

КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КВАНТОВЫХ НИТИХ И ПОРИСТОМ КРЕМНИИ

© Н.С. Аверкиев, А.Я. Шик

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 1 февраля 1995 г. Принята к печати 5 февраля 1995 г.)

Теоретически рассмотрено распределение потенциала и концентрации неравновесных носителей в тонкой нити с точечными или массивными металлическими контактами приложении между ними переменного напряжения. Полученные результаты использованы для вычисления емкости контакта C . В отличие от контакта к массивному полупроводнику, указанная емкость в бесконечно длинной нити обладает частотной дисперсией при сколь угодно малых частотах ω , испытывая расходимость вида $C \sim \omega^{-1/2}$. При конечной длине нити емкость на низких частотах перестает зависеть от частоты, определяясь геометрическими размерами нити и контактов к ней. Полученные результаты применены для расчета емкости контакта к пористому кремнию, представляемому в виде совокупности тонких кремниевых нитей.

1. Введение

Эффекты экранирования в низкоразмерных электронных системах носят качественно иной характер, нежели в массивных проводниках. Объяснение этому хорошо известно. Заряды в квантовых ямах и квантовых нитях создают электрическое поле во всем пространстве, окружающем систему. В то же время носители, экранирующие это поле, ограничены в своем движении одной плоскостью или линией, что резко снижает эффективность экранирования по сравнению с трехмерным случаем.

Специфика экранирования в низкоразмерных системах проявляется, в частности, в свойствах контактов к таким системам. Они имеют существенно иную емкость с иной частотной дисперсией по сравнению с контактами к массивным полупроводникам (например, диодами Шоттки). Емкость контактов к двумерному электронному газу теоретически изучалась в [1,2]. В данной работе исследуется распределение зарядов и емкостные эффекты в квазидимерных системах — полупроводниковых нитях, — а также обсуждается возможность приложения этих результатов к задаче о контакте к пористому кремнию.

2. Основные уравнения

Рассмотрим тонкую проводящую цилиндрическую нить радиуса a и длины L , помещенную в среду с диэлектрической проницаемостью ϵ . Равновесная концентрация электронов на единицу длины нити равна ν_0 . В точках $z = 0$ и $z = L$ нить снабжена контактами, характер которых будет предметом обсуждения в дальнейшем. Пусть между контактами приложено переменное напряжение $V_1 \sim \exp(i\omega t)$ (в дальнейшем все величины, осциллирующие с частотой ω , будем снабжать индексом 1). Определим как меняется вдоль нити возникающая неравновесная добавка к концентрации $\nu_1(z)$.

Для нахождения $\nu_1(z)$ будем использовать уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \nu_1}{\partial t} + \frac{\partial j_1}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

где поток электронов

$$j_1 = -D \frac{\partial \nu_1}{\partial z} - \mu \nu_0 \frac{\partial \phi_1}{\partial z}. \quad (2)$$

Здесь D и μ — коэффициент диффузии и подвижность электронов в нити.

Электрический потенциал $\phi_1(\rho, z)$ является функцией как z , так и расстояния до оси нити ρ . Однако если радиус нити достаточно мал, то распределение ϕ_1 по ее сечению несущественно и в (2) можно представить его значение на поверхности нити $\phi_1(a, z)$.

Величины D и μ связаны между собой соотношением Эйнштейна

$$D = \frac{\mu \nu_0}{e} \frac{d\zeta}{d\nu_0}, \quad (3)$$

где ζ — уровень химического потенциала. Если считать $\nu_0 = \text{const}(z)$ (законность этого предположения будет обсуждаться далее), то уравнения (1), (2) можно записать в виде

$$i\omega \nu_1 = D \left\{ \frac{\partial^2 \nu_1}{\partial z^2} + e \left(\frac{d\nu_0}{d\zeta} \right) \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} (a, z) \right\}. \quad (4)$$

