

## Естественные неоднородности потенциала на поверхности полупроводника при равновесном распределении примеси

© В.Б. Бондаренко<sup>¶</sup>, С.Н. Давыдов, А.В. Филимонов

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

(Получена 19 мая 2009 г. Принята к печати 28 мая 2009 г.)

Обсуждаются естественные неоднородности потенциала на поверхности легированного полупроводника при формировании равновесного диффузионного распределения электроактивной примеси в слоях пространственного заряда. Определены характерные значения случайного потенциала в случае невырожденного поверхностного электронного газа. Показана зависимость данных неоднородностей от параметров поверхности и объема.

Определение случайного потенциала на поверхности полупроводника имеет значение как при теоретическом обсуждении фазовых переходов и явлений переноса, так и с точки зрения совершенствования технологии контактных структур. В отсутствии структурных нарушений на самой поверхности возможным (и естественным) источником флуктуаций потенциала является объемный заряд, непрерывно распределенная модель которого в ряде практически интересных случаев у поверхности легированного полупроводника не вполне корректна [1–3]: нивелирование дискретности зарядовой структуры приповерхностных обедненных слоев полупроводников, как показывают оценки, имеет место в случае малых степеней легирования (менее чем  $10^{16}$  см<sup>-3</sup>). С другой стороны, связанные с дискретностью примесного заряда неоднородности потенциала у поверхности с делокализованными электронными состояниями высокой плотности ( $\sim 10^{14}–10^{15}$  см<sup>-2</sup> эВ<sup>-1</sup>) достигают заметных величин (порядка  $kT$  при комнатной температуре) при концентрациях электроактивной примеси, превышающих  $10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Данный результат был получен в предположении равномерного распределения примеси по объему вплоть до поверхности. Такое состояние при наличии приповерхностного изгиба зон может изменяться вследствие процесса направленной диффузии во встроеном электрическом поле. Теоретические оценки и эксперимент показывают [4–9], что при активизации диффузии заряженной примеси внедрения при относительно невысоких температурах ( $T \approx 400–700$  К) в приповерхностной области полупроводника формируется резкий концентрационный профиль  $N(z)$  ( $z$  — координата, направленная нормально поверхности в глубь полупроводника). В частности, равновесное значение концентрации на поверхности мелкой примеси при изгибах зон  $U_0 \gg kT$  может быть вычислено из выражения  $N(0) = N_0 \cdot \exp(U_0/kT)$ , где  $N_0$  — уровень легирования. Таким образом, в ряде случаев область пространственного заряда оказывается существенно более легированной, чем остальной объем. Данный факт при опре-

делении неоднородностей поверхностного потенциала имеет несколько аспектов. Прежде всего очевидно, что равновесное распределение примеси предполагает высокую вероятность близкого расположения к поверхности точечных зарядов, что влечет за собой значительные локальные перепады поверхностного потенциала. Однако значительное увеличение концентрации примеси при относительно небольшом сокращении масштаба обедненной области (примерно в  $\sqrt{U_0/kT}$  раз [4,7]) может привести к известному статистическому усреднению неоднородностей по большому количеству частиц. Кроме того, при накоплении электроактивных дефектов растет сила их взаимодействия, определяющая корреляцию в распределении дискретных зарядов. В любом случае представление о распределенном заряде у поверхности полупроводника неочевидно и требует дополнительного исследования. Цель настоящей работы состоит в попытке оценить влияние накопления примеси на структуру объемного заряда и определить связанные с дискретностью заряда в обедненной области полупроводника неоднородности поверхностного потенциала при равновесном распределении примеси. В дальнейшем будем рассматривать случай мелкой однозарядной примеси (например, доноров) и больших изгибов зон, для которого известно аналитическое выражение для распределения примеси и следует ожидать наиболее сильное изменение неоднородностей поверхностного потенциала.

