

Квантовая модель аккумуляции электронов на заряженных границах сильно легированных полупроводниковых пленок

© В.А. Гергель[†], А.В. Верховцева^{††}

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук,
125009 Москва, Россия

(Получена 13 апреля 2010 г. Принята к печати 14 апреля 2010 г.)

Построена новая квантовая модель аккумуляции электронов на положительно заряженных границах полупроводниковых пленок. Используются известные представления о квантовании поперечного движения электронов в однородном электрическом поле, роль которого играет эффективное поле притяжения к положительным поверхностным донорным центрам. На соответствующих квазидискретных состояниях по правилам статистики Ферми размещены электроны с поверхностной плотностью, равной концентрации доноров. При разумных концентрациях все электроны аккумуляционного слоя сосредоточены в основном на первом уровне пространственного квантования. Началу заполнения третьего уровня отвечают сверхвысокие встроенные поля порядка атомных (10^8 В/см). Двукратным интегрированием уравнения Пуассона с электронной плотностью в виде квадратов соответствующих отрезков функции Эйри вычисляется профиль потенциала, описывающего взаимодействие электронов аккумуляционного слоя с другими заряженными частицами, в том числе с дырками. Его граничная величина — поверхностный потенциал — описывает влияние слоя электронной аккумуляции на внешнюю электрическую цепь. Полученная зависимость поверхностного потенциала от результирующего граничного электрического поля (включающего и индуцированное встроенным зарядом) довольно просто трансформирована в соответствующие вольт-фарадные характеристики.

В последнее время значительное внимание исследователей привлекает изучение электрофизических свойств новых полупроводниковых пленок $A^{III}B^V$ с целью возможного их использования в оптоэлектронике [1–3]. В ряде случаев наблюдаемые свойства таких наноразмерных объектов свидетельствуют о значительной аккумуляции электронов на их внешних границах. Так, например, в работе [4] авторами получена зависимость проводимости пленок InN от толщины, которая дает значение электропроводности, существенно отличное от нуля при пролонгации аппроксимационной кривой к нулевой толщине пленки. Этот феномен естественным образом объясняют наличием специфических поверхностных донорных центров, электроны которых коллективизированы, оставаясь прижатыми к поверхности [5]. При этом, однако, остается открытым вопрос о профиле потенциала и форме распределения электронной плотности в слое аккумуляции, знание которых необходимо как для правильной интерпретации результатов холловских и емкостных измерений, так и для анализа положения линий фотолюминесценции. Отмеченная актуальность стимулировала появление работ (см., например, [5–7]), посвященных теоретическим расчетам соответствующих профилей потенциала и электронной концентрации у поверхности. Авторы этих исследований сначала по методу Томаса–Ферми рассчитывают самосогласованный изгиб зон и концентрацию электронов. Затем, убедившись, что полученная при этом приповерхностная потенциальная яма оказалась слишком узкой и глубокой, что выходит за рамки применимости метода Томаса–Ферми, численным анализом уравнения Шредингера ищут дискретные электронные состояния в этой потенциальной

яме, полученной, строго говоря, неадекватным методом. Отмеченная эклектика снижает научную достоверность полученного в [7] результата о существовании всего лишь двух уровней размерного квантования. Кроме того, вызывает сомнения сама возможность использования самосогласованного потенциала в этой задаче с недостаточно большим, на наш взгляд, числом частиц в области формирования локального потенциала. В этой связи нам представляется целесообразным, отказавшись от процедуры самосогласования, чисто квантово рассмотреть задачу аккумуляции на основе известного представления волновых функций связанных электронных состояний соответствующими полубесконечными отрезками функции Эйри. При этом по аналогии с известной классической задачей о силе притяжения пластин заряженного плоского конденсатора следует считать, что электроны притягиваются к границе однородным эффективным электрическим полем $E_{\text{eff}} = (2\pi/\varepsilon)e\sigma$, где σ — поверхностная плотность заряженных центров, ε — диэлектрическая проницаемость, e — заряд электрона. Это поле в 2 раза меньше результирующего (учитывающего вклад и электронного заряда) поля $E = (4\pi/\varepsilon)e\sigma$ на границе пленки. Величину последнего мы будем считать внешним параметром задачи.

