

Исследование электронных свойств поверхности полупроводников методом модуляционной спектроскопии электроотражения

© П.А. Генцарь[¶], А.И. Власенко

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарёва Национальной академии наук Украины, Киев-028, Украина

(Получена 16 января 2006 г. Принята к печати 30 января 2006 г.)

Сделан анализ связи осцилляций Келдыша–Франца с электронными параметрами полупроводниковых материалов при сильнополевом режиме измерений. Возможности использования модуляционной спектроскопии электроотражения для исследования электронных свойств поверхности полупроводников продемонстрированы на примере спектров электроотражения гомоэпитаксиальных пленок *n*-GaAs(100) с концентрацией $10^{17}–10^{18}$ см⁻³. Спектры измерены методом барьера Шоттки при комнатной температуре, в неполяризованном свете, в спектральном диапазоне 1.3–1.65 эВ в области перехода E_0 ($\Gamma_{8v}–\Gamma_{6c}$). Из количественного анализа спектров электроотражения получены электронные параметры пленок: энергия электронного перехода E_0 , электрооптическая энергия $\hbar\theta$, поверхностное электрическое поле F_s , энергетическое время релаксации носителей заряда τ , протяженность осцилляции волновой функции квантово-механической частицы λ_{KF} с приведенной эффективной массой μ при данном поверхностном электрическом поле F_s , величина электронной подвижности μ_e .

PACS: 78.20.Bh, 78.20.Jq, 78.40.Fy, 78.68.+m

1. Введение

Толщина слоя, формирующая сигнал электроотражения, который наблюдается в области прямых межзонных переходов, определяется глубиной проникновения электрического поля и света. Использование модуляционной спектроскопии электроотражения позволяет исследовать электронные явления в приповерхностных слоях, сделать выводы об их структурном совершенстве. В последнее время изучению поверхностных свойств полупроводников уделяется все больше внимания [1,2]. Это связано с тем, что геометрические размеры рабочих элементов электронных приборов современного поколения таковы, что поверхность и границы раздела (металл–полупроводник, полупроводник–полупроводник и т.д.) играют определяющую роль в их работе. Поэтому в данной работе проанализированы возможности модуляционной спектроскопии электроотражения для исследования электронных свойств поверхности полупроводников.

2. Теория электроотражения

Относительное изменение отражательной способности образца $\frac{\Delta R}{R}(E, F)$ в электрическом поле F равно

$$\frac{\Delta R}{R}(E, F) = \frac{R(E, F) - R(E, 0)}{R(E, 0)} = A(n_0, n, x)\Delta\epsilon_1 + \beta(n_0, n, x)\Delta\epsilon_2, \quad (1)$$

где $R(E, F)$ — сигнал отражения при наличии модуляции и постоянного смещения, $R(E, 0)$ — сигнал отражения при отсутствии электрического поля, $E = \hbar\omega$ — энергия фотонов, A и β — парциальные коэффициенты

Серафина [3]. Наличие поверхностного электрического поля полупроводника F обуславливает изменение комплексного показателя преломления

$$N = n + ix,$$

а отсюда следует и изменение комплексной диэлектрической функции в приповерхностной области полупроводника

$$\epsilon(E, F) = \epsilon_1(E, F) + i\epsilon_2(E, F)$$

в сравнении с ее значением в объеме (эффект Келдыша–Франца) [4,5]. Согласно [3,6], изменение мнимой части $\Delta\epsilon_2(E, F)$ комплексной диэлектрической проницаемости для трехмерной критической точки типа M_0 в случае прямых разрешенных переходов в электрическом поле F можно записать в виде

$$\Delta\epsilon_2(E, F) = \epsilon_2(E, F) - \epsilon_2(E, 0) = \frac{2e^2(2\mu)^{3/3}p^2(\hbar\theta)^{1/2}}{(m_c^*)^2\hbar E^2} F_{eo}(\eta), \quad (2)$$

где $E_{eo}(\eta)$ — электрооптическая функция первого рода (изменение коэффициента поглощения в электрическом поле), аргумент которой равен

$$\eta = (E_0 - E)/\hbar\theta;$$

E_0 — энергия электронного перехода; $\hbar\theta$ — характерный параметр эффекта Келдыша–Франца (электрооптическая энергия), который равен [3,6–9]

$$\hbar\theta = \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{2\mu} \right)^{1/3}, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*},$$

μ — приведенная эффективная масса для рассматриваемого оптического перехода, m_c^* и m_v^* — эффективные

[¶] E-mail: gentsar@isp.kiev.ua

массы электронов и дырок. Функция $F_{co}(\eta)$ определяется через функцию Эйри $Ai(\eta)$ и ее производную $Ai'(\eta)$ в виде [3]

$$F_{co}(\eta) = \pi [Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)] - U(-\eta)(-\eta)^{1/2}, \quad (3)$$

где $U(x)$ — функция Хэвисайда.

