

Хаотический потенциал на поверхности компенсированного полупроводника в условиях самоорганизации электрически активных дефектов

© В.Б. Бондаренко[¶], А.В. Филимонов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 17 февраля 2015 г. Принята к печати 26 февраля 2015 г.)

Исследуются естественные неоднородности электрического потенциала на поверхности полупроводника в условиях частичной самоорганизации электрически активных дефектов — формирования в слоях обеднения донорно-акцепторных ионных пар. Определены амплитуда и характер пространственного распределения хаотического потенциала на поверхности полупроводника в случаях локализованных и делокализованных поверхностных состояний. Получена зависимость амплитуды хаотического потенциала от уровня компенсации полупроводника.

Поверхность полупроводника является неупорядоченной подсистемой [1], где структурные нарушения связаны как с собственными дефектами, так и с беспорядочно расположенными на ней адсорбированными атомами и молекулами, а также атомами примеси в слоях пространственного заряда у поверхности. Структурные неидеальности в кристалле, как правило, изменяют электронный спектр системы — формируются локализованные состояния, которые в той или иной степени заполняются. Наличие у поверхности полупроводника сосредоточенного электрического заряда приводит к появлению существенного по величине и своеобразного по протяженности хаотического потенциала [2,3].

Определение параметров хаотического потенциала на поверхности полупроводника имеет значение при теоретическом обсуждении фазовых переходов и явлений переноса [4], а также с точки зрения совершенствования технологии полупроводниковых структур [5–8]. В ряде случаев указанные неоднородности связаны с незранированными ионами примесных атомов на поверхности и в области пространственного заряда (ОПЗ) полупроводника. Приведенные ранее оценки [9], однако, показывают, что при определенных условиях необходимо учитывать взаимодействие между этими частицами. Вследствие электростатического взаимодействия и миграции поверхностных ионов имеет место корреляция в локализации этих точечных зарядов с соответствующим изменением локального и среднего полей [10,11]. В силу данных явлений возникают условия для ассоциации ионов [12]. Появление такого частичного порядка в системе, очевидно, может быть сведено к образованию новой подсистемы поверхностных комплексов, обладающих дипольным моментом или мультипольным моментом более высокого порядка. В работе [13] рассмотрена самоорганизация ионов на поверхности полупроводника и определены в рамках простых моделей характеристики хаотического потенциала в условиях ассоциации поверхностных зарядов.

Комплексообразование в результате взаимодействия дефектов в полупроводниках является важным процессом, определяющим электронные свойства и электрофизические параметры указанных твердотельных систем [12,14]. Одним из возможных видов формируемых ассоциатов за счет дальнедействующих электростатических взаимодействий представляются ионные пары, состоящие из электрически активных разноименно заряженных примесных атомов — доноров и акцепторов. Очевидным итогом такой самоорганизации является изменение хаотического потенциала в компенсированном полупроводнике [15].

Реально любой легированный полупроводник является частично или почти полностью компенсированной системой. Наличие же взаимодействующих заряженных доноров и акцепторов в полупроводнике позволяет в ряде случаев рассматривать подсистему ионных пар. Формирование донорно-акцепторных пар вполне вероятно, если хотя бы одна из компонент таких комплексов оказывается подвижной [14]. При доминировании процесса спаривания ионов разных знаков количество образованных таким образом диполей определяется степенью компенсации. В условиях такой самоорганизации объемного заряда формируются две подсистемы частиц: диполей и оставшихся кулоновских центров. Кроме того, в обедненных слоях у поверхности полупроводника возможна ориентация дипольных частиц в среднем, макроскопическом поле ОПЗ. Очевидно, что ассоциация дефектов и ориентация дипольных комплексов должна приводить к изменению хаотического электростатического потенциала как в объеме полупроводника, так и на его поверхности. На поверхности в силу наличия естественного размерного эффекта в обедненных слоях пространственного заряда [2] и отсутствия существенного экранирования свободными носителями указанные изменения потенциала могут оказаться значительными. Целью настоящей работы является исследование влияния процесса спаривания электроактивных дефектов на хаотический потенциал на поверхности полупроводника.