В этом половинном электрическом поле $E_{\text{eff}} = E/2$ характерная длина соответствующей задачи Шредингера есть $(\hbar^2/meE)^{1/3}$, а разность энергий ближайших дискретных уровней $\Delta\Phi_{i,j+1}$ равна по модулю

$$\Delta\Phi_{i,j+1} = e \frac{E}{2} \left(\frac{\hbar^2}{meE} \right)^{1/3} (x_i - x_{i+1}), \quad (1)$$

где x_i — положение соответствующих нулей функции Эйри, m — эффективная масса электрона.

[†] E-mail: gergel@mail.cplire.ru

^{††} E-mail: alevteena@gmail.com

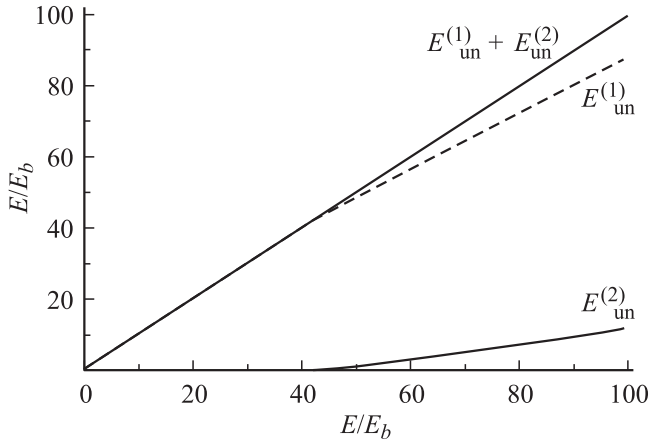


Рис. 1. Компоненты граничного поля, индуцированные зарядами первого и второго уровней размерного квантования.

Поскольку, как известно [8], $x_1 = -2.338$, $x_2 = -4.088$, $x_3 = -5.521$, значения актуальных для нас энергетических зазоров равны:

$$\Delta\Phi_{2,1} = 0.875 \left(\frac{\hbar^2 e^2 E^2}{m} \right)^{1/3},$$

$$\Delta\Phi_{3,2} = 0.717 \left(\frac{\hbar^2 e^2 E^2}{m} \right)^{1/3}. \quad (2)$$

Легко сообразить, что на этой „лестнице“ уровней, отвечающих половинному электрическому полю, нужно разместить электронный заряд $E(\varepsilon/4\pi)$, индуцирующий полное поле. С учетом этого замечания, воспользовавшись известным выражением для двумерной плотности состояний и пренебрегая температурным размытием функции Ферми, можно записать

$$E = 4 \frac{\varphi}{a}, \quad (3)$$

где $a = \hbar^2 \varepsilon / m e^2$ — боровский радиус, а $e\varphi$ — расстояние от уровня Ферми до первого уровня. Уровень Ферми для простоты мы будем считать совпадающим с краем зоны проводимости в глубине пленки.

Простейшая формула (3) справедлива, однако, только для сравнительно малых значений E и φ , когда второй уровень оказывается выше уровня Ферми. Соответствующие неравенства

$$E_{un} < 4 \cdot 0.875 E_{un}^{2/3}, \quad E_{un} < 43, \quad (4)$$

равно как и последующие соотношения, удобно записать в безразмерных переменных $E_{un} = E/E_b$ и $\varphi_{un} = \varphi/\varphi_b$ ($E_b = e/\varepsilon a^2$, $\varphi_b = e/\varepsilon a$).^{1,2} При $E_{un} > 43$, когда продо-

¹ Если считать, что в $\ln N$ $m = 0.1$ и $\varepsilon = 7.3$, боровский радиус $a \approx 3$ нм, $\varphi_b \approx 0.05$ В, $E_b \approx 1.5 \cdot 10^5$ В/см.

² В безразмерных единицах полевая длина $(\hbar^2/m e E)^{1/3}$ переходит в $a E_{un}^{-1/3}$.

жается заполнение первого уровня и начинает заполняться второй, вместо (3) следует записать

$$E_{un} = E_{un}^1 + E_{un}^2 = 4(2\varphi_{un} - 0.875 E_{un}^{2/3}). \quad (5)$$

Отсюда для E_{un}^1 и E_{un}^2 — компонент граничного поля, индуцированных зарядами первого и второго уровня, — получим, исключая φ_{un} :

$$E_{un}^{(1)} = 4\varphi_{un} = \frac{E_{un}}{2} + 1.75 E_{un}^{2/3},$$

$$E_{un}^{(2)} = 4(\varphi_{un} - 0.875 E_{un}^{2/3}) = \frac{E_{un}}{2} - 1.75 E_{un}^{2/3}. \quad (6)$$

Зависимости (6), показывающие относительный вклад заряда первого и второго уровней в формирование результирующего поля E_{un} , приведены на рис. 1.