Функция Эйри $Ai(\eta)$ описывает одномерное движение свободных носителей заряда в однородном электрическом поле внешних сил. Используя соотношение Крамерса–Кронига, находят изменение реальной части $\Delta\epsilon_1(E, F)$ комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(E, F)$ в электрическом поле F [3,6]:

$$\Delta\epsilon_1(E, F) = \frac{C_1(\hbar\theta)^{1/2}}{E^2} G(\eta), \quad (4)$$

где C_1 — коэффициент, $G(\eta)$ — электрооптическая функция второго рода (изменение показателя преломления в электрическом поле), которая имеет вид

$$G(\eta) = \pi [Ai'(\eta)Bi'(\eta) - \eta Ai(\eta)Bi(\eta)] + U(\eta)\eta^{1/2}, \quad (5)$$

где $Bi(\eta)$ и $Bi'(\eta)$ — модифицированная функция Эйри и ее производная. Следует отметить, что функции $Ai(\eta)$ и $Bi(\eta)$ являются независимыми решениями уравнения эффективных масс электронно-дырочной пары в окрестности оптического перехода [7]. При учете уширения Γ электронного перехода E_0 параметр η равен [3]:

$$\eta = \frac{E_0 - \hbar\omega + i\Gamma}{\hbar\theta}. \quad (6)$$

Для случая малых изменений фазового угла $\Delta\varphi$ действительную и мнимую составляющие изменения диэлектрической проницаемости можно представить в форме [3]:

$$\Delta\epsilon_1 = \frac{1}{2} \gamma \frac{\Delta R}{R} - \delta \Delta\varphi, \quad (7)$$

$$\Delta\epsilon_2 = \frac{1}{2} \delta \frac{\Delta R}{R} + \gamma \Delta\varphi, \quad (8)$$

где

$$\gamma = \frac{n}{n_0} (n^2 - 3x^2 - n_0^2), \quad (9)$$

$$\delta = \frac{x}{n_0} (3n^2 - x^2 - n_0^2). \quad (10)$$

Модуляция фазы $\Delta\varphi(E_0)$ определяется преобразованием спектра электроотражения по Крамерсу–Кронигу:

$$\Delta\varphi(E_0) = -\frac{E_0}{\pi} p \int_0^\infty \frac{[\Delta R/R(E)]dE}{E^2 - E_0^2}. \quad (11)$$

Таким образом, относительное изменение отражающей способности исследуемого образца в электрическом поле $\frac{\Delta R}{R}(E, F)$ можно выразить через изменение действительной части диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon_1$ и мнимой части диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon_2$. Изменения $\Delta\epsilon_2$ и $\Delta\epsilon_1$ аналитически выражаются через

электрооптические функции первого рода $F_{co}(\eta)$ [см. (2)] и второго рода $G(\eta)$ [см. (4)], аргумент которых имеет вид (6).

Толщина слоя, которая принимает участие в формировании сигнала электроотражения, определяется глубиной проникновения электрического поля (глубина экранирования по модели Дебая L_D или Томаса–Ферми L_{TF}) и света. Поэтому метод электроотражения очень чувствителен к структуре тонкого приповерхностного слоя толщиной $d = \lambda/4\pi n$ — глубине проникновения света с длиной волны λ .

Известно, что модуляционный спектр $\frac{\Delta R}{R}(E)$ имеет резкий экстремум при энергии запрещенной зоны E_0 (в классически запрещенной области $\hbar\omega < E_0$) и осциллирует выше E_0 (классически разрешенная область энергии фотонов $\hbar\omega > E_0$) [3,6]. Наличие затухающих осцилляций в высокоэнергетической области спектра, период которых уменьшается с ростом энергии и сильно зависит от приложенного электрического поля, характерно для сильнополевого режима измерений. В этом случае при обработке экспериментальных спектров нужно проводить теоретический расчет кривых электроотражения с использованием уширенных функций Эйри [3,6]. Согласно теории [10], в сильнополевом режиме измерений для энергий E_m , которые отвечают экстремумам $|\frac{\Delta R}{R}|_m$, выполняется равенство

$$m\pi = \psi + \frac{4}{3} \left(\frac{E_m - E_0}{\hbar\theta} \right)^{3/2}, \quad (12)$$

