

Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника

© В.Б. Бондаренко, М.В. Кузьмин⁺, В.В. Кораблев

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

⁺ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 30 октября 2000 г. Принята к печати 25 января 2001 г.)

Введено понятие естественного размерного эффекта в обедненных слоях полупроводника — сравнимость характерного масштаба обедненного слоя со средним расстоянием между электроактивными дефектами. Определены естественные неоднородности электрического поля и потенциала на поверхности полупроводника в случаях собственных и примесных поверхностных состояний. Показана зависимость данных неоднородностей от параметров поверхности и объема.

Влияние дискретности заряда у поверхности твердого тела на распределение электрического поля и потенциала на поверхности не раз обсуждалось ранее [1–6]. По всей видимости, первое упоминание о возможности значительных перепадов значений напряженности поля в двойных электрических слоях содержится в работе [1]. Очевидно, что данный эффект влияет на параметры полупроводниковых приборов, в особенности, при субмикрометровых размерах [3,4]. Дальнейший анализ [5,6] показал, что в обедненных слоях полупроводниковых структур (даже в отсутствие других причин) существуют неизбежные неоднородности электрического поля, связанные с естественной сравнимостью длины обеднения (толщины двойного электрического слоя) со средним расстоянием между заряженными атомами примеси. Таким образом, в широком диапазоне уровней легирования в приповерхностных слоях полупроводников существует естественный размерный эффект, определяющий дискретную структуру области пространственного заряда (ОПЗ). Произведенные оценки и компьютерное моделирование позволили качественно выяснить зависимость естественных неоднородностей электрического поля и поверхностного потенциала от параметров системы. Однако для выяснения характера данных зависимостей необходимо провести статистический анализ, подобный указанному в [7] для определения параметров хаотического потенциала в объеме полупроводника в приближении равномерно заряженного шара. Цель данной работы — обобщить результаты расчетов [5] и аналитически определить величины естественных неоднородностей электрического поля и потенциала на поверхности полупроводника. Следует отметить, что большинство полученных далее соотношений не являются строгими. Следуя [7], мы будем практически везде записывать знак равенства.

Изложение статистического анализа начнем с рассмотрения поверхности с собственными делокализованными состояниями (“проводящей” поверхности). Выберем на поверхности полупроводника площадку с произвольным радиусом R и опирающийся на этот участ-

ток поверхности объем в ОПЗ. Среднее количество примесных атомов, которые попадают в образованный цилиндр, можно рассчитать, перемножив величины концентрации примеси N_0 (будем для определенности полагать, что примесь — полностью и однократно ионизованные доноры) и выбранного объема $V = \pi R^2 L_0$ ($L_0 = \sqrt{\varepsilon U_0 / 2\pi e^2 N_0}$ — ширина ОПЗ, U_0 — величина изгиба зон у поверхности, ε — диэлектрическая проницаемость полупроводника). Очевидно, что статистические параметры данной подсистемы зависят от ее размеров, т.е. от величины R . Полагая, что электрическое поле и потенциал в пределах цилиндра в среднем кратны полю точечного заряда и его изображения на фоне суммарного поля окружения, найдем неоднородность поля на поверхности полупроводника. В данном случае собственных делокализованных поверхностных состояний элемент системы примесь–изображение представляет собой диполь [5].

Вначале найдем вклад в суммарное электрическое поле на поверхности площадью $S = \pi R^2$ пробного диполя. Для этого усредним поле диполя по возможным дипольным моментам и по поверхности. Поле i -го диполя в плоскости поверхности содержит только аксиальную компоненту и в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\mathcal{E}_i = -\frac{ed_i}{\varepsilon(\rho^2 + d_i^2/4)^{3/2}}, \quad (1)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ — радиальная координата, ed_i — дипольный момент системы примесь–изображение. Последовательное усреднение (1) по дипольным моментам и поверхности S приводит к результату

$$\langle \mathcal{E}_i \rangle = -\frac{4e}{\varepsilon L_0 R^2} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (2)$$

