

Дифференциальная емкость полупроводниковой пленки

© Д.Е. Цуриков[¶], А.М. Яфясов^{¶¶}

Санкт-Петербургский государственный университет
(физический факультет, кафедра электроники твердого тела),
198504 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 23 марта 2010 г. Принята к печати 14 апреля 2010 г.)

В рамках феноменологической теории области пространственного заряда предложена быстрая схема вычисления поверхностной дифференциальной емкости полупроводниковой пленки в случае омического контакта на тыльной стороне. Метод расчета рассмотрен на примере полупроводника с параболическим законом дисперсии (*n*-Ge). Обнаружено не связанное с эффектами размерного квантования явление провала вольт-фарадной характеристики с уменьшением толщины полупроводника.

1. Введение

Тенденция к миниатюризации в современной наноэлектронике делает актуальным изучение полупроводниковых систем малых размеров. Одним из наиболее информативных методов исследования полупроводниковых структур является метод вольт-фарадных характеристик (ВФХ) [1–3]. Корректность интерпретации ВФХ напрямую зависит от адекватности выбранной теоретической модели области пространственного заряда (ОПЗ). На сегодняшний день широко распространена феноменологическая теория ОПЗ в модели полубесконечного кристалла. Однако с понижением толщины образца корректность данного подхода оказывается под вопросом. В первую очередь это связано с влиянием тыльной стороны пленки на распределение заряда в ОПЗ. Для выявления границ применимости модели полубесконечного кристалла требуется детальный анализ ВФХ в зависимости от толщины образца. Это можно сделать только на основе надежной вычислительной процедуры. В рамках данной работы предложена быстрая, устойчивая схема расчета поверхностной дифференциальной емкости полупроводниковой пленки, позволяющая получить достоверные результаты в широком диапазоне параметров задачи (уровней легирования, толщин образца).

2. Постановка задачи

Рассмотрим однородно легированную полупроводниковую пленку с омическим контактом на тыльной стороне. Для расчета ВФХ пленки в рамках феноменологической теории ОПЗ используется граничная задача для

нелинейного уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} \partial_z^2 V = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \rho(V), & V(0) = V_S, \quad V(L) = 0, \\ \rho(V) = e_0 n_d(V) - e_0 n_a(V) + e_0 n_h(V) - e_0 n_e(V), \\ n_e(V) = n_C F_e \left(\frac{1}{k_0 T} [E_F - E_C + e_0 V] \right), \\ n_h(V) = n_V F_h \left(\frac{1}{k_0 T} [E_V - E_F - e_0 V] \right), \\ n_C = 2 \left(\frac{m_e k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad n_V = 2 \left(\frac{m_h k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \end{cases} \quad (1)$$

где V — электростатический потенциал, ϵ — диэлектрическая проницаемость пленки, ϵ_0 — электрическая постоянная, ρ — объемная плотность заряда, L — толщина пленки, V_S — поверхностный потенциал на лицевой стороне пленки, e_0 — элементарный заряд, n_d и n_a — концентрации ионизованных доноров и акцепторов соответственно, n_h и n_e — концентрации дырок и электронов соответственно, n_C и n_V — эффективные плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне соответственно, F_e и F_h — функции, определяющие концентрации электронов и дырок соответственно, k_0 — постоянная Больцмана, T — температура, E_F — уровень Ферми, E_C и E_V — энергии краев зоны проводимости и валентной зоны соответственно, m_e и m_h — эффективные массы плотности состояний электронов и дырок соответственно. Конкретный вид n_d и n_a как функций потенциала зависит от вида примесей. Омическому контакту соответствует условие обращения в нуль потенциала на тыльной стороне. Для пленки также справедливо уравнение электронейтральности:

$$\rho(0) = 0. \quad (2)$$

Зная решение уравнения (1), можно найти поверхностную плотность заряда в пленке,

$$Q = \int_0^L dz \rho(V(z)), \quad (3)$$

и ее поверхностную дифференциальную емкость,

$$C = -dQ/dV_S. \quad (4)$$

[¶] E-mail: DavydTsurikov@mail.ru

^{¶¶} E-mail: yafyasov@bk.ru

При нахождении C и Q основную трудность представляет собой решение нелинейного дифференциального уравнения (1). Аналитический расчет здесь возможен только для ряда частных случаев [2,3], в общем случае применим численный расчет. В силу специфического вида правой части уравнения (1) использование стандартных численных алгоритмов (метод стрельбы, сеточные методы) вызывает трудности. В частности это выражается в узости диапазонов концентраций примесей и толщин пленки, в которых можно получить достоверные результаты. Попытка обойти эти принципиальные ограничения, как правило, приводит к значительному увеличению времени счета.