где m — номер осцилляции, E_m — энергетическое положение экстремума осцилляции, ψ — относительный фазовый фактор. Соотношение (12) указывает на то, что из наклона зависимости величины $4(E_m - E_0)^{3/2}/3\pi$ от номера осцилляции m можно определить электрооптическую энергию $\hbar\theta$. Используя это значение, можно определить поверхностное электрическое поле

$$F_s = \left[\frac{2\mu(\hbar\theta)^3}{e^2\hbar^2} \right]^{1/2}. \quad (12a)$$

Релаксационные эффекты в поглощении света кристаллом описывают феноменологическим параметром уширения Γ [см. (6)], связанного со временем энергетической релаксации фотогенерированных носителей заряда τ соотношением $\Gamma = \hbar/\tau$. Это позволяет оптическим методом электроотражения оценить значение τ для соответствующих электронных переходов. Величина τ определяется взаимодействием электронов с колебаниями решетки, примесями, дефектами поверхностного характера (поскольку сигнал электроотражения формируется в области пространственного заряда).

Параметр уширения Γ экспериментальных спектров может быть найден по полуширине первого экстремума в спектре электроотражения, и его численное значение совпадает со значением, найденным по затуханию осцилляций Келдыша–Франца [10].

Величина фазового фактора ψ (12) определяется из экстраполяции зависимости

$$\frac{4}{3\pi}(E_m - E_0)^{3/2} = f(m)$$

до пересечения с осью абсцисс. Сильнополевой спектр позволяет установить связь между периодами осцилляций Келдыша–Франца

$$\Delta E_m = E_m - E_{m-1}$$

и электронными параметрами полупроводниковых материалов. Из формулы (12) следует, что

$$\Delta E_1 = E_1 - E_0 = \left[\left(\frac{3}{4}(\pi - \psi)^{2/3} \right) \right] \hbar\theta, \quad (13)$$

$$\Delta E_m = E_m - E_{m-1} = \left\{ \left[\frac{3}{4}(m\pi - \psi) \right]^{2/3} - \left[\frac{3}{4}((m-1)\pi - \psi) \right]^{2/3} \right\} \hbar\theta, \quad (14)$$

где $m = 2, 3, 4, \dots$. Кроме того, из формулы (12) вытекает, что

$$\Delta E = E_m - E_0 = \left[\frac{3}{4}(m\pi - \psi) \right]^{2/3} \hbar\theta, \quad (15)$$

где ΔE — расстояние от энергии перехода E_0 до экстремума последней осцилляции. Между экспериментальными параметрами должна существовать связь

$$\Delta E = E_m - E_0 = 2 \frac{(\hbar\theta)^3}{\Gamma^2} = 2 \left(\frac{e^2 F_s^2 \tau^2}{2\mu} \right). \quad (16)$$

Характерный для эффекта Келдыша–Франца параметр λ_{KF} , который определяет протяженность осцилляции волновой функции квантово-механической частицы с приведенной массой μ в однородном электрическом поле F_s , т.е. длину волны электрона с энергией $\hbar\theta$, находят по формуле

$$\lambda_{KF} = \frac{\hbar\theta}{eF_s}.$$

Если в экспериментальных спектрах электроотражения осцилляции Келдыша–Франца отсутствуют, а электрооптическая энергия $\hbar\theta$ сопоставима с феноменологическим параметром уширения Γ , то реализуется так называемый промежуточный случай. Следует отметить, что в области промежуточных полей изменение диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon = \epsilon(E, F) - \epsilon(E, 0)$ приблизительно линейно по электрическому полю F [11]. Для значений $\hbar\theta \leq \Gamma/3$ наблюдается исчезновение осцилляций Келдыша–Франца и превращение спектра в резонансную структуру, которая состоит из положительного и отрицательного экстремумов (так называемый слабополевой режим измерений). В этом случае информативность спектра резко понижается, а энергия критической точки E_0 и феноменологический параметр уширения Γ определяются по трехточечному методу [12].

