

ЕСТЕСТВЕННЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ ПОТЕНЦИАЛА У ПОВЕРХНОСТИ ПРИМЕСНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

© В.Б.Бондаренко, Ю.А.Кудинов, С.Е.Ершов, В.В.Кораблев

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 24 июля 1995 г. Принята к печати 22 января 1996 г.)

Построена модель приповерхностной области изгиба зон полупроводника, учитывающая дискретность заряда легирующей примеси и его случайное распределение. Произведен расчет электростатического поля и потенциала на поверхности. Показано, что локальные поверхностные электрические поля могут достигать величин на порядок выше, чем величина поля в одномерной модели изгиба зон. В случае, когда изгиб поддерживается зоной делокализованных поверхностных состояний, средние флуктуации потенциала на поверхности не превышают kT при комнатной температуре, а в случае дискретных поверхностных состояний имеют значения порядка величины изгиба зон.

Основой традиционной модели области пространственного заряда (ОПЗ) полупроводника является аппроксимация потенциала дискретных ионизованных атомов примеси, формирующих пространственный заряд, однородно заряженным «желе» [1]. При этом вместо уравнения $\Delta\phi = -(4\pi e/\epsilon)\sum\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ решается его одномерный аналог $(d^2/dz^2)\phi = -4\pi eN_d/\epsilon$ с константой в правой части, приводящий к хорошо известной картине изгиба зон (рис. 1). Считается, что дискретность заряда примеси не влияет на потенциальный рельеф ОПЗ и она лишь иногда учитывается введением соответствующего канала рассеяния при описании процессов переноса.

Подобное макроскопическое описание ОПЗ в пренебрежении внутренней структурой может быть безусловно оправдано, если характерная макроскопическая длина d (протяженность ОПЗ) многократно превосходит масштаб $\langle d_i \rangle$, характеризующий микроскопическую структуру (среднее расстояние между примесными атомами). Если произвести оценку для концентрации легирующей примеси $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при изгибе зон $e\phi_0 = 0.25 \text{ эВ}$ по известной формуле

$$d = (\epsilon\phi_0/2\pi eN_d)^{1/2}, \quad (1)$$

где $\epsilon \simeq 10$ — диэлектрическая проницаемость полупроводника, то получится, что глубина обеднения практически равна среднему расстоянию между атомами примеси. Другими словами, в объеме d^3 в ОПЗ

находится в среднем 1–2 атома примеси, так что усреднения по большому количеству атомов не происходит.

Отношение величин d и $\langle d_i \rangle = N_d^{-1/3}$ пропорционально корню шестой степени из концентрации легирующей примеси. Таким образом, изменение концентрации примеси на 2 порядка приведет лишь к двукратному изменению отношения $d/\langle d_i \rangle$. Столь слабая зависимость позволяет усомниться в адекватности одномерной модели изгиба зон во всем практически важном диапазоне уровня легирования $10^{16} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Из сказанного следует цель проведенной работы — оценить, насколько велики те неоднородности полей и потенциалов в ОПЗ, которые связаны с дискретностью и хаотическим распределением заряда легирующей примеси и которые игнорируются одномерной моделью.

Флуктуации потенциала в ОПЗ полупроводника неоднократно исследовались ранее. Например, в работах [2–4] рассматривались неоднородности рельефа границы раздела полупроводник–диэлектрик в МДП структурах, обусловленных встроенными зарядами в диэлектрике.

В данной же работе предлагается рассмотреть естественные, характерные для ОПЗ любого легированного полупроводника неоднородности потенциала, связанные с дискретностью заряда примеси и не зависящие от особенностей приготовления поверхности или границы раздела.

Строго говоря, поле и потенциал на поверхности формируются всем ансамблем зарядов, но заряженная примесь, находящаяся за пределами ОПЗ, эффективно экранируется свободными подвижными носителями (электронами или дырками). Примем модель, в которой поле и потенциал в приповерхностной области формируется только теми зарядами, которые находятся в районе изгиба зон. Поскольку поле в области изгиба зон формируется с одной стороны заряженной примесью, а с другой — зарядом, накопленным на поверхностных состояниях, степень неоднородностей полей и потенциалов может зависеть от структуры поверхностных состояний. Нами был произведен расчет поля и потенциала на поверхности примесного полупроводника в двух случаях: собственных делокализованных (непрерывных) и примесных (дискретных) поверхностных состояний. Для определенности была рассмотрена приповерхностная область донорного GaAs.

