

О ВОЗМОЖНОСТИ НЕМОНОТОННОГО ХОДА ПОТЕНЦИАЛА В АККУМУЛЯЦИОННОМ СЛОЕ

Левин Е. И., Монахов А. М., Рогачев А. А.

Исследованы условия возникновения на границе полупроводника явления «перезернировки» внешнего электрического поля, т. е. возникновения немонотонных зависимостей электростатического потенциала от расстояния до границы полупроводника. Расчеты произведены для слабо легированного полупроводника при нулевой температуре и достаточно слабого внешнего поля, когда электронами заселен только один уровень размерного квантования. Показано, что в термодинамическом равновесии немонотонный ход потенциала может наблюдаться на поверхности (111) кремния, а под действием света — и в других структурах. Продемонстрирована важная роль, которую играют в этом явлении многочастичные эффекты.

Для объяснения экспериментов по измерению фотолюминесценции в аккумуляционных слоях кремниевой МОП-структуры в работе [1] было высказано предположение о немонотонном поведении электростатического потенциала вблизи границы полупроводник—диэлектрик. В [2] был проведен вариационный расчет зависимости $\varphi(z)$ (z — координата в перпендикулярном к границе направлении) в условиях, когда под действием света в образце созданы сравнимые концентрации электронов и дырок, и показано, что при определенных условиях вариационная зависимость $\varphi(z)$ может иметь немонотонный вид. Однако оставалось неясным, является ли немонотонный ход $\varphi(z)$ свойством неравновесных систем или может наблюдаться и в термодинамическом равновесии, когда концентрацией неосновных носителей можно пренебречь.

В настоящей работе показано, что немонотонный ход $\varphi(z)$ может иметь место в слабо легированном полупроводнике, находящемся в термодинамическом равновесии при нулевой температуре. Мы будем рассматривать слабо легированный полупроводник n -типа, занимающий полупространство $z > 0$. Считается, что электрическое поле \mathcal{E}_S на границе полупроводника (при $z=0$) задано, а сама граница есть бесконечный потенциальный барьер для электронов (физически это может быть граница полупроводник—диэлектрик или изотипный гетеропереход). Будем также считать, что поле \mathcal{E}_S достаточно мало, так что из всех поверхностных подзон размерного квантования только самая нижняя заселена электронами. Расчет будет производиться в приближении Хартри, роль многочастичных эффектов будет затем оценена методом функционала локальной плотности [3].

В приближении Хартри потенциал φ и волновая функция поперечного движения электрона ψ определяются путем совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона:

$$-1/2\psi'' + \varphi\psi = E\psi, \quad (1)$$

$$\varphi'' = -4\pi [N_S\psi^2 + \rho_I(\varphi)] \quad (2)$$

с условиями

$$\varphi'(0) = \mathcal{E}_S, \quad \varphi(\infty) = 0, \quad (3)$$

$$\psi(0) = \psi(\infty) = 0, \quad \int_0^{\infty} \psi^2(z) dz = 1, \quad (4)$$

$$N_S = g_2 (\mu - E) = \frac{m_d M}{\pi} (\mu - E), \quad (5)$$

где E — энергия дна нижней подзоны, N_S — двумерная концентрация электронов в аккумуляционном слое, ρ_I — плотность заряда ионизованных примесей, g_z — двумерная плотность состояний, m_d — эффективная масса плотности состояний, M — число эквивалентных долин, μ — уровень Ферми. (В этой работе мы пользуемся системой единиц, аналогичной атомной: за единицу массы взята эффективная масса электрона для направления, перпендикулярного границе, m_z , за единицу заряда — $ex^{-1/2}$, где x — диэлектрическая проницаемость, за единицу энергии и потенциала — $e^4 m_z / x^2 \hbar^2$; все энергии отсчитываются от дна зоны проводимости вдали от границы). Представим потенциал φ в виде