3. Методика эксперимента

Измерения гомоэпитаксиальных пленок n -GaAs(100) с концентрацией электронов $n_e = 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$ выполнены в неполяризованном свете, с использованием барьера Шоттки [3,13], образованного напылением полупрозрачного слоя хрома на поверхность исследуемого материала. Все измерения проведены в области перехода E_0 ($\Gamma_{8V} - \Gamma_{6C}$) в спектральном диапазоне 1.3–1.65 эВ. Экспериментальные результаты получены при комнатной температуре ($T = 300 \text{ К}$) на частоте первой гармоники модуляции $f = 2.2 \text{ кГц}$. Предельная чувствительность измерений составляла $5 \cdot 10^{-6}$, а спектральная раздельная способность $3 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$.

4. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 показан спектр электроотражения эпитаксиальной пленки n -GaAs(100) с концентрацией электронов $n_e = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, полученный методом барьера Шоттки. Полярность экстремумов электроотражения показывает, что на поверхности реализуется слой истощения. Для количественной интерпретации полученных данных следует учитывать наличие затухающих осцилляций у высокоэнергетической области спектра, период которых уменьшается с ростом энергии и сильно зависит от приложенного электрического поля. Эти особенности характерны для сильнополевого режима измерений, поэтому на рис. 1 представлены результаты расчетов, выполненных с использованием уширенных функций Эйри [3,6] (пунктирная кривая). Удовлетворительное согласование с экспериментом достигается для следующих значений параметров: $E_0 = 1.427 \text{ эВ}$ (энергия первого экстремума в спектре электроотражения), $\hbar\theta = 0.04 \text{ эВ}$, $\Gamma = 0.028 \text{ эВ}$. В высокоэнергетической области спектра отличие подгоночной теоретической кривой электроотражения от экспериментальной объясняется зависимостью феноменологического параметра уширения Γ от энергии фотонов E .

Параметр $\hbar\theta$ и поверхностное электрическое поле F_s определяли в соответствии с соотношениями (12) и (12а). Наклон зависимости $(4/3\pi)(E_m - E_0)^{3/2}$ от номера осцилляции m (рис. 2) дает величину $(\hbar\theta)^{3/2} = 0.8 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}^{3/2}$. Отсюда $\hbar\theta = 0.04 \text{ эВ}$. Поверхностное электрическое поле F_s равно $9.8 \cdot 10^{-6} \text{ В/м}$. При расчете F_s использованы значения эффективных масс электронов и дырок в GaAs $m_c^* = 0.065m_0$, $m_v^* = 0.475m_0$ [14]. Величина фазового фактора ψ , полученная из экстраполяции прямой на рис. 2 и формулы (12), равна $\pi/2$. При этом значении ψ на основании формул (13), (14) получаем соотношения $\Delta E_1 = 1.115 \hbar\theta$, $\Delta E_2 = 1.205 \hbar\theta$, $\Delta E_3 = 0.94 \hbar\theta$, $\Delta E_4 = 0.82 \hbar\theta$, $\Delta E_5 = 0.745 \hbar\theta$.

Соотношения (13), (14) дают также возможность непосредственно определить электрооптическую энергию $\hbar\theta$ по экспериментальной кривой электроотраже-

ния (для трехмерных критических точек при $\psi = \pi/2$). В таблице приведены значения ΔE_m и $\hbar\theta$, вычисленные согласно формул (13), (14). Представленные в таблице данные подтверждают справедливость использования формул (13), (14).

Исходя из асимптотической формы сильнополевого предела электрооптических функций, авторами [15] также было показано, что период третьей осцилляции составляет $\Delta E_3 = 0.94 \hbar\theta$. В наших измерениях $\Delta E_3 = 0.38$ эВ для эпитаксиальной пленки *n*-GaAs (рис. 1), что хорошо согласуется с результатом, полученным в [15].

Определим время τ энергетической релаксации фотогенерированных носителей заряда. Учитывая, что параметр уширения равен $\Gamma = 0.028$ эВ (рис. 1), то