Чтобы определить среднее расстояние между ближайшими друг к другу электроактивными дефектами  $\langle \ell_{ij} \rangle$ , необходимо записать функцию плотности их распределения. Получаемые в гидродинамическом приближении равновесные профили концентрации примеси [4,6–9] имеют в основном экспоненциальный характер:

$$N(z) \approx N(0) \cdot \exp(-z/L). \quad (1)$$

Здесь масштаб изменения  $L$  порядка длины экранирования  $\ell = \sqrt{\epsilon kT/8\pi e^2 n}$ , которая при заданной температуре определяется параметрами системы: диэлектрической проницаемостью полупроводника  $\epsilon$  и объемным

<sup>¶</sup> E-mail: bondaren@phtf.stu.neva.ru

значением концентрации свободных электронов  $n$ . В случае мелкой примеси при температурах ниже диапазона собственной проводимости можно с хорошей точностью полагать, что  $n \approx N_0$ . Исходя из равновесного концентрационного профиля (1) имеем

$$f(z) = \frac{1}{L} \exp(-z/L). \quad (2)$$

Функция  $f(z)$ , определенная на промежутке  $[0; \infty]$ , выражает собой плотность вероятности обнаружить примесный атом в интервале расстояний от поверхности  $(z; z + dz)$ . Теперь можно определить среднее значение искомой величины  $\langle \ell_{ij} \rangle = N^{-1/3}$ :

$$\langle \ell_{ij} \rangle = \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt[3]{N(z)}} f(z) dz = \frac{3}{2 \cdot \sqrt[3]{N_0}} \exp\left(-\frac{U_0}{3kT}\right). \quad (3)$$

Проведем вычисления характерных длин. Полагая значения параметров системы  $N_0 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $U_0 = 0.3 \text{ эВ}$ ,  $\epsilon = 12$  (для Si),  $T = 600 \text{ К}$ , получаем  $\langle \ell_{ij} \rangle \approx 200 \text{ \AA}$  и  $L \approx 1300 \text{ \AA}$ . Таким образом, при указанных параметрах ширина обеднения примерно в 6 раз больше  $\langle \ell_{ij} \rangle$ . В этих условиях, казалось бы, с хорошей точностью можно полагать  $\langle \ell_{ij} \rangle / L \ll 1$  и пренебречь дискретностью примесного заряда. Однако, вследствие экспоненциальной зависимости  $\langle \ell_{ij} \rangle$  от величины изгиба зон, данное соотношение может сильно изменяться. К тому же приведенная оценка не учитывает особенности кулоновского потенциала и характер его экранирования у поверхности.

Оценку возможной корреляции в расположении примесных дефектов под поверхностью полупроводника предлагается провести из сравнения энергии парного электростатического взаимодействия ионизованных атомов примеси с их характерной тепловой энергией. Равенство этих величин определяет граничные параметры системы, при которых уже нельзя считать атомы примеси невзаимодействующими:

$$\frac{e^2}{\epsilon} N^{1/3} = kT. \quad (4)$$

В соотношении (4) следует подставить значение концентрации  $N = N(0)$ , как наибольшее из возможных. Расчет для кремния с уровнем легирования  $N_0 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  показывает, что влиянием взаимодействия примесных атомов можно пренебречь, если формирование равновесного распределения при изгибе зон 0.3 эВ происходит при температурах выше 360 К. Таким образом, в большинстве случаев с хорошей точностью имеем пуассоновский ансамбль заряженных частиц, распределенных в области у поверхности полупроводника.

Для более детального анализа будем использовать результат, полученный в [4] для равновесного распределения примесного заряда:

$$N(z) = N_0 \left[ \frac{1 + \text{th}(U_0/4kT) \exp(-z/\ell)}{1 - \text{th}(U_0/4kT) \exp(-z/\ell)} \right]^2. \quad (5)$$

Выражение (5) легко раскладывается в ряд по степеням  $\exp(-z/\ell)$ :

$$N(z) = N_0 \left[ 1 + 4 \sum_{j=1}^{\infty} j \cdot \text{th}^j(U_0/4kT) \exp(-jz/\ell) \right]. \quad (5a)$$

Учитывая условие  $U_0 \gg kT$ , при определении объемного заряда у поверхности в разложении (5a) можно пренебречь единицей в скобках:

$$N(z) \approx 4N_0 \sum_{j=1}^{\infty} j \cdot \text{th}^j(U_0/4kT) \exp(-jz/\ell). \quad (5b)$$