[¶] E-mail: enter@spbstu.ru

Прежде всего следует рассматривать случай „диэлектрической“ поверхности частично компенсированного донорного полупроводника, который реализуется при полностью заполненных (локализованных) собственных или примесных состояниях. В этих вариантах возможно непосредственно получить неоднородность поверхностного потенциала, поскольку в рамках метода электростатических изображений известен аналитический вид потенциала точечного заряда у поверхности. При наличии на поверхности неизменного непрерывного и однородного заряда нарушение регулярности потенциала может быть связано с дискретностью заряда примеси и образованных диполей, расположенных в ОПЗ. Статистический анализ поверхностных параметров может быть проведен аналогично [2]. В рамках указанного метода необходимо учесть наличие в обедненном приповерхностном слое полупроводника двух обозначенных подсистем частиц.

Потенциальная энергия диполя в приповерхностном поле определяется соответствующим скалярным произведением,

$$U_{\text{dip}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}. \quad (1)$$

Здесь $\boldsymbol{\mu}$ — величина дипольного момента диполя, \mathbf{E} — напряженность приповерхностного поля. Если объемный заряд формируется однозарядными донорами и акцепторами, то

$$\boldsymbol{\mu} = ed, \quad (2)$$

где d — длина плеча соответствующего диполя, e — заряд электрона. В случае полностью обедненного слоя у поверхности полупроводника напряженность электрического поля в ОПЗ имеет вид

$$E(z) = \frac{2U_0}{eL_0^2}(L_0 - z). \quad (3)$$

В (3) z — координата, направленная нормально к поверхности в глубь полупроводника, $L_0 = \sqrt{\varepsilon U_0 / 2\pi e^2 (N_D - N_A)}$ — ширина ОПЗ, $U_0 \gg kT$ — величина изгиба зон у поверхности (T — температура, k — постоянная Больцмана), ε — диэлектрическая проницаемость полупроводника, N_D и N_A — концентрации заряженных доноров и акцепторов. В силу электростатического взаимодействия характерные размеры образованных ионных пар порядка межатомного расстояния [14]. Таким образом, в широком диапазоне уровней легирования полупроводника и степени его компенсации, как правило, $d \ll L_0$ и можно считать неизменной величину d для диполей в поле. При выполнении данного условия в рамках модели жестких диполей [16] возможно определение среднего значения дипольного момента ориентируемого в поле ОПЗ диполя. В состоянии теплового равновесия реализуется соответствующее больцмановское распределение диполей в потенциальном поле. С учетом данного распределения и малости энергии диполя в поле (1) по сравнению с характерной тепловой энергией

средняя величина проекции плеча диполя на ось z пропорциональна величине напряженности поля и равна

$$\langle d_i \rangle = \alpha(L_0 - z_i), \quad (4)$$

где $\alpha = 2U_0 d^2 / 3kTL_0^2$, z_i — глубина залегания i -го диполя. Величина z_i находится в диапазоне от 0 до L_0 .

В соответствии с [16] потенциальная энергия электрона в поле одного диполя на большей части диэлектрической поверхности имеет асимптотический вид

$$U_i \approx -\frac{2e^2}{\varepsilon + 1} \frac{z_i \langle d \rangle}{(\rho^2 + z_i^2)^{3/2}}. \quad (5)$$

В данном выражении ρ — радиальная координата в плоскости поверхности полупроводника. Усреднение (5) по возможным z_i и по площадке на поверхности с произвольным радиусом R определяет средний вклад одного диполя $\langle U_i \rangle$ в суммарную потенциальную энергию электрона. Последовательное интегрирование приводит к результату

$$\langle U_i \rangle = -\frac{2e^2 \alpha}{(\varepsilon + 1)R^2 L_0} \times \left(L_0^2 + 2RL_0 - L_0 \sqrt{R^2 + L_0^2} - R^2 \ln \frac{L_0 + \sqrt{R^2 + L_0^2}}{R} \right)$$