$$\varphi(z) = \varphi_e(z) + \varphi_I(z), \quad (6)$$

где φ_e — потенциал, создаваемый поверхностными электронами, а φ_I — ионизованными примесями (мы будем рассматривать только случай $\mu < 0$, когда свободных электронов в полупроводнике нет). Входящая в (2) плотность $\rho_I(\varphi)$ в общем случае устроена так, что $\rho_I(0) = 0$, $\rho_I(\varphi) > 0$, если $\varphi < 0$, и $\rho_I(\varphi) < 0$, если $\varphi > 0$. Например, в пределе слабого легирования и слабой компенсации при положительном φ , большем ширины примесной зоны, когда все доноры приподняты над уровнем Ферми и оголены, $\rho_I = -(1-K)N_D$, а при отрицательном $\rho_I = KN_D$, где K — степень компенсации [4]. При этом зависимость $\varphi_I(z)$ описывается обычной формулой для равномерно заряженного слоя

$$\varphi_I(z) = \varphi_I(0) \left(\frac{W-z}{W} \right)^2, \quad (7)$$

где W — ширина слоя. Если легирование достаточно мало, то W много больше характерного размера волновой функции и потенциал φ_I в уравнении Шредингера можно считать постоянным и равным $\varphi_I(0)$, а для концентрации N_S принять

$$N_S = \varepsilon_S^2 / 4\pi. \quad (8)$$

Тогда заменой переменных

$$z_1 = \varepsilon_S^{1/2} z, \quad \psi_1 = \varepsilon_S^{-1/4} \psi, \quad \varphi_1 = \varepsilon_S^{-2/4} \varphi_e, \quad E_1 = \varepsilon_S^{-2/4} [E - \varphi_I(0)] \quad (9)$$

система (1)–(4) сводится к системе

$$\begin{aligned} \psi_1'' &= 2(\varphi_1 - E_1)\psi_1, \\ \varphi_1'' &= -\psi_1^2, \\ \psi_1(0) &= \psi_1(\infty) = \varphi_1(\infty) = 0, \quad \varphi_1'(0) = 1. \end{aligned} \quad (10)$$

При заданной энергии E_1 граничную задачу (10) можно свести к задаче Коши, заметив, что (10) имеет первый интеграл

$$C = -\psi_1'^2 + \varphi_1'^2 + 2\psi_1^2(\varphi_1 - E_1). \quad (11)$$

Из условий на бесконечности $C = 0$, следовательно,

$$\psi_1'(0) = [\varphi_1'^2(0) + 2\psi_1^2(0)(\varphi_1(0) - E_1)]^{1/2} = 1.$$

Задача Коши для (10) с произвольным E_1 легко решается на ЭВМ, а энергия E_1 подбирается из условия $\varphi_1'(\infty) = 0$. Удовлетворяющая этому условию энергия $E_1 = -0.211$, а соответствующие ей ψ_1 и φ_1 приведены на рис. 1.

Перейдя от (10) обратно к (1)–(4), получаем

$$E = E_1 \varepsilon_S^{2/4} + \varphi_I(0), \quad (12)$$

$$\varphi(z) = \varepsilon_S^{2/4} \varphi_1(\varepsilon_S^{-1/2} z) + \varphi_I(z). \quad (13)$$

Величина $\varphi_I(0)$ должна определяться из условия равенства уровней Ферми в объеме и на поверхности и поэтому зависит от μ :

$$\varphi_I(0) = \mu + V, \quad (14)$$

где

$$V = -\varepsilon_S / 4\pi g_2 - E_1 \varepsilon_S^{2/3} \quad (15)$$

есть энергетический зазор между уровнем Ферми и $\varphi_I(0)$ (рис. 2); (14) и (15) получаются подстановкой (12) и (8) в (5). На рис. 2 изображена общая зависимость $\varphi(z)$, получающаяся подстановкой φ_I и (7) в (13). Немонотонная зависимость $\varphi(z)$ реализуется при $\varphi_I(0) > 0$, т. е. при $V > -\mu$. Несложно показать, что V как функция ε_S имеет максимум

$$V_{\max} = \left(\frac{4|E_1|}{3}\right)^3 (Mm_d)^2 \approx 2.2 \cdot 10^{-2} (Mm_d)^2 \quad (16)$$

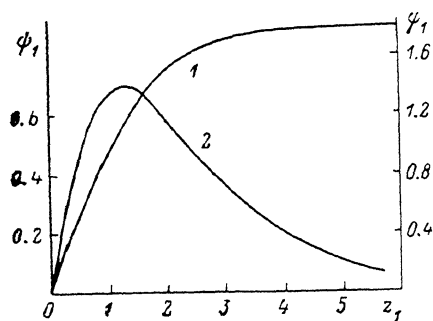


Рис. 1. Решение системы (10).