Получим метод, позволяющий избежать необходимости численного решения граничной задачи (1). Для этого (1) удобно переписать в безразмерном виде

$$\begin{cases} \partial_{\xi}^2 v = f(v), & v(0) = v_S, & v(\lambda) = 0, \\ f(v) = v_a(v) - v_d(v) + v_C F_e(\varepsilon_F - \varepsilon_C + v) \\ & - v_V F_h(\varepsilon_V - \varepsilon_F - v), \\ \varepsilon_* = \frac{E_*}{k_0 T}, & v = \frac{e_0 V}{k_0 T}, & \xi = \frac{z}{L_D}, & \lambda = \frac{L}{L_D}, & v_* = \frac{n_*}{n_D}, \\ L_D = \sqrt{-\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\rho'(0)}}, & n_D = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 k_0 T}{L_D^2 e^2}, \end{cases} \quad (5)$$

где L_D — длина дебаевского экранирования, z — координата в направлении, нормальном пленке, а индекс (*) означает наборы индексов при энергетических величинах и концентрациях. Можно видеть, что с учетом (2) для правой части уравнения (5) справедливы соотношения

$$f(0) = 0, \quad f'(0) = 1. \quad (6)$$

Введем безразмерную поверхностную плотность заряда как

$$q = - \int_0^{\lambda} d\xi f(v(\xi)). \quad (7)$$

Учитывая уравнение (5), выражение (7) можно переписать в виде

$$q = \dot{v}_S - \dot{v}_L, \quad (8)$$

где $\dot{v}_S = \dot{v}(0)$, $\dot{v}_L = \dot{v}(\lambda)$. Безразмерную поверхностную дифференциальную емкость запишем как

$$c = -dq/dv_S. \quad (9)$$

Можно показать, что связь безразмерных величин с размерными задается выражениями

$$Q = e_0 n_D L_D q, \quad (10)$$

$$C = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{L_D} c. \quad (11)$$

Из формулы (8) видно, что для расчета q и, следовательно, c достаточно найти значения производной потенциала на границах пленки.

3. Малые значения потенциала

Получим явное выражение для производной потенциала в случае малых значений v_S . Для этого линеаризуем уравнение (5) с учетом (6):

$$\partial_{\xi}^2 v \approx_{v_S \approx 0} v, \quad v(0) = v_S, \quad v(\lambda) = 0. \quad (12)$$

Можно показать, что решением задачи (12) является функция

$$v(\xi) \approx_{v_S \approx 0} \frac{1}{\text{sh}(\lambda)} v_S \text{sh}(\lambda - \xi). \quad (13)$$

Тогда выражения для значений производной на границах примут вид:

$$\dot{v}_S \approx_{v_S \approx 0} -\frac{\text{ch}(\lambda)}{\text{sh}(\lambda)} v_S, \quad \dot{v}_L \approx_{v_S \approx 0} -\frac{1}{\text{sh}(\lambda)} v_S. \quad (14)$$

Подставляя (8) и (14) в (9), имеем

$$c(0) = \text{th}\left(\frac{\lambda}{2}\right). \quad (15)$$

Согласно (15), выражение для поверхностной дифференциальной емкости (11) в состоянии плоских зон примет вид

$$C(0) = \text{th}\left(\frac{L}{2L_D}\right) C_{\infty}(0), \quad (16)$$

где $C_{\infty}(0) = \varepsilon \varepsilon_0 / L_D$ — значение поверхностной дифференциальной емкости в состоянии плоских зон для полубесконечного кристалла [3].

Можно видеть, что выполняются предельные переходы: $C(0) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} C_{\infty}(0)$, $C(0) \xrightarrow{L \rightarrow 0} 0$. В силу монотонности функции, зависящей от L , в правой части (16) можно ожидать, что с уменьшением толщины пленки поверхностная дифференциальная емкость будет понижаться. Заметим также, что соотношение (16) позволяет найти толщину кристалла по известной ВФХ:

$$L = 2 \text{arcth} \left[\frac{C(0)}{C_{\infty}(0)} \right] L_D. \quad (17)$$

Для проведения расчетов в широком диапазоне поверхностных потенциалов и толщин пленки получим уравнения на значения производной потенциала в граничных точках.