или, вводя новую переменную $\xi = L_0/R$ и функцию $f(\xi)$ вида

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

имеем

$$\langle U_i \rangle = -\frac{2e^2 \alpha}{(\varepsilon + 1)L_0} f(\xi). \quad (6)$$

Поскольку среднее расстояние между ближайшими диполями во много раз превышает их характерный размер, в большинстве случаев подсистему данных комплексов можно считать совокупностью невзаимодействующих частиц, и для нее справедливо распределение Пуассона. Применительно к ОПЗ вероятность $p(N)$ обнаружить N диполей в выделенном объеме имеет вид

$$p(N) = \frac{\langle N \rangle^N \exp(-\langle N \rangle)}{N!}. \quad (7)$$

Учитывая, что при доминировании процесса образования донорно-акцепторных пар концентрация сформированных диполей для частично компенсированного донорного полупроводника практически равна концентрации заряженных акцепторов, среднее количество частиц в выбранном объеме есть

$$\langle N \rangle = N_A L_0 \pi R^2, \quad (8)$$

а среднеквадратичное отклонение —

$$\delta N = R \sqrt{\pi N_A L_0}. \quad (9)$$

Общий вклад в потенциальную энергию избыточных диполей $\delta U_{\pm}(R)$, количество которых задано выражением (9), есть произведение (6) и (9); с учетом введенных обозначений его можно записать в форме

$$\delta U_{\pm}(\xi) = \frac{2e^2\alpha\sqrt{\pi N_A L_0}}{\varepsilon + 1} \frac{f(\xi)}{\xi}. \quad (10)$$

Функциональная зависимость в (10) $f(\xi)/\xi$ монотонна и достигает своей точной верхней грани при $\xi \rightarrow \infty$ (т.е. при $R \rightarrow 0$). Вычисляя этот предел, для вклада подсистемы диполей в дисперсию потенциальной энергии электрона на поверхности полупроводника имеем

$$\delta U_{\pm} = \frac{4e^2\alpha\sqrt{\pi N_A L_0}}{\varepsilon + 1}. \quad (11)$$

Аналогичный анализ для подсистемы оставшихся некоррелированно распределенных кулоновских центров приводит к результату, полученному в работе [2]:

$$\delta U_{+} = \frac{4e^2\sqrt{\pi(N_D - N_A)L_0}}{\varepsilon + 1}. \quad (12)$$

Однако это значение получается при $R \rightarrow \infty$, т.е. для подсистемы независимо распределенных в ОПЗ точечных зарядов вклад в хаотический потенциал вносят в том числе и удаленные формально на бесконечность частицы. Окончательно для системы статистически независимых подсистем частиц имеем

$$\delta U = \frac{4e^2\sqrt{\pi L_0}}{\varepsilon + 1} \sqrt{N_D - (1 - \alpha^2)N_A}. \quad (13)$$

Если же на поверхности полупроводника имеется делокализованный заряд, то за счет перераспределения двумерной электронной плотности происходит соответствующее экранирование полей кулоновских центров и диполей. В случае высокой плотности поверхностных состояний D ($> 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) оценка амплитуды хаотического потенциала возможна в предположении экранирования точечных зарядов на поверхности полупроводника в рамках приближения Томаса–Ферми. В соответствии с данным приближением потенциальная энергия электрона в поле заряженного донора в плоскости поверхности имеет вид

$$U_{+} = -\frac{z_i}{2\pi D(\rho^2 + z_i^2)^{3/2}}. \quad (14)$$

Заменой z_i на $z_i + \langle d_i \rangle$ и изменением знака выражения аналогично можно записать и вклад в потенциальную энергию электрона в поле спаренного с донором заряженного акцептора. Учитывая малость плеча формируемых диполей относительно ширины ОПЗ и ориентационное распределение их дипольных моментов, поверхностный потенциал ионной пары можно представить следующим выражением:

$$U_i \approx \frac{\partial U_{+}}{\partial z_i} \langle d_i \rangle. \quad (15)$$