1 — $\varphi_1(z_1)$, 2 — $\psi_1(z_1)$.

при поле

$$\varepsilon_{\max} = \left(\frac{8|E_1|}{3}\right)^3 (Mm_d)^3 \quad (17)$$

(рис. 3).

В слабо легированном полупроводнике с ненулевой степенью компенсации уровень Ферми μ равен энергии мелкого донора $\mu \approx E_0 \approx -0.5m_z/m_c$, где m_c — эффективная масса электрона в зоне проводимости. Из (16) видно, что $V > -\mu$ только при достаточно большом значении произведения Mm_d . Такая

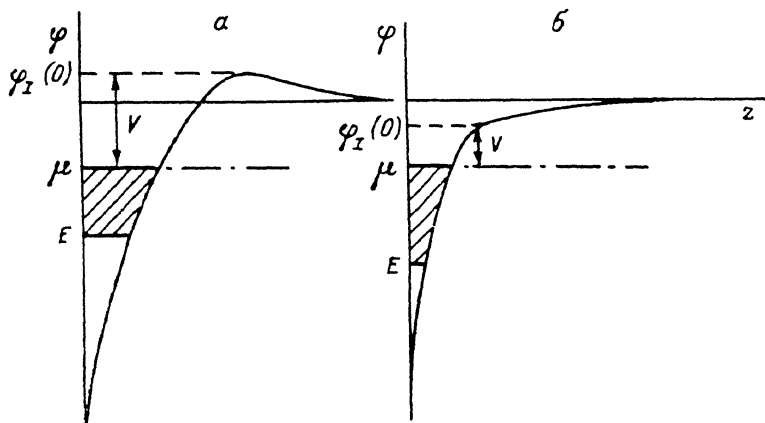


Рис. 2. Зависимость $\varphi(z)$ при $\varphi_I(0) > 0$ (а) и $\varphi_I(0) < 0$ (б).

ситуация реализуется на поверхности (111) Si, где $M=6$, $m_i/m_z = (0.358/0.258) = 1.39$, что дает $V_{\max} \approx 1.6 \approx 77$ мэВ. Энергия ионизации типичной донорной примеси (фосфора) в Si равна 45 мэВ $< V_{\max}$. Однако поле (17) оказывается для (111) Si очень велико ($\sim 2 \cdot 10^7$ В/см), больше поля пробоя для SiO₂ (10^7 В/см), а V становится больше μ в поле $4 \cdot 10^6$ В/см, которое тоже достаточно велико. Тем не менее на этой поверхности Si можно добиться выполнения условия $\varphi_I(0) > 0$ в разумных полях, если уровень Ферми будет расположен выше E_0 (например, под действием температуры при очень малой степени компенсации, когда $\mu \approx E_0/2$, или при более сильном легировании). На других поверхностях Si и тем более в полупроводниках с простой зоной ($M=m_i=1$) немонотонная зависимость $\varphi(z)$ в приближении Хартри не реализуется.

Другая причина, по которой немонотонность потенциала должна наблюдаться в меньших полях и иметь большую величину, — влияние многочастичных эффектов. Мы оценивали это влияние для однодолинного полупроводника

с изотропной массой при помощи метода функционала локальной плотности (LDF) [3], используя для обменно-корреляционного потенциала формулу

$$\mu_{xc} = -\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \psi^{2/3} N_s^{1/3} \left[1 + 0.0545 r_s \ln \left(1 + \frac{11.4}{r_s} \right) \right],$$

где $r_s = [(4\pi/3) N_s \psi^2]^{1/3}$ [3]. Метод решения системы (1)–(5), изложенный выше, легко обобщается и на этот случай, однако энергия E_1 становится теперь зависящей от N_s . Зависимости $E(N_s)$ и $V(N_s)$, полученные методом LDF, приведены на рис. 3. Видно, что учет многочастичных эффектов меняет величину V более чем в 10 раз. Этого изменения скорее всего недостаточно, чтобы создать условия для немонотонного хода $\varphi(z)$ в полупроводнике с простой зоной. Мы не проводили расчета в приближении LDF для Si, так как для Si поправки к энергии, связанные с силами изображения в диэлектрике, имеют другой знак и тот же порядок величины, что и обменно-корреляционные. Вклю-