Вторым уравнением для определения неизвестных величин $\phi_1(a, z)$ и $\nu_1(z)$ является уравнение Лапласа $\Delta \phi_1 = 0$ в пространстве, окружающем нить. Если l^* — характерная длина изменения концентрации вдоль нити (выражение для которой будет получено позже) существенно превосходит a , то $\partial \phi_1 / \partial \rho(a, z) = 2e\nu_1(z)/\epsilon a$ и общее решение уравнения Лапласа с этим граничным условием имеет вид

$$\phi_1(\rho, z) = -\frac{4e}{\pi \epsilon a} \int_0^\infty \frac{K_0(\lambda \rho)}{K_1(\lambda a)} \nu(\lambda) \sin(\lambda z) \frac{d\lambda}{\lambda} + Az + B, \quad (5)$$

где $\nu(\lambda)$ — фурье-образ электронной плотности

$$\nu(\lambda) = \int_0^\infty \nu_1(z) \sin(\lambda z) dz, \quad (6)$$

K_0 и K_1 — функции Бесселя мнимого аргумента, а A и B — произвольные постоянные.

Приближенное решение (5) при $\rho = a$ может быть записано в виде

$$\phi_1(a, z) \simeq \frac{2e\nu_1(z)}{\epsilon} \ln \frac{l^*}{a} + Az + B \quad (7)$$

(см. также [3]). После подстановки в (4) это дает

$$i\omega\nu_1 = D^* \frac{\partial^2 \nu_1}{\partial z^2}, \quad (8)$$

где

$$D^* = D \left[1 + \frac{2e^2}{\epsilon} \left(\frac{d\nu_0}{d\zeta} \right) \ln \frac{l^*}{a} \right]. \quad (9)$$

Таким образом, процессы релаксации заряда в нитях обладают интересной особенностью, уже отмечавшейся в [3]: они происходят по диффузионному закону, а процессы дрейфа лишь несколько изменяют эффективный коэффициент диффузии. Это существенно отличается от трехмерного и двумерного случаев, где релаксация заряда определяется в основном дрейфовыми процессами.

Из (8) видно, что роль эффективной длины, на которую переменное электрическое поле проникает в нить, играет комплексная величина

$$l = (1 - i)\sqrt{D^*/2\omega}. \quad (10)$$

Заметим, что в наших расчетах мы опирались на формулу (7), спрятавшую лишь при $l \gg a$. Поэтому изложенная теория применима лишь для сравнительно низких частот $\omega \ll D^*/a^2$. При нарушении этого условия потенциал становится неоднородным по сечению нити и электрическое поле будет проникать в нить на расстояние порядка ее радиуса a .

Теперь используем полученные выражения для расчета емкости нити.

3. Емкость одиночной нити

Для лучшего понимания физики явлений начнем с гипотетического случая, когда оба контакта к нити являются точечными. Тогда они не могут являться источниками однородного электрического поля, и в формуле (7) $A = 0$. Распределение потенциала и концентрации в нити, определяемое из (8), при одинаковых контактах будет антисимметричным:

$$\phi_1(a, z) \simeq \frac{2e\nu_1(z)}{\epsilon} \ln \frac{l^*}{a} = \frac{V_1 \operatorname{sh} \frac{z-L/2}{l}}{\operatorname{sh} \frac{L}{2l}}. \quad (11)$$

С помощью полученного распределения легко вычисляется ток через контакт $j_1 = eD^*(\partial\nu_1/\partial z)|_{x=L}$ и емкость $C = j_1/(i\omega V_1)$. Ответ имеет вид

$$C = \frac{\epsilon l}{4 \ln(l^*/a)} \operatorname{cth} \frac{L}{2l}. \quad (12)$$

При $L \gg |l|$ роль характерной длины l^* играет, очевидно, $|l|$, и емкость имеет одинаковые вещественную и мнимую части:

$$\operatorname{Re} C = \operatorname{Im} C = \frac{\epsilon}{2} \sqrt{\frac{D^*}{\omega}} \left(\ln \frac{D^*}{a^2 \omega} \right)^{-1}. \quad (13)$$

При $L \ll |l|$ имеем $l^* \simeq L$ и доминирующим членом в выражении для C является чисто мнимый, отвечающий обычной омической проводимости нити, а вещественная добавка равна $\epsilon L / 2 \ln(L/a)$ в согласии с известной формулой для емкости сильно вытянутого металлического эллипсоида [4].