Процедура усреднения (15) по глубинам залегания диполей и по площадке на поверхности приводит к следующему результату:

$$\langle U_i \rangle = \frac{\alpha}{\pi D R^2 L_0} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (16)$$

Для пуассоновского ансамбля частиц остаются справедливыми выражения (8) и (9). Используя ранее примененный алгоритм, получаем вклад подсистемы диполей в хаотический потенциал на проводящей поверхности с характерным размером R в виде

$$\delta U_{\pm}(R) = \frac{\alpha}{DR} \sqrt{\frac{N_A}{\pi L_0}} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (17)$$

Данная функциональная зависимость достигает своей максимальной величины при $R \rightarrow 0$. Вычисление соответствующего предела дает

$$\delta U_{\pm} = \frac{\alpha}{D} \sqrt{\frac{N_A}{\pi L_0}}. \quad (18)$$

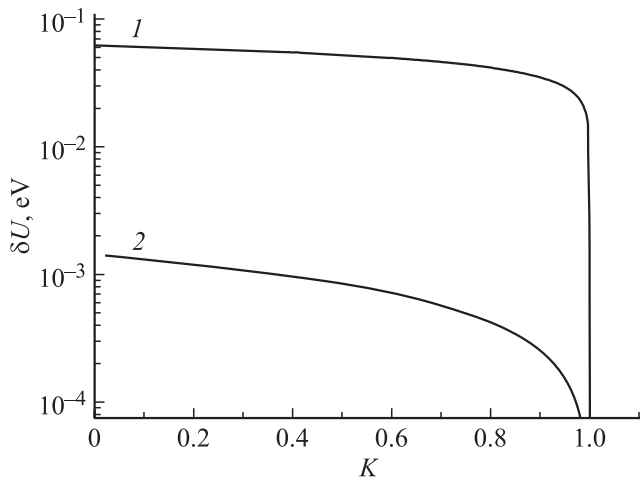
При этом для вклада в хаотический потенциал на поверхности подсистемы оставшихся в ОПЗ заряженных доноров имеем

$$\delta U_{+} = \frac{1}{D} \sqrt{\frac{N_D - N_A}{\pi L_0}}. \quad (19)$$

Выражение (19) получается при вычислении предельного выражения также для бесконечно малой площадки на проводящей поверхности [16]. Окончательно для амплитуды хаотического потенциала на проводящей поверхности компенсированного полупроводника получаем:

$$\delta U = \frac{1}{D\sqrt{\pi L_0}} \sqrt{N_D - (1 - \alpha^2)N_A}. \quad (20)$$

Подведем некоторые итоги проведенного анализа. Прежде всего следует отметить мелкомасштабный характер неоднородностей поверхностного потенциала, формируемых ориентируемыми ионными парами в поле ОПЗ, вне зависимости от вида поверхностных состояний. Однако, если в случае проводящей поверхности результирующие флуктуации потенциала остаются с указанным пространственным распределением, то на поверхности с локализованными поверхностными состояниями хаотический потенциал является суперпозицией вкладов двух существенно различных масштабов. Соответствующие величины амплитуды хаотического потенциала зависят от степени компенсации полупроводника $K = N_A/N_D$. Поскольку в большинстве случаев $\alpha \ll 1$, при наличии диэлектрической поверхности амплитуда хаотического потенциала пропорциональна $(1 - K)^{1/4}$. При реализации условий проводящей поверхности соответствующий параметр хаотического потенциала оказывается пропорциональным $(1 - K)^{3/4}$. Представленные



Амплитуда хаотического потенциала на поверхности донорного кремния ($\epsilon = 12$) с параметрами $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $U_0 = 0.3 \text{ эВ}$, $D = 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$, $T = 300 \text{ К}$ в условиях формирования ионных пар донор–акцептор в зависимости от степени компенсации: 1 — диэлектрическая поверхность, 2 — проводящая поверхность.