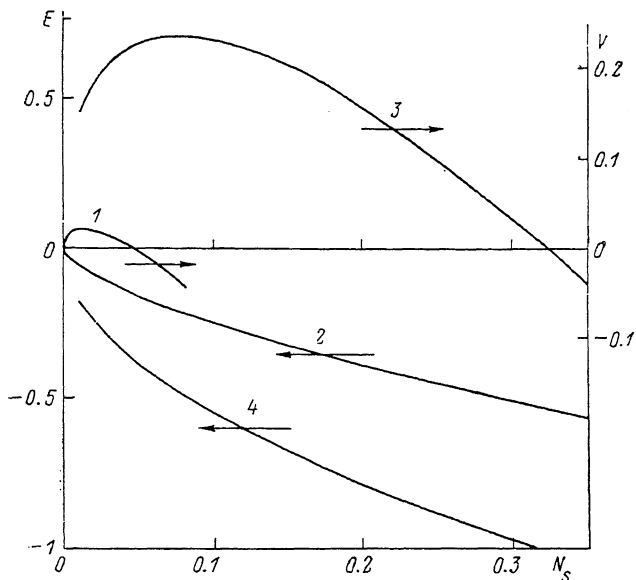


Рис. 3. Величины V и E , рассчитанные в приближении Хартри (1, 2) и в приближении LDF (3, 4).

чение же потенциала изображения в (1) приводит к появлению в правой части уравнения явной зависимости от z , что не позволяет получить для всей системы интеграл типа (11). Однако можно полагать, что суммарное изменение величины V за счет обменно-корреляционной поправки и сил изображения будет иметь тот же порядок величины (т. е. V увеличится в 3–10 раз), что подтверждается результатами расчетов, приведенными в обзоре [5]. Это должно приводить к появлению немонотонной зависимости $\varphi(z)$ на поверхности Si (111) при $N_s \sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Интересно отметить связь приведенных выше результатов с результатами [1, 2]. При освещении полупроводника слабым светом квазиуровень Ферми электронов проходит вблизи дна зоны проводимости. При этом условие $V > -\mu$ будет выполнено при любых достаточно малых N_s независимо от зонной структуры полупроводника. Таким образом, образуется яма для неосновных носителей, что приводит к образованию двойных электронно-дырочных слоев, как предполагалось в [1].

Кратко остановимся на применимости предположений, положенных в основу приведенных расчетов. Несложно показать, что неравенство (7) при интересующих нас значениях N_s эквивалентно обычному условию слабого легирования $N_D a_B^3 \ll 1$ [4]. Предположение о наличии только одного заполненного поверхностного уровня нарушится, когда μ станет больше энергии следующего связ-

ного уровня (если он существует) или границы непрерывного спектра. В приближении Хартри один уровень существует при $V > 0$, т. е. при

$$N_g < (4Mm_a |E_1|)^3 / 4\pi \simeq 0.048 (Mm_a)^3. \quad (18)$$

Влияние многочастичных эффектов расширяет диапазон допустимых N_g' (рис. 3). В любом случае для кремния неравенство (18) не нарушается при любых допустимых N_g .

Авторы благодарны Б. И. Шкловскому, А. Л. Эфросу и И. Н. Ясиевич за полезные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

- [1] Алтухов П. Д., Иванов А. В., Ломасов Ю. Н., Рогачев А. А. Рекомбинационное излучение неравновесных электронно-дырочных пар, связанных со слоем поверхностного заряда в кремнии. — Письма ЖЭТФ, 1984, т. 38, в. 1, с. 5—8.
- [2] Алтухов П. Д., Монахов А. М., Рогачев А. А., Харциев В. Е. Стабильность квазидвумерных электронно-дырочных систем. — ФТТ, 1985, т. 27, в. 2, с. 576—578.
- [3] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М., 1987. 400 с.
- [4] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., 1979. 416 с.
- [5] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М., 1985. 415 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 10.06.1987
Принята к печати 21.07.1987