На рис. 1 представлена принятая модель непрерывных поверхностных состояний: две зоны, разделенные энергией 0.9 эВ в запрещенной зоне, с полной плотностью поверхностных состояний $D = 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$. Будем полагать эту величину постоянной и одинаковой для обеих поверхностных зон. Энергетический размер поверхностных зон $eu_0 = 1.0 \text{ эВ}$. Расчет проводился для концентрации доноров $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, что соответствует изгибу зон $e\phi_0 = 0.3 \text{ эВ}$ в одномерной модели и $d/\langle d_i \rangle \simeq 3$.

Если считать $D = \infty$, т. е. поверхность представляет собой идеальный проводник, то поверхностный потенциал равен константе, а поле E_0 можно подсчитать исходя из метода электростатических изображений. Электрическое поле однозначно связано с поверхностной плотностью заряда σ . А для того чтобы создать необходимую σ , нужно заполнить часть свободных поверхностных состояний. Значит, уровень Ферми

должен занимать соответствующее положение по отношению к дну поверхностной зоны проводимости. Фактически это означает, что при конечных плотностях поверхностных состояний требуется исследовать «неидеальность» изображения.

Интегральный аналог дифференциального уравнения Пуассона [5]

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')dV'}{\varepsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2)$$

определяет потенциал в точке \mathbf{r} , созданный распределенными в объеме V' зарядами, плотностью $\rho(\mathbf{r}')$. В данном случае $\rho(\mathbf{r}')$ имеет две составляющие:

$$\rho(\mathbf{r}') = e \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{r}'_{\alpha}) + \sigma(x', y') \delta(z'), \quad (3)$$

где \mathbf{r}'_{α} — точки расположения точечных зарядов, $\sigma(x', y')$ — поверхностная плотность заряда. В соотношении (3) первое слагаемое описывает заряженную примесь, второе — поверхность. Подстановка (3) в (2) приводит к результату

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \frac{e}{\varepsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{\alpha}|} + \int \frac{\sigma(x', y')dS'}{\varepsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4)$$

С учетом того что поверхность нейтральна, когда верхняя зона поверхностных состояний свободна, а нижняя — полностью заполнена, поверхностная плотность заряда выражается формулой

$$D \left[\int_{E_{sc}}^{E_{sc} + e u_0} f(E) dE - \int_{E_{sv} - e u_0}^{E_{sv}} [1 - f(E)] dE \right] = \sigma, \quad (5)$$

где D — плотность поверхностных состояний, E_{sc} и E_{sv} — положения дна дырочной зоны и потолка акцепторной соответственно, $e u_0$ — энергетический размер поверхностных зон, $f(E)$ — функция распределения Ферми-Дирака.

Для донорного полупроводника можно считать, что

$$\int_{E_{sv} - e u_0}^{E_{sv}} [1 - f(E)] dE \approx 0. \quad (6)$$

В результате интегрирования (5) с учетом (6) получаем

$$\sigma(x, y) = D \left(e u_0 + kT \ln \frac{1 + \exp[e\phi(x, y)/kT]}{1 + \exp\{[e\phi(x, y) + e u_0]/kT\}} \right), \quad (7)$$

где величина $e\phi = E_{sc} - E_f$ фактически и определяет неоднородность потенциала на поверхности. Теперь возможно осуществление самосогласованной процедуры для вычисления $\phi(x, y)$ на ЭВМ: уравнение (4)

определяет потенциал через величину поверхностной плотности заряда, которая в свою очередь (соотношение (7)) зависит от потенциала на поверхности.

Существует другая возможность вычисления поверхностного потенциала — без самосогласования. Будем считать, что заряженные доноры формируют «идеальные» изображения, но теперь будем вычислять не потенциал, который на поверхности есть константа, а напряженность электрического поля. Ясно, что в этом случае поле на поверхности будет иметь только нормальную составляющую и его можно вычислить непосредственным алгебраическим суммированием полей диполей:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\varepsilon} \sum_m \sum_n \frac{p_{mn}}{[(x - x_{mn})^2 + (y - y_{mn})^2 + (p_{mn}/2e)^2]^{3/2}}, \quad (8)$$