Как и ранее, мы можем найти верхнее ограничение применимости (5), (6), подставив в (5) условие начала заполнения третьего уровня $\varphi_{un} = (0.875 + 0.717) E_{un}^{2/3}$, что дает

$$E_{un} \leq 4(0.875 + 1.434) E_{un}^{2/3}, \quad E_{un} \leq 800, \quad (7)$$

т.е. нереально высокое ограничение на уровне атомных полей, где, разумеется, предлагаемая модель не работает. С другой стороны, можно констатировать огромную потенциальную емкость двухуровневой ситуации и считать область полей с заполнением третьего уровня экспериментально недостижимой, в частности в методологии вольт-фарадных измерений, широко используемой в физике полупроводников и микроэлектронике.

К сожалению, в текущей литературе мы не нашли экспериментальных работ о вольт-фарадных характеристиках соответствующих тестовых структур и, чтобы в какой-то степени стимулировать их появление, приведем здесь теоретический расчет ожидаемой зависимости интегральной и дифференциальной емкости квантового аккумуляционного слоя от поверхностного потенциала.

Для этого прежде всего надо рассчитать сам поверхностный потенциал, т.е. его отличие от потенциала в толще пленки, выбранного, как обычно, в качестве нулевого. В соответствии с классическим определением разность потенциалов — это работа внешних сил, затрачиваемая на перенесение стороннего единичного заряда из одной точки потенциального рельефа в другую без нарушения расположения реальных заряженных частиц, формирующих этот потенциальный рельеф. Поэтому в рассматриваемой ситуации определение поверхностного потенциала сводится всего лишь к двукратному численному интегрированию уравнения Пуассона с заданной формой плотности заряда в виде нормированных квадратов соответствующих отрезков функции Эйри. В результате вычислений для компонент поверхностного потенциала, обусловленных зарядами на первом и вто-

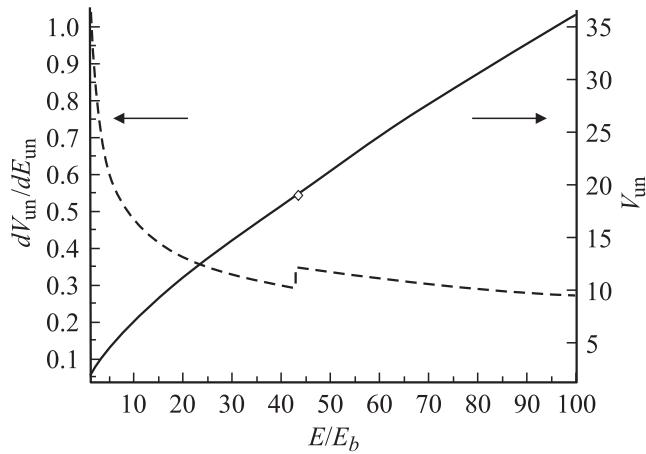


Рис. 2. Зависимости безразмерного поверхностного потенциала V_{un} и его производной dV_{un}/dE_{un} от граничного поля E .

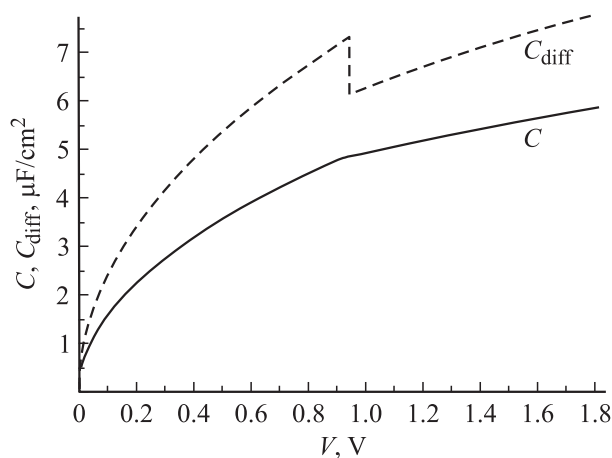


Рис. 3. Вольт-фарадные характеристики полной (C) и дифференциальной (C_{diff}) удельных емкостей.