4. Произвольные значения потенциала

Перейдем в правой части уравнения (5) от дифференцирования по координате к дифференцированию по потенциалу:

$$\partial_{\xi}^2 v = \partial_{\xi} \dot{v} = \partial_{\xi} v \cdot \partial_v \dot{v} = \dot{v} \partial_v \dot{v} = \frac{1}{2} \partial_v (\dot{v})^2. \quad (18)$$

Тогда, согласно (5), имеем

$$\partial_v (\dot{v})^2 = 2f(v). \quad (19)$$

Интегрируя правую и левую части соотношения (19) по потенциалу от 0 до v , вводя обозначение

$$F(a, b) = 2 \int_a^b du f(u) \quad (20)$$

и учитывая правило выбора знака производной в задаче (5)

$$\operatorname{sgn}(\dot{v}) = -\operatorname{sgn}(v_S), \quad (21)$$

имеем

$$\dot{v} = -\operatorname{sgn}(v_S) \sqrt{(\dot{v}_L)^2 + F(0, v)}. \quad (22)$$

Так как потенциал в задаче (5) является монотонным, он как функция координаты обратим. Тогда из (22) следует

$$\partial_v \xi = -\operatorname{sgn}(v_S) [(\dot{v}_L)^2 + F(0, v)]^{-1/2}. \quad (23)$$

Интегрируя (23) по потенциалу от 0 до v_S , имеем

$$\lambda \operatorname{sgn}(v_S) = \int_0^{v_S} du [(\dot{v}_L)^2 + F(0, u)]^{-1/2}. \quad (24)$$

Выражение (24) является уравнением относительно $(\dot{v}_L)^2$. По известному значению $(\dot{v}_L)^2$ из соотношения (22) можно найти значение производной потенциала на лицевой стороне пленки:

$$\dot{v}_S = -\operatorname{sgn}(v_S) \sqrt{(\dot{v}_L)^2 + F(0, v_S)}. \quad (25)$$

Таким образом, решение задачи (24) с учетом выражений (21) и (25) позволяет найти безразмерную поверхностную плотность заряда согласно (8). Это означает, что исходная задача о решении нелинейного дифференциального уравнения (5) сведена к решению уравнения (24).

Заметим, что ответ к задаче (24) можно найти в аналитическом виде в случае малых поверхностных потенциалов v_S . Для этого воспользуемся разложением функции F в ряд Тейлора. С учетом определения (20) и соотношений (6) с точностью до квадратичного члена имеем

$$F(0, u) \approx_{u \approx 0} u^2. \quad (26)$$

Подставляя (26) в (24), получим

$$\lambda \operatorname{sgn}(v_S) \approx_{v_S \approx 0} \int_0^{v_S} du [(\dot{v}_L)^2 + u^2]^{-1/2} = \operatorname{arcsch} \left(\frac{v_S}{|\dot{v}_L|} \right). \quad (27)$$

Отсюда

$$(\dot{v}_L)^2 \approx_{v_S \approx 0} \left\{ \frac{v_S}{\operatorname{sh}(\lambda)} \right\}^2. \quad (28)$$

Очевидно, что выражение (28) находится в полном соответствии с результатом линеаризации (14) уравнения (5). Это подтверждает корректность использованного приема и обосновывает его применение далее.

В общем случае задачу (24) можно решить только с помощью численных методов. Однако в силу специфического вида правой части уравнения (24) как функции $(\dot{v}_L)^2$ (наличие особенности при $(\dot{v}_L)^2 = 0$, быстрый рост в окрестности искомой точки), а также в силу проблемы локализации решения применение стандартных численных методов (метод Ньютона, метод дихотомии и т.д.) здесь затруднительно. В связи с этим для решения (24) был разработан специальный метод. Суть его состоит в следующем.

