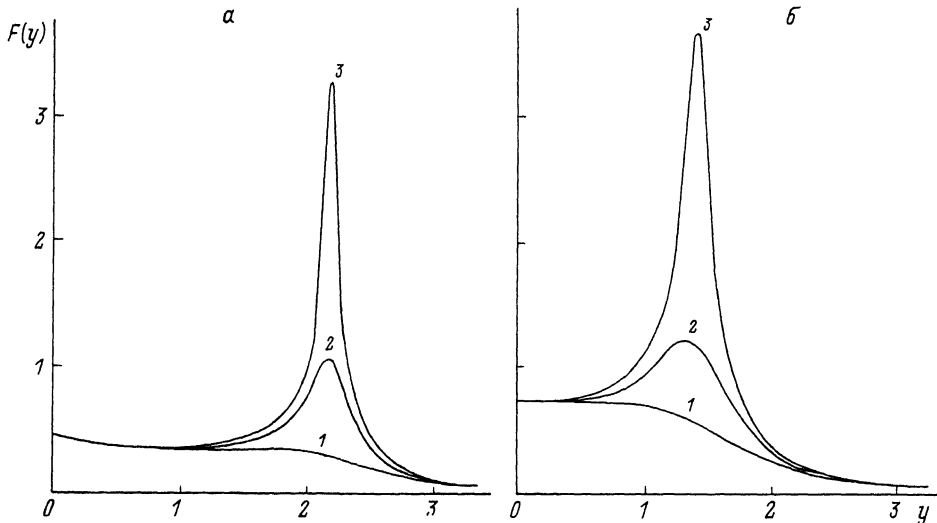


Рис. 9. Вид подынтегральной функции  $F(y)$  при различных значениях параметра  $\nu$ .  
 а — для случая симметричного легирования ( $\alpha = 1$ ), б — для случая  $\alpha = 3$ .

и считать  $\Delta$  малой величиной по сравнению с единицей.

Если значение  $f_m$  в минимуме мало по сравнению с единицей, то его можно представить линейным членом разложения  $f_m$  в ряд по  $\Delta$ :

$$f_m \approx \left( \exp(\nu_\alpha) - 1 + \frac{1}{\alpha} \right) \Delta, \quad \Delta > 0. \quad (25)$$

Заметим, что положения минимума  $f_m$  функции  $f(y)$  и максимума подынтегральной функции  $F(y)$  несколько сдвинуты за счет того, что в  $F(y)$  имеется еще и экспоненциальный множитель. Этот сдвиг нарастает с ростом  $\Delta$ . Кроме того, по этой же причине максимум подынтегральной функции  $F(y)$  вообще исчезает при некотором определенном значении расстройки  $\Delta = \lambda$ . Обозначим минимум  $f_m$ , соответствующий предельной расстройке, через  $f_m^{(\lambda)}$ , а подынтегральную функцию через  $F_\lambda(\nu_\alpha)$ . Отсутствие максимума у функции  $F_\lambda(y)$  означает, что ее значение  $F_\lambda(\nu_\alpha)$  в точке  $y = \nu_\alpha$  меньше значения функции  $F_\lambda(0)$  при  $y = 0$ :

$$F_\lambda(0) = 1/E_\alpha; \quad F_\lambda(0) > F_\lambda(\nu_\alpha). \quad (26)$$

Само же значение функции в той точке, где  $y = \nu_\alpha$ , дается формулой

$$F_\lambda(\nu_\alpha) = \exp(\nu_\alpha) / \sqrt{f_m^{(\lambda)}}. \quad (27)$$

Далее можно превратить неравенство в равенство, умножив правую часть (27) на постоянный множитель, больший единицы. Выберем этот множитель равным  $\sqrt{2}$ . Тогда из (26) и (27) получим уравнение для определения  $f_m^{(\lambda)}$

$$\sqrt{2} \exp(\nu_\alpha) / \sqrt{f_m^{(\lambda)}} = 1/E_\alpha. \quad (28)$$

Подставляя в (28) выражение (25) для  $f_m$  при  $\Delta = \lambda$ , найдем критическую величину расстройки  $\lambda$ :

$$\lambda = 2E_a^2 \exp(-2\nu_a) (\exp(\nu_a) - 1 + 1/\alpha)^{-1}. \quad (29)$$

При  $\Delta = \lambda$  пик подынтегральной функции заведомо исчезает, хотя он может отсутствовать и при несколько меньших значениях расстройки. Однако величины  $\lambda$  весьма малы, и поэтому можно ограничиться условием  $\Delta = \lambda$ . Так, например, при  $\beta_0 = 8$  и  $\alpha = 1$  величина  $\lambda = 0.01592$ . Когда глубина провала  $\nu$  достигает значения

$$\nu_\lambda = \nu_a - \lambda, \quad (30)$$

то при ее дальнейшем увеличении подынтегральная функция  $F(y)$  изменяется лишь в окрестности пика при  $y = \nu_a$ . Поэтому ее можно представить в виде суммы двух слагаемых:

$$F(y) = F_\lambda(y) + \Phi(y), \quad (31)$$

$$F_\lambda(y) = \exp(-y) / \sqrt{E_a^2 - \exp(\nu_a)(1 - \exp(-y)) + y}. \quad (32)$$