ром уровней, было получено:

$$V_{un}^{(1)} = 1.55E_{un}^{(1)} \cdot E_{un}^{-1/3},$$

$$V_{un}^{(2)} = 2.69E_{un}^{(2)} \cdot E_{un}^{-1/3}. \quad (8)$$

Здесь первое выражение (при $V_{un}^{(1)} = V_{un}$ и $E_{un}^{(1)} = E_{un}$) описывает связь поверхностных поля и потенциала в области малых полей ($E_{un} < 43$). Для области, где $E_{un} > 43$, комбинируя формулы (6) и (8), получим зависимость

$$V_{un} = 2(1.06E_{un}^{2/3} - E_{un}^{1/3}), \quad (9)$$

которая непрерывно, но не гладко, сливается с выражением $V_{un} = 1.55E_{un}^{2/3}$, при $E_{un} = 43$, как это показано на рис. 2.

Полученные соотношения (8), (9) легко преобразуются в искомые вольт-фарадные характеристики полной (C) и дифференциальной (C_{diff}) удельных емкостей

по известным формулам

$$C = \frac{Q}{V} = \epsilon\epsilon_0 \frac{E_{un}}{V_{un}}, \quad C_{diff} = \epsilon\epsilon_0 \left(\frac{dV_{un}}{dE_{un}} \right)^{-1}. \quad (10)$$

Соответствующие зависимости приведены на рис. 3, где небольшой скачок дифференциальной емкости отвечает началу заполнения второго уровня.

Приведем также на рис. 4, в качестве полезной иллюстрации, один из промежуточных результатов наших вычислений, описывающий пространственное распределение потенциала (изгиб зон) при характерных значениях поверхностного поля $E_{un} = 27$ ($7.4 \cdot 10^6$ В/см) и 64 ($9.6 \cdot 10^6$ В/см). Здесь же отмечены энергии уровней пространственного квантования $e1, e2$.

Отметим также, что применительно к исследованию фотолюминесценции в пленках с электронной аккумуляцией, например InN, наблюдаемое в них существенное длинноволновое смещение пика фотолюминесценции легко объясняется в рамках развитой модели туннелированием неравновесных дырок из объема к поверхности через энергетический барьер приповерхностного потенциала и их последующей излучательной рекомбинацией

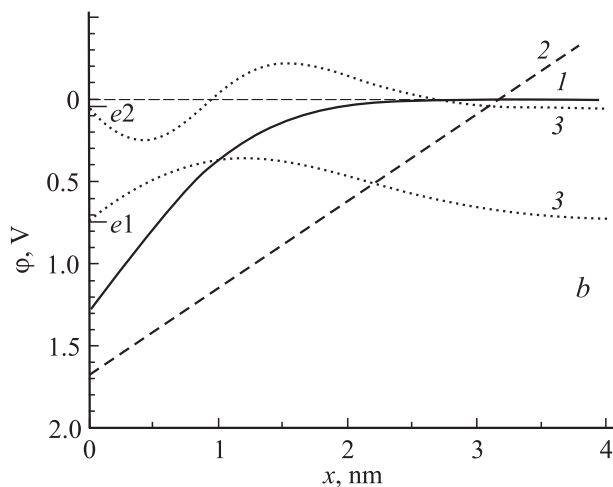
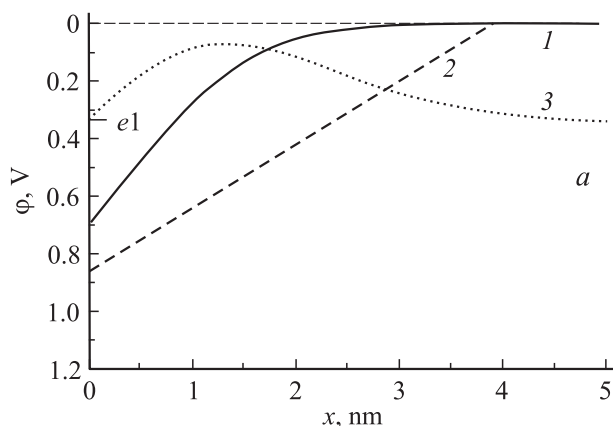


Рис. 4. Типичные распределения результирующего встроенного (1) и эффективного (2) потенциалов в диапазонах малых ($E/E_b < 43$) (a) и больших ($E/E_b > 43$) (b) электрических полей; 3 — форма соответствующих волновых функций.