В сильно разбавленном растворе замещения или внедрения (а именно таковым является легированный полупроводник) примесь распределена некоррелированно и для нее справедливо распределение Пуассона. Применительно к ОПЗ для плотности распределения примеси $p(N)$

можно записать

$$p(N) = \frac{\langle N \rangle^N \exp(-\langle N \rangle)}{N!},$$

где N — количество примеси в объеме V . Учитывая, что $N_0 L_0 = N_s$ — поверхностная концентрация заряда, среднее количество частиц в выбранном объеме или диполей на выбранном участке поверхности будет

$$\langle N \rangle = N_s \pi R^2, \quad (3)$$

а среднеквадратичное отклонение

$$\delta N = R \sqrt{\pi N_s}. \quad (4)$$

Вклад зарядов, находящихся внутри V , в среднее поле на поверхности S

$$\mathcal{E}(R) = \sum_i \langle \mathcal{E}_i \rangle, \quad (5)$$

где суммирование производится по примесным атомам, количество которых определено выражением (3). Отметим, что вклад в поверхностное поле системы диполей примесь-изображение окружения в среднем есть поле плоского конденсатора с плотностью заряда на обкладках eN_s за вычетом (5). Поскольку под знаком суммы в (5) стоит величина, не зависящая после усреднения от индекса суммирования, то это есть произведение (2) и (3). Используя (4), аналогично можно записать величину дисперсии поля на выбранной поверхности: $\delta \mathcal{E}(R)$. Как и следовало ожидать, в пределе $R \rightarrow \infty$ $\mathcal{E}(R)$ стремится к величине поля в одномерной модели

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \mathcal{E}(R) = -\frac{4\pi e N_s}{\varepsilon}, \quad (6)$$

а величина $\delta \mathcal{E}(R)$ стремится к нулю, что справедливо для макроскопической системы в целом.

Распределение Пуассона допускает произвольную малость среднего количества частиц в объеме V . Рассматривая различные по размерам подсистемы, получаем последовательность величины характерных неоднородностей поля на поверхности. Выбор конкретного значения дисперсии, по всей видимости, зависит от параметров задачи и характерных масштабов (например, длины волны электрона, длины свободного пробега носителя и т.п.). Величина неоднородности поля в точке должна быть вычислена как максимально возможная на промежутке изменения R от 0 до ∞ . Соответственно необходимо определить максимум функции $\delta \mathcal{E}(R)$ на всей области изменения аргумента. Простые операции по отысканию экстремума приводят к результату — $R = 0$. Возникающие неопределенности при вычислении $\delta \mathcal{E}(0)$ устраняются при переходе к пределу $R \rightarrow 0$. В этом случае дисперсия электрического поля может быть определена из выражения

$$\delta \mathcal{E} = \left| \lim_{R \rightarrow 0} \langle \mathcal{E}_i \rangle \delta N \right|. \quad (7)$$

Здесь введено обозначение $\delta \mathcal{E} = \delta \mathcal{E}(0)$. Явный вид $\delta \mathcal{E}$ следует из (2) и (4). После подстановки данных выражений в (7) и вычисления предела имеем

$$\delta \mathcal{E} = \frac{4e\sqrt{\pi N_s}}{\varepsilon L_0}. \quad (8)$$

Сравним теперь полученную дисперсию электрического поля с полем изгиба поверхностных зон (6). Для этого достаточно вычислить отношение этих величин. В результате имеем

$$\delta_0 = \frac{1}{L_0 \sqrt{\pi N_s}}. \quad (9)$$

Здесь $\delta_0 = \delta \mathcal{E}/|\mathcal{E}_0|$, $\mathcal{E}_0 = \lim_{R \rightarrow \infty} \mathcal{E}(R)$. В соотношении (9) величина $(\pi N_s)^{-1/2}$ есть радиус основания пробного цилиндра, в котором содержится в среднем один примесный атом.