Функция  $F_\lambda(y)$  описывает «подкладку» под пиком. Ее мы считаем неизменной при возникновении пика, когда

$$\nu_\lambda < \nu < \nu_a, \text{ т. е. } 0 < \Delta < \lambda. \quad (33)$$

В окрестности пика функция подкладки, согласно принятому выше определению, равна величине

$$F_\lambda(y) |_{y=\lambda} = 1/\sqrt{2} E_a. \quad (34)$$

Функцию пика  $\Phi(y)$  можно определить исходя из квадратичного разложения (22) для  $f(y)$ . Согласно (22),

$$F(y) = \exp(-\nu_a) / \sqrt{f_m + (y - \nu_a)/2}. \quad (35)$$

Тогда, используя (35), (34) и (31), получим, что

$$\Phi(y) = [\exp(-\nu_a) / \sqrt{f_m + (y - \nu_a)/2}] - [1/\sqrt{2} E_a]. \quad (36)$$

Функция пика  $\Phi(y)$  не должна быть отрицательной. Это означает, что выражением (36) следует пользоваться лишь тогда, когда первый член больше второго, что определяет конечность интервала изменения переменной  $y$ . Для того чтобы найти этот интервал, запишем второй член правой части (36) в форме

$$1/\sqrt{2} E_a = \exp(-\nu_a)/\sqrt{f_m + \delta^2/2}. \quad (37)$$

Выражение (37) следует понимать как уравнение для определения параметра  $\delta$ . Этот параметр и имеет смысл предельного отклонения переменной  $y$  от значения  $\nu_a$ , при котором еще справедлива формула (36):

$$|y - \nu_a| \leq \delta. \quad (38)$$

Тогда в области (33) существования пика интеграл  $K$  принимает вид

$$K = K_\lambda + K_p; \quad K_\lambda = \int_0^\infty F_\lambda(y) dy. \quad (39)$$

Функция  $F_\lambda(y)$  описывает подкладку и определяется согласно (32). Интеграл  $K_p$  от функции пика будет выглядеть следующим образом:

$$K_p = \sqrt{2} \exp(-\nu_a) \int_0^\infty \left[ \frac{1}{\sqrt{2f_m + x^2}} - \frac{1}{\sqrt{2f_m + \delta^2}} \right] dx. \quad (40)$$

Вычисляя интеграл (40), получим

$$K_p = \frac{\sqrt{2} \exp(-\nu_a)}{\sqrt{2f_m + \delta^2}} \left[ \sqrt{2f_m + \delta^2} \ln \left( \frac{\sqrt{2f_m + \delta^2} + \delta}{\sqrt{2f_m + \delta^2} - \delta} \right) - 2\delta \right]. \quad (41)$$

Для упрощения этого выражения используем связь между  $\Delta$  и  $f_m$ , вытекающую из (25) и (29):

$$2f_m = 4E_a^2 \exp(-2\nu_a) \frac{\Delta}{\lambda}. \quad (42)$$

Из определения (37) для  $\delta$  получаем

$$2f_m + \delta^2 = 4E_a^2 \exp(-2\nu_a). \quad (43)$$

Комбинация выражений (42) и (43) дает выражение для  $\delta$

$$\delta^2 = 4E_a^2 \exp(-2\nu_a) \left( 1 - \frac{\Delta}{\lambda} \right). \quad (44)$$

Подставляя (43) и (44) в (41), получим окончательную формулу для  $K_p$ :

$$K_p = \sqrt{2} \exp(-\nu_a) \left[ \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{\Delta}{\lambda}}}{1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta}{\lambda}}} \right) - 2 \sqrt{1 - \frac{\Delta}{\lambda}} \right]. \quad (45)$$

При  $\Delta = \lambda$  этот интеграл обращается в нуль, поскольку пик исчезает. При  $\Delta \rightarrow 0$  интеграл от пика логарифмически расходится:

$$K_p \approx \sqrt{2} \exp(-\nu_a) \left[ \ln \left( \frac{4\lambda}{\Delta} \right) - 2 \right]. \quad (46)$$

Это связано с образованием квазинейтральной области в узкозонном материале.

Обсудим теперь вычисление интеграла  $K$  в том случае, когда пик отсутствует (т. е. при  $\nu < \nu_a$ ), а также найдем интеграл подкладки, когда появляется пик ( $\nu_\lambda < \nu < \nu_a$ ).