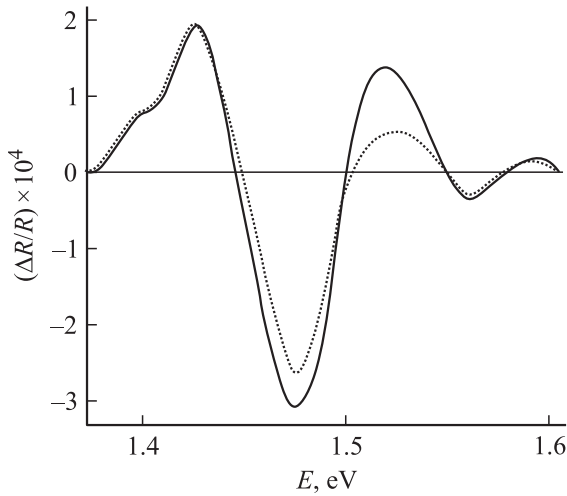


Рис. 1. Спектры электроотражения эпитаксиальной пленки *n*-GaAs(100) с концентрацией электронов $n = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$: сплошная кривая — эксперимент; пунктирная кривая — расчет с параметрами: $E_0 = 1.427$ эВ, $\hbar\theta = 0.040$ эВ, $\Gamma = 0.028$ эВ.

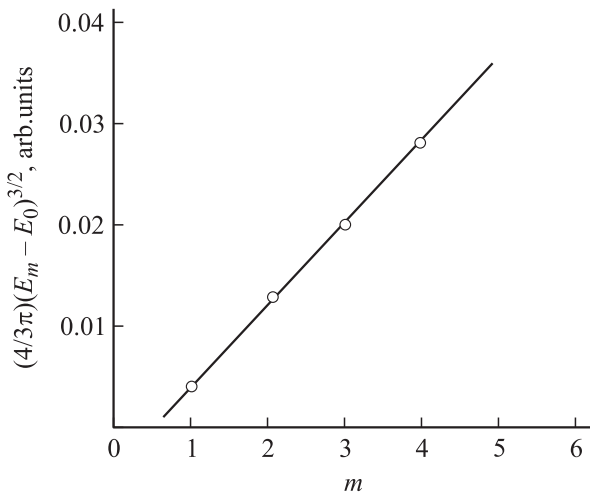


Рис. 2. Величина $4(E_m - E_0)^{3/2}/3\pi$ в зависимости от номера осцилляции m для эпитаксиальной пленки *n*-GaAs(100) с концентрацией электронов $n = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Значения ΔE_m и $\hbar\theta$ для эпитаксиальной пленки *n*-GaAs(100) с концентрацией электронов $n = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$

m	ΔE_m , эВ	$\hbar\theta$, эВ
1	0.045	0.04035
2	0.048	0.03983
3	0.038	0.04042
4	0.033	0.04024

$\tau = \hbar/\Gamma = 2.35 \cdot 10^{-14}$ с. Расстояние ΔE от энергии перехода E_0 до экстремума последней осцилляции (15) равно $\Delta E = 0.164$ эВ. При использовании эмпирической зависимости [16] для электронной подвижности μ_e было получено значение $\mu_e = 3200 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Глубина проникновения света в энергетическом диапазоне 1.3–1.65 эВ изменяется от $d = 17.27$ нм (для $E = 1.65$ эВ) до $d = 21.92$ нм (для $E = 1.3$ эВ). При вычислении глубины проникновения света принимали значение диэлектрической проницаемости GaAs $\epsilon = 12$. Глубину проникновения электрического поля можно оценить, согласно [6], как

$$L_D = \left(\frac{\epsilon \epsilon_0 k T}{e^2 n} \right)^{1/2}.$$

В нашем случае L_D составляет 5.758 нм. Известно, что информационная глубина исследуемого материала определяется наименьшей из величин глубины проникновения света и глубины проникновения электрического поля. Поэтому можно сделать вывод, что „информационная“ глубина исследованной эпитаксиальной пленки *n*-GaAs(100) определяется глубиной экранирования L_D .

Определим протяженность осцилляции волновой функции квантово-механической частицы λ_{KF} с приведенной массой μ в однородном электрическом поле F_s (рис. 2). Характерный для эффекта Келдыша–Франца параметр λ_{KF} равен 4.08 нм.

5. Заключение

Сделанный анализ связи осцилляций Келдыша–Франца с электронными параметрами полупроводниковых материалов при сильнополевого режиме измерений использован для количественного анализа спектров электроотражения эпитаксиальных пленок *n*-GaAs(100) с концентрацией $n = 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$, измеренных методом барьера Шоттки в неполяризованном свете при комнатной температуре в энергетическом диапазоне 1.3–1.65 эВ в области перехода E_0 (переход $\Gamma_{8V} - \Gamma_{6C}$). Получены электронные параметры пленок *n*-GaAs(100): энергия электронного перехода E_0 , электрооптическая энергия $\hbar\theta$, поверхностное электрическое поле F_s , энергетическое время релаксации носителей заряда τ , относительный фазовый фактор ψ , протяженность осцилляции волновой функции квантово-механической частицы λ_{KF} с приведенной эффективной массой μ при данном

поверхностном электрическом поле F_s , оценена величина электронной подвижности μ_e . Экспериментальные спектры электроотражения хорошо описываются одноэлектронной теорией с использованием найденных значений параметров.