на рисунке зависимости указывают на существенное снижение амплитуды хаотического потенциала на поверхности легированного полупроводника в области сильной компенсации. Причиной такого характера зависимости является ослабление естественно размерного эффекта в ОПЗ полупроводника в силу роста ширины обедненной приповерхностной области и, как следствие, статистическое усреднение неоднородных полей кулоновских центров и дипольных частиц у поверхности.

Результаты были получены в СПбПУ в рамках выполнения государственного задания Министерства образования и науки России.

Список литературы

- [1] В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б. Эссер. *Электронная теория неупорядоченных полупроводников* (М., Наука, 1981).
- [2] В.Б. Бондаренко, М.В. Кузьмин, В.В. Кораблев. *ФТП*, **35** (8), 964 (2001) [*Semiconductors*, **35** (8), 927 (2001)].
- [3] А.В. Филимонов, В.Б. Бондаренко, Е.Ю. Королева. *Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед.*, № 7, 78 (2006).
- [4] В.Ф. Гантмахер. *Электроны в неупорядоченных средах* (М., Физматлит, 2003).
- [5] Е.Ф. Венгер, Р.В. Конакова, О.Б. Охрименко, С.Ю. Сапко, Л.В. Шеховцов, В.Н. Иванов. *ФТП*, **35** (4), 439 (2001).
- [6] Н.А. Авдеев, В.А. Гуртов, И.В. Климов, Р.А. Яковлев. *ФТП*, **40** (6), 711 (2006).
- [7] А.С. Потапов, П.А. Иванов, Т.П. Самсонова. *ФТП*, **43** (5), 640 (2009).
- [8] В.А. Козлов, С.В. Оболенский, В.Б. Шмагин, З.Ф. Красильник. *ФТП*, **46** (1), 134 (2012).
- [9] В.Б. Бондаренко, С.Н. Давыдов, А.В. Филимонов. *ФТП*, **44** (1), 44 (2010) [*Semiconductors*, **44** (1), 41 (2010)].
- [10] В.Б. Бондаренко, А.В. Филимонов, Е.Ю. Королева. *Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед.*, № 10, 79 (2010); A.V. Filimonov, V.B. Bondarenko, E.Y. Koroleva. *J. Surface Investigation*, **4** (5), 859 (2010).
- [11] В.Б. Бондаренко, А.В. Филимонов, А.И. Рудской. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **76** (5), 639 (2012) [*Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, **76** (5), 570 (2012)].
- [12] С.В. Булярский, В.И. Фистуль. *Термодинамика и кинетика взаимодействующих дефектов в полупроводниках* (М., Наука, 1997).
- [13] В.Б. Бондаренко, А.В. Филимонов, А.И. Рудской. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **78** (6), 674 (2014) [*Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, **78** (6), 475 (2014)].
- [14] М. Ланно, Ж. Бургуэн. *Точечные дефекты в полупроводниках. Теория* (М., Мир, 1984).
- [15] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [16] И.Е. Тамм. *Основы теории электричества* (М., Наука, 1976).

Редактор Л.В. Шаронова

Chaotic potential on the compensated semiconductor surface under electroactive defects self-organization conditions

V.B. Bondarenko, A.V. Filimonov

Saint Petersburg State Polytechnic University,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract This paper investigates the natural heterogeneity of the electric potential on the semiconductor surface in conditions of electrically active defects partial self-organization — the formation in depletion layers of the donor–acceptor ion pairs. Amplitude and shape of spatial distribution of the random potential on the semiconductor surface in cases of localized and delocalized surface states are defined. The dependence of the amplitude of the random potential on the level of compensation of the semiconductor is found.