Учитывая выражение (27) и вводя обозначение

$$H((\dot{v}_L)^2, v_S) = \int_0^{v_S} du \left\{ [(\dot{v}_L)^2 + F(0, u)]^{-1/2} - [(\dot{v}_L)^2 + u^2]^{-1/2} \right\}, \quad (29)$$

перепишем уравнение (24) в виде

$$\lambda \operatorname{sgn}(v_S) = \operatorname{arcsch} \left(\frac{v_S}{|\dot{v}_L|} \right) + H((\dot{v}_L)^2, v_S). \quad (30)$$

Преобразовав (30), получим

$$(\dot{v}_L)^2 = \left\{ \frac{v_S}{\operatorname{sh}[\lambda \operatorname{sgn}(v_S) - H((\dot{v}_L)^2, v_S)]} \right\}^2. \quad (31)$$

Будем искать решение уравнения (31) методом последовательных приближений вида

$$(\dot{v}_L)_{k+1}^2 = \left\{ \frac{v_S}{\operatorname{sh}[\lambda \operatorname{sgn}(v_S) - H((\dot{v}_L)_k^2, v_S)]} \right\}^2, \quad (32)$$

где $(\dot{v}_L)_k^2$ — приближение к решению задачи (31) на k -й итерации.

Численные расчеты показали, что процедура (32) сходится к решению задачи (24), полученному, когда это возможно, с помощью метода Ньютона. Характерными преимуществами метода (32) являются:

- устойчивость к начальному приближению $(\dot{v}_L)_0^2$,
- низкая чувствительность к значению толщины образца λ (метод сохраняет свою работоспособность практически при любых положительных значениях λ),
- высокая скорость сходимости.

Также итерационная схема (32) удобна в численной реализации. Можно убедиться, что подинтегральная функция в правой части (24), как правило, имеет резкий максимум вблизи точки $u = 0$. Это затрудняет процесс численного интегрирования. Подынтегральная функция в (29) свободна от этого недостатка.

5. Пример расчета вольт-фарадной характеристики пленки

Проиллюстрируем предложенный метод расчетом ВФХ германиевой пленки при $T = 300$ К, $\epsilon = 16.2$, ширине запрещенной зоны $E_g = 0.661$ эВ, $m_e = 0.553m_0$,

$m_h = 0.350m_0$, где m_0 — масса свободного электрона [4]. Примеси полагаем полностью ионизованными: $n_d(V) = \text{const}$, $n_a(V) = \text{const}$. Поскольку германий обладает параболическим законом дисперсии носителей заряда, то

$$F_e(\eta) = F_h(\eta) = F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dx \frac{\sqrt{x}}{\exp(x - \eta) + 1}, \quad (33)$$

где $F_{1/2}$ — интеграл Ферми–Дирака порядка 1/2. Для его вычисления воспользуемся выражением, предложенным в работе [5].

На рис. 1 представлена ВФХ пленки собственного германия. Можно видеть, что с уменьшением толщины пленки поверхностная дифференциальная емкость понижается. Существенные отличия ВФХ пленки от ВФХ

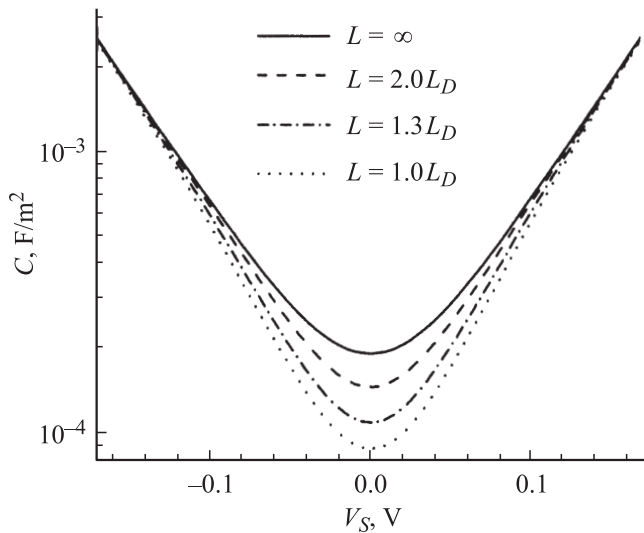


Рис. 1. Вольт-фарадные характеристики собственного германия ($n_a = 0$, $n_d = 0$, $L_D = 7.53 \cdot 10^{-7}$ м).