Таким образом, оценку естественного размерного эффекта в ОПЗ полупроводника можно провести, исходя из выражения (9). В качестве критерия дискретности структуры можно выбрать порядковое равенство $\delta_0 \sim 1$. По сравнению с отношением среднего расстояния между примесными атомами к длине ОПЗ в полученном критерии зависимость от концентрации примеси несколько более сильная. Легко показать, что правая часть в (9) растет как $N_0^{1/4}$ с увеличением уровня легирования. Соответственно изменение N_0 на 2 порядка приводит примерно к трехкратному изменению δ_0 .

Для вычисления неоднородности потенциала на проводящей поверхности воспользуемся правилом переноса ошибок (см., например, [8]). В соответствии с изложенным в [5] выводом выражения для потенциала в приближении неизменности плотности состояний на поверхности полупроводника при закреплении уровня Ферми у дна поверхностной зоны имеем

$$U(x, y) = U_0 + kT \times \ln \frac{1 - \exp\{[\sigma(x, y) - eD\Delta E]/eDkT\}}{\exp[\sigma(x, y)/eDkT] - 1} - E_F^{(0)}, \quad (10)$$

где

$$E_F^{(0)} = kT \ln \frac{1 - \exp[(\sigma_0 - eD\Delta E)/eDkT]}{\exp(\sigma_0/eDkT) - 1}$$

— положение уровня Ферми относительно дна поверхностной зоны в одномерной модели изгиба зон, $\sigma_0 = eN_s$ — среднее значение поверхностной плотности заряда, D и ΔE — плотность электронных состояний и энергетический размер поверхностной зоны. Функциональная зависимость от напряженности электрического поля содержится во втором слагаемом суммы (10). Выделим главную часть этого члена. Так как плотность собственных поверхностных состояний, как правило, высока (более чем 10^{12} см⁻²эВ⁻¹) и размер поверхностной

зоны предполагается большим по сравнению с kT , величины поверхностной плотности заряда σ и $\sigma_0 \ll eD\Delta E$. Следовательно, экспонентой в знаменателе выражения под логарифмом можно пренебречь по сравнению с единицей. Уравнение (10) преобразуется к виду

$$U(x, y) = U_0 + kT \ln \frac{\exp(\sigma_0/eDkT) - 1}{\exp[\sigma(x, y)/eDkT] - 1}. \quad (11)$$

Выражение (11) определяет зависимость U от случайной величины поля $\mathcal{E} = -4\pi\sigma/\varepsilon$ и удовлетворяет условию применения правила переноса ошибок. При этом величина δU , характеризующая неоднородности потенциала, может быть определена из выражения

$$\delta U \approx \left| \frac{\partial U}{\partial \mathcal{E}}(\mathcal{E}_0) \right| \delta \mathcal{E}. \quad (12)$$

Производная потенциала (11) по полю в точке $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ имеет вид

$$\frac{\partial U}{\partial \mathcal{E}}(\mathcal{E}_0) = -\frac{\varepsilon}{4\pi eD} \frac{1}{1 - \exp(-N_s/DkT)}.$$

Таким образом, для естественных неоднородностей потенциала на проводящей поверхности полупроводника при пиннинге уровня Ферми у дна зоны получаем

$$\delta U \approx \frac{1}{DL_0} \sqrt{\frac{N_s}{\pi}} \frac{1}{1 - \exp(-N_s/DkT)}. \quad (13)$$

В пределе, когда под экспонентой $N_s/DkT \ll 1$ (данный предел, в частности, справедлив при высокой плотности поверхностных состояний и комнатной температуре), выражение для дисперсии потенциала с учетом (9) имеет особенно прозрачный вид

$$\delta U \approx \delta_0 kT. \quad (14)$$

Поскольку определяющая естественные размерные отношения величина δ_0 в широком диапазоне уровней легирования порядка единицы, но все же не превышает единицы, неоднородность потенциала на поверхности в случае собственных делокализованных состояний с закрепленным у дна поверхностной зоны уровнем Ферми в среднем не превышает kT при комнатной температуре.