Таким образом, полученные из анализа исследованных спектров электроотражения результаты свидетельствуют об эффективном использовании осцилляций Келдыша-Франца для определения электронных параметров полупроводниковых материалов.

Список литературы

- [1] А.О. Волков, О.А. Рябушкин. Приборы и техника эксперимента, № 5, 121 (2001).
- [2] А.А. Герасимович, С.В. Жоховцев, Г. Гобш, Д.С. Доманевский. ФТП, **39** (6), 729 (2005).
- [3] В.А. Тягай, О.В. Снитко. *Электроотражение света в полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1980).
- [4] А.М. Евстигнеев, О.В. Снитко, Л.В. Артамонов, П.А. Генцар, А.Н. Красико. УФЖ, **31** (5), (1986).
- [5] А.М. Евстигнеев, О.В. Снитко, А.Н. Красико, П.А. Генцар, Е.В. Моздор. УФЖ, **32** (2), 269 (1987).
- [6] Ю. Питер, М. Кардона. *Основы физики полупроводников* (М., Физматлит, 2002).
- [7] М. Кардона. *Модуляционная спектроскопия* (М., Мир, 1972).
- [8] Ю.В. Воробьев, В.Н. Добровольский, В.И. Стриха. *Методы исследования полупроводников* (Киев, Вища шк., 1988).
- [9] Г.П. Пека, В.И. Стриха. *Поверхностные и контактные явления в полупроводниках* (Киев, Лыбидь, 1992).
- [10] D.E. Aspnes. Phys. Rev. B, **10** (10), 4228 (1974).
- [11] О.И. Гужва, П.А. Генцар, А.М. Евстигнеев, А.Н. Красико, Н.Д. Марчук, Т.Н. Николаева, О.В. Снитко, В.П. Черкашин. ФТП, **21** (8), 1408 (1987).
- [12] D.E. Aspnes. Surf. Sci., **37**, 418 (1973).
- [13] М.Б. Гусева, Е.М. Дубинина. *Физические основы твердотельной электроники* (М., Изд-во МГУ, 1986).
- [14] Т. Мосс, Г. Баррел, Б. Эллис. *Полупроводниковая оптоэлектроника* (М., Мир, 1976).
- [15] О.Ю. Борковская, С.А. Груша, Н.Л. Дмитрук, А.М. Евстигнеев, Н.А. Клебанова, Р.В. Конакова, А.Н. Красико, К.А. Исмаилов, И.К. Сенищук, М.Е. Лисогорский. ЖТФ, **55** (10), 1977 (1985).
- [16] А.М. Евстигнеев, П.А. Генцар, С.А. Груша, Р.В. Конакова, А.Н. Красико, О.В. Снитко, Ю.А. Тхорик. ФТП, **21** (6), 1138 (1987).

Редактор Т.А. Полянская

A research of electronic properties of a surface of semiconductors by modulating a spectroscopy method of electroreflection

P.A. Gentsar, A.I. Vlasenko

V.E. Lashkarev Institute of Semiconductors Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine,
Kiev-028, Ukraine

Abstract An analysis of the connection of Keldish-Frants oscillations with electronic parameters of semiconductor materials was made at the measurements in the mode of strong field. Opportunities of the modulation spectroscopy of electroreflection for research of electronic properties of a surface of semiconductors were shown as an example of n -GaAs(100) homoepitaxy films with concentration 10^{17} – 10^{18} cm $^{-3}$. Their electroreflection spectra were measured by a barrier Schottky method at room temperature by unpolarized light on the area 1.3–1.65 eV in vicinity of E_0 transition (Γ_{8V} – Γ_{6C}). The electronic parameters of films were received from the quantitative analysis of electroreflection spectra: energy of electronic transition E_0 , electrooptical energy $\hbar\theta$, the surface electric field F_s , power time relaxation of charge carriers τ , extension of wave function oscillations of a quantum-mechanical particle λ_{KF} with a given effective mass μ at the given surface electric field F_s , value of electronic mobility μ_e .