Получим вначале приближенную формулу для вычисления интеграла  $K$  в том случае, когда  $\nu < 0$ . Напомним, что отрицательным значениям  $\nu$  соответствуют положительные значения  $u$  (20). Обозначим величину  $\exp(-u)$ , входящую в выражение для  $f(y)$ , через  $\gamma$  ( $\gamma = \exp(-u)$ ). Таким образом, сейчас мы будем исследовать область, в которой  $u > 0$  и, следовательно,  $\gamma < 1$ . Если параметр  $E_a^2 \neq 0$ , то в знаменателе подынтегрального выражения (18) можно пренебречь экспонентой, поскольку область существенных для интеграла значений  $y$  отодвинута от начала координат:

$$K = \int_0^{\infty} (\exp(-y) / \sqrt{E_a^2 - \gamma + y}) dy. \quad (47)$$

Этот интеграл сводится к интегралу вероятности, вернее к дополнительной величине  $\operatorname{erfc}(\sqrt{E_a^2 - \gamma})$ . В литературе существует приближенный метод вычисления этого интеграла, предложенный Комату [9, 10]. Этот метод основан на неравенстве Комату, которое приведено на стр. 121 справочника [9]. Суть его состоит в том, что радикал в знаменателе (47) определенным образом выносится из-под интеграла:

$$K \approx 2 / (\sqrt{E_a^2} - \sqrt{E_a^2 - \gamma + x}). \quad (48)$$

Точка  $x$  выбирается по существу путем численного подбора и зависит от того, какие значения  $(E_a^2 - \gamma)$  для нас наиболее интересны. Если верхний предел значений этого параметра не превосходит 10, то нетрудно убедиться, что оптимальное значение  $x = 1.5$ . При этом погрешность формулы (48) будет менее 1%. Таким образом, мы приходим к формуле

$$K = 2 / (\sqrt{E_a^2} - \sqrt{E_a^2 - \gamma + 1.5}). \quad (49)$$

Реальная применимость формулы (49) не ограничивается интервалом  $u > 0$  ( $\gamma < 1$ ). Ее можно использовать вплоть до значения  $u = -0.405$  ( $\gamma = 1.5$ ).

Рассмотрим теперь другую область изменения параметра  $u$ :  $u < -0.405$  ( $\gamma > 1.5$ ). В этом случае радикал знаменателя в интеграле (18) следует выносить

не в точках  $y=0$  и  $1.5$ , как это было сделано в формуле (48), а в каких-то других точках. При этом вовсе нет оснований пренебрегать экспонентой под радикалом. Таким образом, мы приходим к выражению

$$K \approx 2/(\sqrt{f(x_1)} - \sqrt{f(x_2)}). \quad (50)$$

При  $y = 1.5$  ( $u = -0.405$ ) это выражение должно совпадать с (49), которое, согласно выбору  $x = 1.5$ , будет

$$K = 1/E_a \text{ при } y = 1.5. \quad (51)$$

Поскольку функция  $f(x)$  равна  $E_a$ , когда  $x=0$ , отсюда следует, что

$$x_1 = B(0.405 + u), \quad x_2 = D(0.405 + u). \quad (52)$$

Путем численного подбора можно убедиться, что оптимальному выбору соответствуют значения  $B = 0.272$ ,  $D = 1.246$ .

Наконец, найдем интеграл от подкладки, когда появляется пик, т. е. при  $\nu_\lambda < \nu < \nu_a$ . В этом случае  $K = K_\lambda + K_p$ ; интеграл  $K_p$  от пика дается (45), а интеграл от подкладки  $K_\lambda$  не зависит от  $\nu$  и определяется формулой (50), где  $x_1$  и  $x_2$  даются (52):

$$x_1 = 0.272(0.405 + u), \quad x_2 = 1.246(0.405 + u). \quad (53)$$

Используя описанные аппроксимационные выражения для  $K$ , можно значительно уменьшить время вычислений, необходимых для построения семейств зависимостей типа приведенных на рис. 6—8. Последние были построены при помощи полученных в этом пункте аппроксимаций для функции  $K(u)$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Katnani A. D., Baner R. S. // Phys. Rev. 1986. V. B33 N 2. P. 1106—1109.
- [2] Miller R. S., Kleinman D. A., Gossard A. C. // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 12. P. 7085—7087.
- [3] Arnold D., Ketterson A., Henderson T. // Appl. Phys. Lett. 1984. V. 45. N 12. P. 1237—1241.
- [4] Lee S. Ch., Pearson G. L. // IEEE Trans. Electron. Dev. 1980. V. ED-27. N 4. P. 844—850.
- [5] Kroemer H. // Vac. Sci. Techn. B. 1984. V. 2. N 3. P. 433—439.
- [6] Константинов О. В., Львова Т. В., Панахов М. М. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 7. С. 1283—1290.
- [7] Бычковский Д. Н., Константинов О. В., Панахов М. М. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 4. С. 660—667.
- [8] Бычковский Д. Н., Константинов О. В., Панахов М. М. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 4. С. 660—669.
- [9] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М., 1979. 830 с.
- [10] Komatu Y. // Rep. Statist. Appl. Res. Un. Japan. Sci. Engrs. 1955—1957. N 4. P. 69—70.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе РАН  
Санкт-Петербург

Получена 18.10.1991  
Принята к печати 31.10.1991