Полученный результат (13) наглядно демонстрирует качественную зависимость электростатических эффектов от размерности задачи. В трехмерном случае частотная дисперсия емкости проявляется только при достаточно высоких частотах (обычно превышающих обратное время максвелловской релаксации τ_M^{-1}). При $\omega \rightarrow 0$ емкость стремится к конечной величине — статической емкости контакта. В низкоразмерных системах экранирование слабее и заряд в приконтактной области столь медленно убывает с расстоянием, что в статическом случае его полная величина, а следовательно, и емкость контакта расходятся логарифмическим образом в двумерном случае и степенным образом в одномерном. Поэтому для одиночной нити частотная дисперсия емкости существует вплоть до малых частот, обусловливая конечную величину емкости, пропорциональную $\ln \omega$ в двумерном случае [2] и $\omega^{-1/2}$ (13) — в одномерном. Последнее утверждение справедливо, строго говоря, лишь для бесконечной нити. Если ее длина L конечна, то, как следует из наших формул, корневая частотная дисперсия емкости (13) справедлива при $\omega > D^*/L^2$, а при меньших частотах емкость начинает определяться геометрическими факторами.

Как уже говорилось, предположение о точечном характере контактов носит явно идеализированный характер. Реальные контакты могут иметь макроскопические размеры b , превосходящие не только радиус нити a , но и характерную длину экранирования l^* , в некоторых случаях — даже и длину нити L . При этом на контакте могут возникать заряды, изменяющие распределение поля в нити. Посмотрим, как это обстоятельство скажется на емкости рассматриваемой системы, рассмотрев предельный случай очень больших контактов $b > L$, которые при этом можно считать металлическими плоскостями.

Если контакт при $z = 0$ является массивным, а при $z = L$ — по-прежнему точечным, то в нити концентрируются заряды лишь одного знака, а компенсирующий заряд сосредотачивается на плоском контакте, что в свою очередь эквивалентно изображению нити при $-L < z < 0$. В результате мы приходим к уже рассмотренной картине, где в качестве длины нити выступает не L , а $2L$. Таким образом, изменение размеров одного из контактов от предельно малого до

предельно большого не приведет к качественному изменению емкости. Поэтому очевидно, что формулу (12) можно качественно применять и для контактов промежуточных размеров $\sqrt{D^*/\omega} < b < L$, где непосредственный расчет емкости весьма затруднителен.

Пусть, наконец, массивными являются оба контакта. При этом они выступают в роли обкладок плоского конденсатора, создавая вокруг нити и внутри нее однородное поле с $A = V_1/L$. В результате решение, отвечающее $\nu_1(z) = 0$, удовлетворяет необходимым граничным условиям для потенциала. Следовательно, в данном случае перезарядка самой нити несущественна и емкость системы определяется взаимной емкостью контактов, а активная часть тока — статической проводимостью нити. В этом случае частотная дисперсия емкости (13), характерная для одномерного случая, не должна наблюдаться.

В ходе вычислений мы полагали равновесную концентрацию электронов ν_0 не меняющейся по длине нити. Это справедливо при отсутствии разности потенциалов между металлом и нитью за счет контактного напряжения или приложенного смещения. При наличии такой разности в нити существует потенциальный профиль $\phi_0(a, z)$, модулирующий ν_0 . Некоторые вопросы статического экранирования в нитях обсуждались в [1], где было показано, что $\phi_0(a, z)$ меняется вдоль нити очень медленно, по логарифмическому закону. Такой потенциальный профиль не должен изменить полученные выше результаты. Если $l < L$, то на фоне экспоненциальной зависимости $\nu_1(z)$ (формула (11)) логарифмический профиль равновесной концентрации действительно несуществен. В случае $l > L$ емкость определяется геометрией системы и истинный профиль концентрации и подавно несуществен.

Сказанное выше означает, что постоянное смещение, приложенное к контакту, не приводит к изменению емкости. Отчетливо прослеживается ослабление вольт-фарадных зависимостей при уменьшении размерности задачи. В трехмерном контакте Шоттки емкость зависит от напряжения смещения корневым образом, в двумерном случае эта зависимость логарифмическая (см. [1]), а в одномерном — емкость практически не зависит от напряжения смещения.