с электронами аккумуляционного слоя, занимающими состояние первого уровня поперечного квантования с малыми латеральными импульсами. С другой стороны, в рамках модели наблюдаемое смещение пиков от величины 1.9 эВ в объемном материале до 0.7 эВ в наноразмерных пленках InN с аккумуляцией позволяет получить разумную оценку величины поверхностного заряда и соответствующего электрического поля, оказавшегося $\sim 10^7$ В/см.

В заключение сформулируем наши соображения об адекватности чисто квантовой (без самосогласования потенциала) постановки задачи аккумуляции электронов в сильно легированных пленках. Проведенное выше количественное рассмотрение показывает, что практически весь электронный заряд сосредоточен в узком (квантовом) слое толщиной $h \approx 2a(E_b/E)^{1/3}$ с поверхностной плотностью $\sigma = \varepsilon E/4\pi e$. Следовательно, в элементарной ячейке такого пространственного распределения — кубе со стороной h — находится $\sigma h^2 = (1/\pi)(E/E_b)^{1/3}$ штук электронов. Это число остается $\lesssim 1$ во всем актуальном диапазоне граничных электрических полей $E < 10^7$ В/см. Мы полагаем поэтому, что в рассматриваемой задаче было бы серьезной ошибкой использовать самосогласование потенциала, эквивалентного в данной ситуации учету фиктивной энергии кулоновского воздействия электрона самого на себя.

Список литературы

- [1] X.Wang, S.-B. Che, Y. Ishitani, A. Yoshikawa. Appl. Phys. Lett., **91**, 242 111 (2007).
- [2] W. Walukiewicz, J.W. Ager III, K.M. Yu, Z. Liliental-Weber, J. Wu, S.X. Li, R.E. Jones, J.D. Denlinger. J. Phys. D: Appl. Phys., **39**, R83 (2006).
- [3] L. Calakerol, T.D. Veal, H.-K. Jeong, L. Plucinski, A. DeMasi, T. Learmonth, P.-A. Glans, S. Wang, Y. Zhang, L.F.J. Piper, P.H. Jefferson, A. Fedorov, T.-Ch. Chen, T.D. Moustakas, C.F. McConville, K.E. Smith. Phys. Rev. Lett., **97**, 237 601 (2006).
- [4] Hai Lu, W.J. Schaff, L.F. Estman. Appl. Phys. Lett., **82**, 1736 (2003).
- [5] P.D.C. King, T.D. Veal, C.F. McConville. Phys. Rev., **77**, 125 305 (2008).
- [6] A.A. Klochikhin, V.Yu. Davydov, I.Yu. Strashkova, P.N. Brunkov, A.A. Gutkin, M.E. Rudinsky, H.-Y. Chen, S. Gwo. Phys. Status Solidi (RRL), **1** (4), 159 (2007).
- [7] A.A. Klochikhin, V.Yu. Davydov, I.Yu. Strashkova, S. Gwo. Phys. Rev., **76**, 235 325 (2007).
- [8] М. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям* (М., Наука, 1979).

Редактор Л.В. Шаронова

Quantum model of accumulation of electrons on charged boundaries of semiconductor films

V.A. Gergel, A.V. Verhovtseva

Institute of Radio Engineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences,
125009 Moscow, Russia

Abstract A new quantum model of accumulation of electrons on the positively charged boundaries of semiconductor films is proposed. Model uses the known ideas of quantization of the transverse electron motion in a uniform electric field. At the corresponding quasi-discrete states according to the rules of the Fermi statistics electrons are available with the surface density equal to the concentration of donors. At reasonable concentrations all the electrons of the accumulation layer are concentrated mainly on the first level of spatial quantization. Beginning of filling the third level corresponds to super-high built-in fields of the order of atomic (10^8 V/cm). Double integration of Poisson's equation with the electron density in the form of squares of the respective segments of the Airy function is used for calculation of the potential profile. Its boundary value — surface potential — describes the influence of the electron accumulation layer on the external circuit. The resulting dependence of the surface potential on the resulting boundary electric field (including induced by built-in charge) is transformed quite simply into the corresponding capacitance–voltage characteristics.