При пиннинге уровня Ферми на поверхности в середине зоны величина неоднородностей потенциала может быть определена в форме, известной как приближение Томаса–Ферми. Флуктуации плотности заряда должны следовать за изменениями положения уровня Ферми относительно дна поверхностной зоны, которые эквивалентны неоднородностям потенциала:

$$\delta\sigma = eD\delta U. \quad (15)$$

Разумеется, здесь предполагается малость возмущения потенциала по сравнению с энергией Ферми и пренебрегается изменением плотности поверхностных состояний.

Учитывая теперь линейную зависимость поверхностного заряда от поля, выражения (8), (9) и (15), можно связать величину δU с параметрами системы

$$\delta U = \frac{N_s}{D} \delta_0. \quad (16)$$

С точностью до незначительного множителя $\sqrt{\pi}$ порядка единицы этот результат совпадает с (13) при выполнении условия $N_s/DkT \gg 1$.

Полученное выражение для неоднородности электрического поля (8) позволяет непосредственно определить естественные неоднородности высоты барьера Шоттки. Известно, что эффективная высота барьера в контакте металл–полупроводник связана с величиной напряженности электрического поля у границы раздела:

$$U_{\text{eff}}(\mathcal{E}) = U_0 - \sqrt{\frac{-e^3 \mathcal{E}}{\varepsilon}}. \quad (17)$$

Учитывая тот факт, что напряженность приконтактного поля — величина случайная с характерной амплитудой неоднородностей $\delta \mathcal{E}$, для величины неоднородностей высоты барьера Шоттки, аналогично выражению (12), можно записать

$$\delta U_{\text{eff}} \approx \left| \frac{\partial U_{\text{eff}}}{\partial \mathcal{E}}(\mathcal{E}_0) \right| \delta \mathcal{E}. \quad (18)$$

Произведя несложные вычисления с использованием соотношений (17) и (18), получаем

$$\delta U_{\text{eff}} \approx \frac{e^2}{\varepsilon L_0}. \quad (19)$$

Таким образом, величина δU_{eff} примерно равна кулоновской энергии в диэлектрической среде с проницаемостью ε однозарядного центра на расстоянии L_0 от него.

Приведенный выше метод расчета неоднородностей может быть применен в случае "диэлектрической" поверхности, которая реализуется при полностью заполненных (локализованных) собственных и примесных состояниях. В этих случаях возможно непосредственно получить неоднородность поверхностного потенциала, поскольку в рамках метода электростатических изображений известен аналитический вид самого потенциала точечного заряда у поверхности.

При наличии на поверхности неизменного непрерывного и однородного заряда нарушение регулярности потенциала может быть связано с дискретным зарядом примеси, расположенной в ОПЗ. В соответствии с [9] потенциал одного заряженного донора у поверхности имеет вид

$$U_i = -\frac{2e^2}{(\varepsilon + 1)\sqrt{\rho^2 + z_0^2}}, \quad (20)$$

где z_0 — глубина залегания заряда примеси. Изменение величины z_0 находится в диапазоне от 0 до L_0 . Усреднение (20) по возможным z_0 и по площадке на поверхности

с произвольным радиусом R определяет средний вклад одного заряда $\langle U_i \rangle$ в суммарный потенциал. Последовательное интегрирование приводит к результату

$$\langle U_i \rangle = - \frac{2e^2}{(\varepsilon + 1)L_0 R^2} \times \left(L_0 \sqrt{R^2 + L_0^2} + R^2 \ln \frac{L_0 + \sqrt{R^2 + L_0^2}}{R} - L_0^2 \right).$$

Вводя новую переменную $\xi = L_0/R$ и функцию $f(\xi)$ вида

$$f(\xi) = \xi \sqrt{\xi^2 + 1} + \ln \left(\xi + \sqrt{\xi^2 + 1} \right) - \xi^2,$$

имеем усредненный потенциал

$$\langle U_i \rangle = - \frac{2e^2}{(\varepsilon + 1)L_0} f(\xi). \quad (21)$$

Общий вклад в потенциал избыточных зарядов $\delta U(R)$, количество которых задано выражением (4), есть произведение (21) и (4). С учетом введенных обозначений его можно записать в форме

$$\delta U(\xi) = \frac{2e^2 \sqrt{\pi N_s}}{\varepsilon + 1} \frac{f(\xi)}{\xi}. \quad (22)$$