4. Экранирование системой нитей

Рассмотрев эффекты экранирования в одиночной нити, перейдем к системе параллельных нитей с концентрацией N на единицу площади. Пусть нити ориентированы вдоль оси z и занимают область $z > 0$, а плоскость $z = 0$ представляет собой металлический контакт.¹ Если плотность неравновесных носителей спадает вдоль оси z по закону $\nu_1(z)$, то потенциал нити

$$\phi_1(a, z) = \frac{2e\nu_1(z)}{\epsilon} \ln \frac{l^*}{a} + \frac{e}{\epsilon} \sum_i \left[\int_0^\infty \frac{\nu(z') dz'}{\sqrt{\rho_i^2 + (z - z')^2}} - \int_0^\infty \frac{\nu(z') dz'}{\sqrt{\rho_i^2 + (z + z')^2}} \right]. \quad (14)$$

¹ Предполагается, что второй контакт находится достаточно далеко, на расстоянии, значительно большем определенной далее длины экранирования.

Здесь первый член представляет собой потенциал самой нити, написанной в согласии с (7), второй член — потенциал остальных нитей, лежащих в точках ρ_i плоскости xy , а третий — их изображения в металлическом электроде.

Суммирование по нитям можно заменить интегрированием по $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ с весовым множителем $g(\rho)$, представляющим функцию распределения расстояния между нитями. Если расположение носит пуассоновский характер, то

$$g(\rho)d\rho = 2\pi N \rho [1 - \exp(-\pi N \rho^2)] d\rho. \quad (15)$$

Рассмотрим более подробно статическое экранирование. При этом ν_1 и ϕ_1 связаны функцией распределения Ферми. Для малых возмущений эту связь можно линеаризовать: $\nu_1(z) = -e(d\nu_0/d\zeta)\phi_1(a, z)$, где ζ — уровень химического потенциала, а производная берется при равновесной концентрации. Если перейти к безразмерным координатам $\xi = \sqrt{\pi N}z$, то уравнение (14) с функцией распределения (15) после интегрирования по ρ принимает вид

$$-2r_s^2 \nu_1(\xi) = \ln \frac{l^*}{a} \nu_1(\xi) + \int_0^\infty \nu_1(\xi') \left(\xi + \xi' - |\xi - \xi'| - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left\{ \exp [(\xi - \xi')^2] \times \right. \right. \\ \left. \left. \times [1 - \Phi(|\xi - \xi'|)] - \exp [(\xi + \xi')^2] [1 - \Phi(\xi + \xi')] \right\} d\xi' + C, \quad (16) \right)$$

где постоянная C , определяющая начало отсчета потенциала, выбирается из условия обращения правой части в нуль при $\xi \rightarrow \infty$, а $\Phi(x)$ — интеграл вероятности. Величина

$$r_s = \left[\frac{4e^2}{\epsilon} \left(\frac{d\nu_0}{d\zeta} \right) \right]^{-1/2}. \quad (17)$$

Если ввести среднюю по объему трехмерную концентрацию носителей νN , то при переходе к размерным величинам r_s сводится к обычному радиусу экранирования в массивном образце.

Уравнение (16) определяет распределение заряда, связанное с экранировкой в системе нитей. Проанализируем его в пределе больших и малых r_s . При $r_s \ll 1$ левую часть уравнения можно положить равной нулю. При этом никаких параметров, кроме логарифмического фактора $\ln(l^*/a)$, в задаче не содержится. Следовательно, характерным расстоянием, на котором меняется концентрация, т. е. длиной экранирования, с логарифмической точностью является среднее расстояние между нитями $N^{-1/2}$ (именно эту величину и следует ставить в качестве l^* в аргумент логарифма). Это достаточно понятно, если учесть, что экранирование в одиночной нити мало существенно и становится достаточно эффективным лишь за счет зарядов соседних нитей.