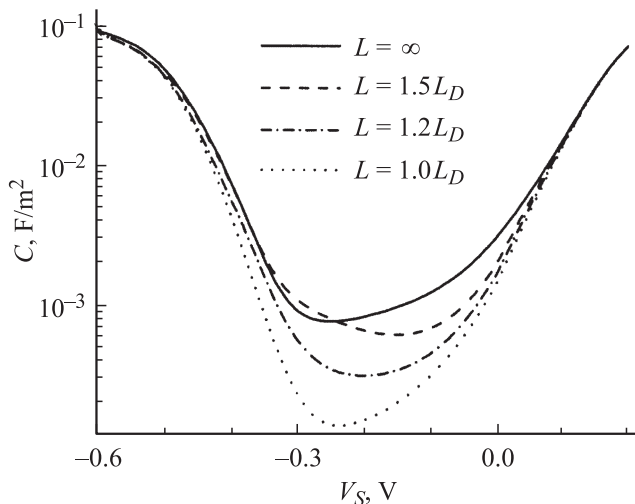


Рис. 2. Вольт-фарадные характеристики легированного германия ($n_a = 0$, $n_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $L_D = 4.83 \cdot 10^{-8}$ м).

полубесконечного кристалла здесь проявляются при толщинах $L \sim L_D$. Это наблюдается и для легированных пленок.

Вольт-фарадная характеристика германия n -типа проводимости приведена на рис. 2. Здесь также наблюдается тенденция к провалу емкости с уменьшением толщины образца. Также можно видеть, что при этом происходит деформация кривой: подъем отдельных участков, смещение точки минимума.

Заметим, что при высоких уровнях легирования длина дебаевского экранирования становится порядка длины волны де Бройля носителя заряда. Это требует усложнения модели для учета эффектов размерного квантования. Поэтому ВФХ для сильно легированного германия здесь не приводятся, так как они априори не имеют физического смысла при $L \sim L_D$ в рамках феноменологической теории ОПЗ.

Расчеты показали, что для германия p -типа проводимости ВФХ пленки близки к ВФХ, представленным выше, с точностью до отражения относительно оси $V_S = 0$.

6. Заключение

В настоящей работе в рамках феноменологической теории ОПЗ предложена быстрая схема вычисления поверхностной дифференциальной емкости полупроводниковой пленки в случае омического контакта на тыльной стороне. Для ее применения требуется предварительно привести исходную задачу к безразмерному виду (5). Оригинальный алгоритм расчета состоит в следующем:

- найти производную потенциала на тыльной стороне пленки ψ_L , решив уравнение (24) с помощью итерационной процедуры (32), задав начальное приближение согласно (28);
- найти производную потенциала на лицевой стороне пленки ψ_S посредством выражения (25);
- найти поверхностную плотность заряда q по формуле (8);
- найти поверхностную дифференциальную емкость c , численно проинтегрировав q согласно выражению (9).

Для получения размерной поверхностной дифференциальной емкости следует использовать соотношение (11).

Предложенный численный алгоритм показал высокую эффективность в широких диапазонах значений параметров задачи при расчете ВФХ пленки германия. Для Ge выявлен провал емкости при толщинах образца порядка L_D , с повышением уровня легирования обнаружено явление деформации ВФХ. Таким образом, провал ВФХ полупроводниковых пленок может иметь сугубо классическую (не связанную с эффектами размерного квантования) природу, что является спецификой влияния тыльной стороны образца на область пространственного заряда.

Список литературы

- [1] H. Garret, W.H. Brattain. Phys. Rev., **99** (2), 376 (1955).
- [2] Р. Клингстон, Э. Нейштадтер. В кн.: *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.Л. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957).
- [3] В.Н. Овсяук. *Электронные процессы в полупроводниках с областями пространственного заряда* (Новосибирск, Наука, 1984).
- [4] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur. *Handbook series on semiconductor parameters* (Word Scientific, 1996) v. 1.
- [5] X. Aumerich-Humet, F. Serra-Mestres, J. Millan. J. Appl. Phys., **54** (5), 2850 (1983).

Редактор Л.В. Шаронова

The capacitance of a semiconductor layer

D.E. Tsurikov, A.M. Yafyasov

St. Petersburg State University,
198504 St. Petersburg, Russia

Abstract By the phenomenological theory of space charge region the fast scheme to calculate the semiconductor layer capacitance in the case of an ohmic contact on the backside is suggested. The computational approach is considered by the example of semiconductor with parabolic dispersion law (*n*-Ge). The phenomenon of the capacitance–voltage characteristic fall with reduction of the semiconductor thickness is revealed, not concerned with size quantization effects.