Функциональная зависимость $f(\xi)/\xi$ в (22) монотонна и достигает своей точной верхней грани при $\xi \rightarrow 0$ (т.е. при $R \rightarrow \infty$). Предел для дисперсии потенциала на поверхности $\delta U = \lim_{\xi \rightarrow 0} \delta U(\xi)$ будет

$$\delta U = \frac{4e^2 \sqrt{\pi N_s}}{\varepsilon + 1}. \quad (23)$$

Результат (23) определяет средние неоднородности потенциала на поверхности в случае собственных локализованных состояний и может быть использован для получения второго момента распределения потенциала по поверхности с примесными дискретными состояниями. Вклад в неоднородности потенциала, связанный с подсистемой дискретных зарядов на поверхности, полученный в рамках изложенного выше метода, совпадает с (23). Если заряды на поверхности и в ОПЗ полупроводника распределены независимо, то величина дисперсии потенциала равна

$$\delta U = \frac{4e^2 \sqrt{2\pi N_s}}{\varepsilon + 1}. \quad (24)$$

Отметим, что результат (24) согласуется с данными, полученными в ходе численного эксперимента. В частности, для приведенного в [5] примера системы с параметрами $N_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $U_0 = 0.3 \text{ эВ}$ и $\varepsilon = 12$, вычисление по формуле (24) дает $\delta U = 90 \text{ мэВ}$.

Проанализируем полученные результаты и прежде всего выясним характер зависимости δU и $\delta U_{\text{эфф}}$, описываемых формулами (14), (16), (19) и (23) (или (24)), от концентрации примеси.

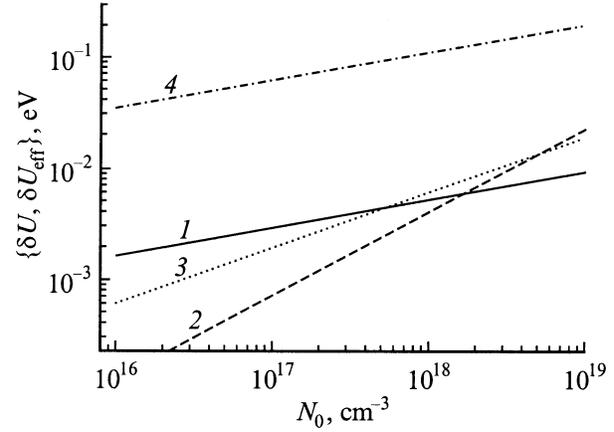


Рис. 1. Зависимости естественных неоднородностей потенциала на поверхности полупроводника δU ($U_0 = 0.3 \text{ эВ}$, $\varepsilon = 12$, $D = 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$, $T = 300 \text{ К}$) и высоты барьера Шоттки $\delta U_{\text{эфф}}$ от концентрации примеси N_0 , рассчитанные по формулам: 1 — (14), 2 — (16), 3 — (19), 4 — (23).

Как известно, уровень легирования — наиболее важный параметр полупроводниковой системы с практической точки зрения. Соответственно возможные изменения поверхностных свойств, в частности изменения неоднородностей поверхностного потенциала при варьировании уровня легирования, должны быть приняты во внимание. Как видно из выражений (14) и (23), рост дисперсии потенциала на проводящей и диэлектрической поверхностях при увеличении N_0 происходит по одному и тому же закону $\propto N_0^{1/4}$. Корневой характер концентрационного закона делает значительными (особенно в случае примесных поверхностных состояний) неоднородности потенциала на поверхности в широком диапазоне уровней легирования. В случае закрепления уровня Ферми в середине поверхностной зоны (соотношение (16)) зависимость потенциала у поверхности существенно более сильная $\delta U(N_0) \sim N_0^{3/4}$. При плотностях поверхностных состояний $\sim 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$ δU достигает десятков мэВ при высоких степенях легирования (более чем 10^{18} см^{-3}). Рост неоднородностей высоты барьера Шоттки (19) с увеличением концентрации N_0 пропорционален корню квадратному из значения N_0 : $\delta U_{\text{эфф}}(N_0) \sim N_0^{1/2}$. Вид зависимостей естественных неоднородностей потенциала на поверхности полупроводника и естественных неоднородностей высоты барьера Шоттки от концентрации примеси представлен на рис. 1.