В обратном пределе $r_s \gg 1$ следует опустить первый член в правой части (16). Можно показать, что при этом последние члены, содержащие экспоненциальные множители, также малы, и решение имеет

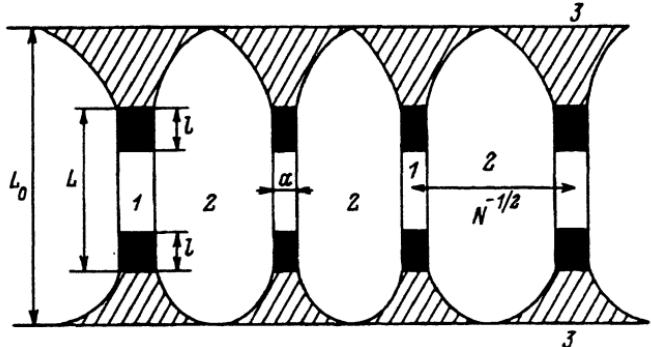
вид $\nu_1(\xi) \sim \exp(-\xi/r_s)$. Это обычное трехмерное экранирование, естественно появляющееся в случае, когда пространственный масштаб изменения заряда значительно превосходит расстояние между нитями и возможно провести усреднение по нитям.

Полученные результаты могут быть обобщены и на нестационарный случай. В частности, уравнение (4) можно приближенно записать в виде $i\omega l^2 \nu_1(z)/D \simeq \nu_1(z) + e(d\nu_0/d\zeta)\phi_1(a, z)$, откуда следует, что в нестационарном случае левая часть (16) приобретает дополнительный множитель $(1 + i\omega(l^*)^2/D)$, где l^* — характерная длина изменения потенциала и концентрации. Поэтому, чтобы вывод $l^* \simeq N^{-1/2}$ оставался в силе, необходимо, чтобы наряду с условием $r_s \ll 1$ выполнялось также требование $\omega r_s^2/(DN) \ll 1$. Так как при $r_s \ll 1$ для характерной длины, описываемой формулой (10), может быть написана оценка $|l| \sim (D/\omega)^{1/2}/r_s$, упомянутое ограничение эквивалентно требованию $N|l|^2 \gg 1$.

Строго говоря, формула (16) справедлива лишь при расстояниях между нитями, значительно превосходящих их радиус, поскольку при написании второго и третьего членов в (14) все нити, окружающие данную, считались бесконечно тонкими. Тем не менее есть все основания считать, что полученные результаты останутся справедливыми по крайней мере качественно и при $Na^2 \sim 1$.

5. Емкость контакта к пористому кремнию

Применим теперь результаты разд. 3 и 4 для решения вопроса о емкости контакта к пористому кремнию и ее частотной зависимости. Как известно, это вещество можно рассматривать как совокупность кусков тонких кремниевых нитей. Будем для простоты полагать, что все эти нити параллельны между собой, так что пористый кремний с металлическими контактами имеет вид, схематически показанный на рисунке. Мы ограничимся случаем, когда расстояние между контактами L_0 превосходит характерную длину затухания высокочастотного электрического поля, обсуждаемую далее, поскольку в обратном пределе емкость определяется геометрическими факторами и электронные свойства нитей вообще не играют роли. В этом случае емкость



Модель контакта к пористому кремнию. Заштрихованы металлические контакты и сильно легированные, «металлические» концы нитей. Заряд, индуцированный переменным напряжением V_1 , сосредоточен в зачерненных областях. 1 — кремниевые нити, 2 — поры, 3 — контакты.

системы зависит от соотношения между характерными длинами, описывающими пористый кремний. Это диаметр нитей a , среднее расстояние между ними $N^{-1/2}$, статическая трехмерная длина экранирования r_s и эффективная длина диффузии l , описываемая формулой (10). При этом решающую роль играет соотношение между l и $N^{-1/2}$.

Случай $lN^{-1/2} \ll 1$ соответствует одномерной ситуации, когда взаимодействие между нитями несущественно, поле проникает в каждую нить в соответствии с закономерностями, описанными в разд. 3, и удельная емкость системы будет равна емкости отдельной нити, умноженной на N . Прежде чем использовать формулы указанного раздела, следует осознать, какая из рассмотренных там моделей контакта наиболее адекватно применима для случая пористого кремния. Если по обе стороны нитей располагается массивный металл, то, на первый взгляд, из рассуждений разд. 3 следует, что нити создают лишь диссиликативные потери и не вносят вклад в вещественную часть емкости. Однако зачастую части нитей, примыкающие к металлу, могут оказаться сильно легированными, что эквивалентно металлизации части нити, в результате чего эффективная длина нити L будет меньше расстояния между массивными контактами L_0 (см. рисунок). В результате коэффициент A в выражениях (5) и (7) равняется V_1/L_0 , в то время как напряжение V_1 должно упасть на длине нити L . Это приведет к формуле, аналогичной (13), но с дополнительным множителем $(1 - L/L_0)$:

$$C_s = \frac{(1-i)(L_0 - L)}{2\sqrt{2}L_0} N \sqrt{\frac{D^*}{\omega}} \left(\ln \frac{D^*}{a^2 \omega} \right)^{-1}, \quad (18)$$

где индекс s указывает на то, что в отличие от (13) речь идет об удельной емкости на единицу площади. Диэлектрическая проницаемость среды, окружающей нить, ϵ , в формуле опущена, поскольку для простого кремния она равна единице.