При этом с хорошей точностью выражается та часть примесного заряда, которая неэкранирована в обедненном приповерхностном слое. Соответствующая величина поверхностной концентрации заряда  $N_s$  определяется интегрированием  $N(z)$ :

$$N_s = \frac{4\ell \cdot N_0 \text{th}(U_0/4kT)}{1 - \text{th}(U_0/4kT)}. \quad (6)$$

Дальнейшее изложение в основном аналогично [3]. Потенциальную энергию электрона в поле  $i$ -го однозарядного донора в плоскости поверхности диэлектрической среды запишем в виде

$$V_i(\rho) = -\frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + d_i^2/4}}. \quad (7)$$

Здесь  $\rho$  — радиальная координата в плоскости локализации электрона,  $d_i$  — удвоенное расстояние  $i$ -го кулоновского центра до этой плоскости. Фурье-образ (7) в полярной системе координат определяется выражением

$$V_i(q) = -\frac{e^2 \exp(-q \cdot d_i/2)}{q}, \quad (8)$$

где  $q$  — величина волнового вектора в плоскости поверхности. Экранированный потенциал, созданный  $i$ -м кулоновским центром на поверхности, определяется стандартным методом:

$$U_i(\rho) = \int_0^{\infty} U_i(q) J_0(\rho q) q dq, \quad (9)$$

где  $J_0(s)$  — функция Бесселя нулевого порядка,  $U_i(q) = V_i(q)/\kappa(q)$  — фурье-образ экранированного потенциала,  $\kappa(q)$  — функция диэлектрического отклика среды. Выбор вида  $\kappa(q)$  регламентируется состоянием двумерного электронного газа на поверхности полупроводника и степенью неоднородности возмущения. В пределе высоких температур (т.е. классической статистики поверхностных электронов) при наличии свободной

поверхности функция диэлектрического отклика имеет вид [10]

$$\kappa(q) = \frac{\varepsilon + 1}{2} \left( 1 + \frac{q_s(q)}{q} \right). \quad (10)$$

Здесь  $q_s(q)$  — параметр экранирования в двумерной электронной системе. Указанная величина пропорциональна поверхностной концентрации заряда:

$$q_s(q) = \frac{4\pi e^2 N_s}{(\varepsilon + 1)kT} g_1(\lambda q). \quad (11)$$

Здесь  $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mkT}$ ,  $m$  — масса электрона в поверхностной зоне. Фигурирующая в выражении (11)  $g_1(x) = 2\sqrt{\pi} \cdot \Phi(x/4\sqrt{\pi})/x$  определена через действительную часть дисперсионной функции. Несобственный интеграл в смысле главного значения  $\Phi(y)$  выражается через функцию ошибок мнимого аргумента [11]:

$$\Phi(y) = \sqrt{\pi} \exp(-y^2) \operatorname{erfi}(y). \quad (12)$$

При относительно небольшой неоднородности возмущения, т.е. при выполнении неравенства  $\lambda q \lesssim 1$ , можно воспользоваться асимптотическими выражениями для малых аргументов:  $\Phi(y) \approx 2y$  и  $g_1(\lambda q) \approx 1$ . В случае больших изгибов зон для большинства гармоник справедливо также соотношение  $q \ll q_s$ , при котором функцию диэлектрического отклика (10) можно приближенно представить в виде

$$\kappa(q) \approx \frac{2\pi e^2 N_s}{kT \cdot q}. \quad (13)$$

Используя преобразование (9) и выражение (13), получаем экранированный потенциал в плоскости поверхности:

$$U_i(\rho) = -\frac{kT d_i}{4\pi N_s (\rho^2 + d_i^2/4)^{3/2}}. \quad (14)$$

Для вычисления характерной величины неоднородности поверхностного потенциала необходимо произвести усреднение (14) по параметру  $d_i$  (с учетом плотности распределения примеси) и по площадке на поверхности с произвольным радиусом  $R$  [2,3]. Тем самым определяется средний вклад одного заряда  $\langle U_i \rangle$  в суммарный потенциал. Прежде построим функцию плотности вероятности  $f(d_i)$ . Исходя из равновесного распределения (56) с учетом выражения (6) имеем

$$f(d_i) = \frac{1 - \operatorname{th}(U_0/4kT)}{2\ell \cdot \operatorname{th}(U_0/4kT)} \times \sum_{j=1}^{\infty} j \cdot \operatorname{th}^j(U_0/4kT) \exp(-j d_i/2\ell). \quad (15)$$