От величины изгиба зон U_0 , как одного из возможных граничных условий для краевой задачи при решении уравнения Пуассона, зависит длина ОПЗ L_0 . Рост ширины обедненного слоя предопределяет увеличение количества дискретных зарядов в характерном объеме L_0^3 . Соответственно увеличение U_0 приводит к статистически лучшему усреднению дискретного распределения примеси в приповерхностной области полупроводника, что фактически должно уменьшить неоднородности. Такие

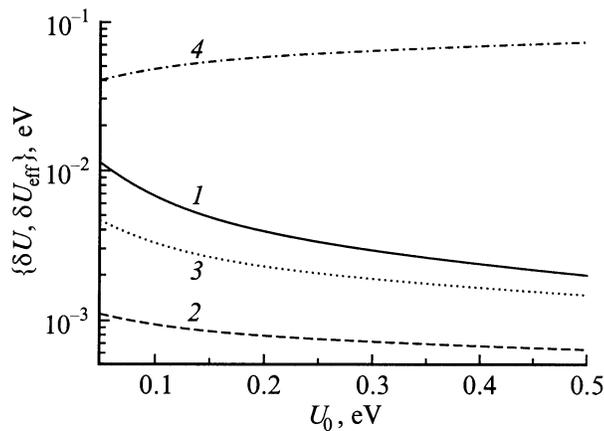


Рис. 2. Зависимости естественных неоднородностей потенциала на поверхности полупроводника δU ($N_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon = 12$, $D = 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$, $T = 300 \text{ К}$) и высоты барьера Шоттки $\delta U_{\text{эф}}$ от поверхностного потенциала U_0 , рассчитанные по формулам: 1 — (14), 2 — (16), 3 — (19), 4 — (23).

формальные соображения позволяют во многих случаях при больших значениях величины изгиба зон пренебречь дискретностью структуры. Следует отметить также, что при общем спаде относительной неоднородности потенциала имеется качественно разный характер изменения абсолютных флуктуаций потенциала в зависимости от реализуемого вида поверхностных состояний (рис. 2). Если в случае собственных делокализованных состояний (проводящая поверхность) падение δU с увеличением изгиба зон происходит с разной интенсивностью ($\sim U_0^{-3/4}$ из соотношения (14) и $\sim U_0^{-1/4}$ из соотношения (16)), то на диэлектрической поверхности неоднородности потенциала медленно растут ($\sim U_0^{1/4}$).

Список литературы

- [1] И.С. Жугулева, В.П. Смилга. *Сб. докл. V конф. по поверхностным силам* (М., Наука, 1974) с. 220.
- [2] С.Г. Дмитриев, Ш.М. Коган. *ФТТ*, **21** (1), 29 (1979).
- [3] D. Arnold. K. Hess. *J. Appl. Phys.*, **61** (11), 5178 (1987).
- [4] J.H. Davies, J.A. Nixon. *Phys. Rev. B*, **39** (5), 3423 (1989).
- [5] В.Б. Бондаренко, Ю.А. Кудинов, С.Г. Ершов, В.В. Кораблев. *ФТП*, **30** (11), 2068 (1996).
- [6] В.Б. Бондаренко, Ю.А. Кудинов, С.Г. Ершов, В.В. Кораблев. *ФТП*, **32** (5), 554 (1998).
- [7] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [8] Д. Худсон. *Статистика для физиков* (М., Мир, 1967).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред* (М., Наука, 1982).

Редактор Н.М. Колчанова

An analysis of as-grown inhomogeneities peculiar to the surface potential of the impurity semiconductor

V.B. Bondarenko, M.V. Kuzmin[†], V.V. Korablev

St.Petersburg State Technical University,
195251 St.Petersburg, Russia

[†] Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St.Peterburg, Russia