Заметим, что для применения использованной формулы для емкости необходимо наряду с условием $l \ll N^{-1/2}$ выполнение требования $l \gg a$, поскольку только в этом случае решение уравнения Лапласа дается формулами (5), (7). Следовательно, наш подход применим только к кремнию с очень высокой степенью пористости, где $Na^2 \ll 1$. Вместе с тем наличие разрывов в нитях не играет существенной роли, поскольку при $l < L$ ток не течет по нити от одного контакта до другого, а проникает в нить лишь на расстояние порядка l . Непараллельность нитей также не должна существенно сказаться на ответе.

Оценим величину емкости для одной нити из пористого кремния. За отсутствием иной информации возьмем в качестве эффективного коэффициента диффузии величину $D^* \approx 10 \text{ см}^2/\text{с}$, характерную для кристаллического кремния. Тогда при $\omega = 10^8 \text{ с}^{-1}$, согласно (13), $|C| \sim 10^{-5} \text{ пФ}$. Это означает, что при числе нитей на площадке в 1 мм^2 , равном примерно 10^9 , емкость структуры из пористого кремния составит приблизительно 10^4 пФ . Такое значение емкости может быть несколько завышено из-за неопределенности в величине D^* .

Рассмотренный случай отвечает ситуации достаточно высоких частот $\omega > D^* N$. В обратном пределе низких частот ответ зависит от соотношения между трехмерной длиной экранирования r_s и расстоя-

нием между нитями $N^{-1/2}$. При $Nr_s^2 < 1$ в согласии с результатами разд. 4 эффективная глубина проникновения поля $N^{-1/2}$ и $C_s \sim \tilde{\epsilon}\sqrt{N}$. Если же $Nr_s^2 > 1$, то система ведет себя как эффективно-трехмерная и $C_s \sim \tilde{\epsilon}/r_s$. Здесь $\tilde{\epsilon}$ — средняя по объему пористого кремния диэлектрическая проницаемость.

Таким образом, можно ожидать, что для пористого кремния (во всяком случае при достаточно высокой пористости) может иметься интервал частот с достаточно сильной частотной дисперсией емкости (18). При меньших частотах емкость выходит на постоянное значение, определяемое эффективной длиной экранирования в системе нитей (см. разд. 4) или при малой длине нитей геометрическими факторами (длина нити, расстояние между контактами).

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 93-02-15466 и 94-02-06046-а).

Список литературы

- [1] С.Г. Петросян, А.Я. Шик. ЖЭТФ, **96**, 2229 (1989).
- [2] A. Shik. J. Phys.: Condens. Matter., **4**, L335 (1992).
- [3] М.И. Дьяконов, А.С. Фурман. ЖЭТФ, **92**, 1012 (1987).
- [4] В.В. Батыгин, И.Н. Топтыгин. Сборник задач по электродинамике (М., Физматгиз. 1962).

Редактор Т.А. Полянская

Contact phenomena in quantum wires and porous silicon

N.S. Averkiev, A.Y. Shik

Ioffe Physical-Technical Institute, 194021 St.-Petersburg, Russia

The distributions of potential and of non-equilibrium carrier concentration caused by applied AC voltage in a thin wire with point or bulk metal contacts have been calculated. The results have been used to calculate the contact capacity C . Contrary to the contact with a bulk semiconductor, this capacity in an infinitely long wire has a frequency dispersion even at arbitrary low frequencies ω having a divergency $C \sim \omega^{-1/2}$. For a finite wire length, C at low frequencies becomes frequency-independent with the value determined by geometry of a wire and contacts. The results obtained have been applied to calculation of the contact with porous silicon considered as an array of thin silicon wires.