Вычисление соответствующего двойного интеграла приводит к выражению для  $\langle U_i \rangle$  через специальные функ-

ции [11]:

$$\langle U_i \rangle = -\frac{kT[1 - \operatorname{th}(U_0/4kT)]}{\pi N_s \ell \cdot R^2 \operatorname{th}(U_0/4kT)} \times \sum_{j=1}^{\infty} j \left\{ \frac{\ell}{j} - \frac{\pi R}{2} \left[ \mathcal{H}_1\left(\frac{jR}{\ell}\right) - \mathcal{N}_1\left(\frac{jR}{\ell}\right) \right] + R \right\} \operatorname{th}^j \frac{U_0}{4kT}. \quad (16)$$

Здесь  $\mathcal{H}_1(x)$  и  $\mathcal{N}_1(x)$  — функции Струве и Неймана 1-го порядка соответственно. В дальнейшем интерес будет представлять асимптотическое поведение разности данных специальных функций при малых аргументах:

$$\frac{\pi}{2} [\mathcal{H}_1(x) - \mathcal{N}_1(x)] \approx \frac{1}{x}. \quad (17)$$

Зная дисперсию количества точечных зарядов в характерном объеме  $\pi R^2 \ell$  у поверхности для пуассоновского ансамбля, можно записать величину неоднородностей поверхностного потенциала на площадке радиуса  $R$  в виде

$$\delta U(R) = |\langle U_i \rangle| R \sqrt{\pi N_s}. \quad (18)$$

Как указывалось в [2], выбор конкретного значения  $R$  зависит от параметров системы, неких характерных масштабов обсуждаемых поверхностных явлений или процессов. Величина же неоднородности потенциала в точке на поверхности должна быть вычислена как максимально возможная на промежутке изменения  $R$  от 0 до  $\infty$ . Соответственно необходимо определить максимум функции (18) на всей области изменения аргумента. Простое исследование показывает, что  $\delta U(R)$  достигает своей точной верхней грани при  $R = 0$ . Переходя к соответствующему пределу в (18) с учетом (16), (17) и производя вычисление суммы, получаем результат:

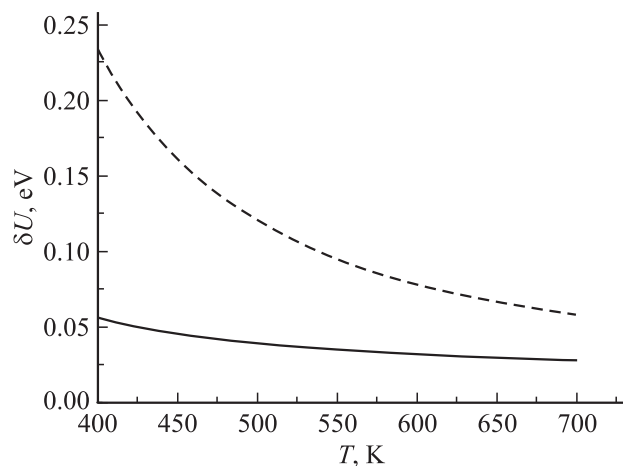
$$\delta U = \frac{kT}{\ell \sqrt{\pi N_s}} \left( 1 - \operatorname{th} \frac{U_0}{4kT} \right)^{-1}. \quad (19)$$

Подставляя в (19) выражение (6), окончательно для величины неоднородности поверхностного потенциала имеем

$$\delta U = \frac{kT}{2\sqrt{\pi \ell^3 N_0}} \left[ \operatorname{th} \frac{U_0}{4kT} \left( 1 - \operatorname{th} \frac{U_0}{4kT} \right) \right]^{-1/2}. \quad (20)$$

Подстановка в (20) значений параметров  $N_0 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $U_0 = 0.3 \text{ эВ}$ ,  $\varepsilon = 12$ ,  $T = 600 \text{ К}$  дает  $\delta U \approx 32 \text{ мэВ}$ , т.е. в указанных условиях величина неоднородности потенциала оказалась меньше  $kT$ . Но этот результат по крайней мере на 3 порядка превышает значение характерных неоднородностей потенциала в соответствующем случае равномерного распределения примеси у поверхности полупроводника с делокализованным сильно вырожденным двумерным электронным газом [3].

Проведем анализ полученного выражения (20). Очевидно, что наиболее существенна зависимость  $\delta U$  от



Зависимость естественных неоднородностей потенциала на поверхности легированного Si ( $\epsilon = 12$ ,  $N_0 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) от температуры формирования равновесного распределения примеси при величинах изгиба зон 0.3 (сплошная кривая) и 0.5 эВ (пунктирная кривая).

величины изгиба зон. При выполнении соотношения  $U_0 > 4kT$  величина неоднородности поверхностного потенциала практически пропорциональна  $\exp(U_0/4kT)$ , т.е. может оказаться экспоненциально большой. Графики зависимости  $\delta U$  от температуры формирования равновесного распределения примеси при двух значениях поверхностного изгиба зон представлены на рисунке. Расчет показывает, что в ряде случаев неоднородности поверхностного потенциала достигают величин порядка изгиба зон. Например, из графика при  $U_0 = 0.5 \text{ эВ}$  и  $T = 400 \text{ К}$  имеем  $\delta U \approx 0.23 \text{ эВ}$ . Ограничение на рост  $\delta U$  в рамках рассматриваемой модели регламентируется критерием (4) и неизбежным разгибом зон при накоплении объемного заряда у поверхности в силу конечности плотности поверхностных состояний. Зависимость от уровня легирования достаточно слабая:  $\delta U \propto N_0^{1/4}$ . Но данная зависимость является растущей. Следует отметить, что указанный вид степенного закона имеет место и в случае равномерного распределения электроактивной примеси у поверхности [2,3].

Итак, накопление электроактивных дефектов у поверхности полупроводника при формировании равновесного концентрационного профиля примеси, строго говоря, не обеспечивает распределенную структуру объемного заряда и модифицирует поверхностный потенциал. Проведенный анализ показывает, что при активации низкотемпературной диффузии примеси у поверхности полупроводника в большинстве случаев неоднородности поверхностного потенциала растут. С учетом экранирующей способности делокализованного двумерного электронного газа возникающий случайный потенциал не является крупномасштабным, поскольку при определении его основной характеристики осуществлялся формальный предельный переход  $R \rightarrow 0$ .

## Список литературы

- [1] В.Б. Бондаренко, Ю.А. Кудинов, С.Г. Ершов, В.В. Кораблев. ФТП, **30** (11), 2068 (1996).
- [2] В.Б. Бондаренко, М.В. Кузьмин, В.В. Кораблев. ФТП, **35** (8), 964 (2001).
- [3] В.Б. Бондаренко, В.В. Кораблев, Ю.И. Равич. ФТП, **38** (3), 331 (2004).
- [4] Ф.Ф. Волькенштейн. *Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции* (М., Наука, 1987).
- [5] С.Г. Дмитриев, В.Ю. Маркин. ФТП, **32** (12), 1439 (1998).
- [6] Р.Ш. Малкович. *Математика диффузии в полупроводниках* (СПб., Наука, 1999).
- [7] В.В. Гавриловец, В.Б. Бондаренко, Ю.А. Кудинов, В.В. Кораблев. ФТП, **34** (4), 455 (2000).
- [8] С.Г. Дмитриев, В.Ю. Маркин. ФТП, **34** (8), 970 (2000).
- [9] С.Г. Дмитриев, В.Ю. Маркин. ФТП, **36** (2), 205 (2002).
- [10] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [11] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М., Наука, 1971).

Редактор Л.В. Беляков

## Inherent disorder potential at the doped semiconductor surface for the impurity equilibrium distribution

V.B. Bondarenko, S.N. Davydov, A.V. Filimonov

State Polytechnical University,  
195251 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The inherent potential inhomogeneity of doped semiconductor surfaces is discussed. That appears while equilibrium diffusion distribution of electroactive impurity is being formed in space-charge surface region. Typical values of disorder potential are determined for the case of non-degenerate surface electron gas. The dependence of these inhomogeneity properties on the surface and volume parameters is considered.