где $p_{mn} = ed_{mn}$ — дипольный момент; $m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. При вычислении \mathcal{E} на ЭВМ величины x_{mn}, y_{mn}, p_{mn} (координаты заряженных доноров) задаются генератором случайных чисел. Поле на поверхности однозначно определит поверхностную плотность заряда

$$\sigma(x, y) = \varepsilon \mathcal{E}(x, y) / 4\pi, \quad (9)$$

а уравнение (7) поставит в соответствие данной $\sigma(x, y)$ значение потенциала $\phi(x, y)$ на поверхности:

$$\phi(x, y) = \frac{kT}{e} \ln \frac{1 - \exp\{[\sigma(x, y) - Deu_0]/DkT\}}{\exp[\sigma(x, y)/DkT] - 1}. \quad (10)$$

Расчет показал, что даже при наличии близко лежащего к поверхности иона отклонение этого «нулевого» приближения потенциала от самосогласованного не превышает 20%. Таким образом, показана адекватность описания флуктуаций потенциала на проводящей поверхности при конечной плотности поверхностных состояний через вычисление в методе изображений напряженности поля на поверхности. Обработка полученных зависимостей поверхностного поля \mathcal{E} и потенциала U от координаты вдоль поверхности производилась путем разбиения поверхности на элементарные площадки и прямым перебором определялось количество площадок, имеющих заданный потенциал (или поле) в диапазоне от U (или \mathcal{E}) до $U + \Delta U$ (или $\mathcal{E} + \Delta \mathcal{E}$). Тем самым определялись доли поверхности $\Delta S/S$, «занятые» одним и тем же потенциалом (полем), как функция от потенциала (поля): $\Delta S/\Delta U(U)$ ($\Delta S/\Delta \mathcal{E}(\mathcal{E})$). Полученные результаты (рис. 2, 3) указывают на значительные отклонения полей и потенциалов в приповерхностной области от одномерной модели. Величины $\Delta S/\Delta U(U)$ и $\Delta S/\Delta \mathcal{E}(\mathcal{E})$ в идеале (модель «желе») должны представлять собой δ -функции. Уширение этих зависимостей говорит о неоднородности поля и потенциала. Ширина на полувысоте $\Delta S/\Delta U(U)$ составляет порядка 15 мэВ. Эту величину можно принять за среднюю амплитуду колебаний потенциала на поверхности примесного полупроводника в случае непрерывных делокализованных приповерхностных состояний.

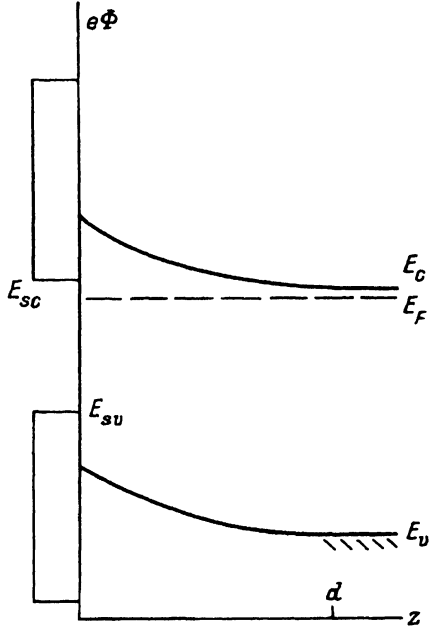


Рис. 1. Энергетическая диаграмма области изгиба зон в одномерной модели. Показано использованное в работе энергетическое положение зон собственных делокализованных поверхностных состояний.

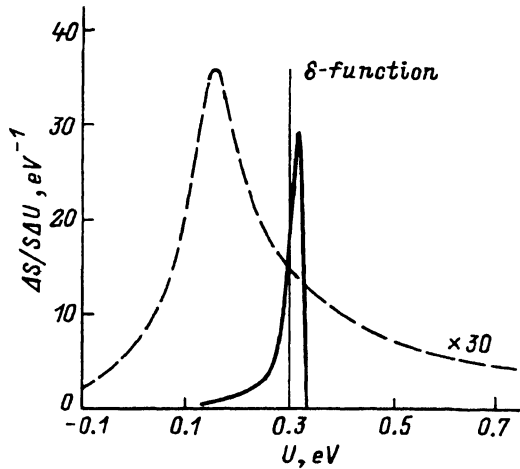


Рис. 2. Плотность распределения потенциала на поверхности полупроводника: модель собственных делокализованных поверхностных состояний (сплошная кривая); модель примесных поверхностных состояний (штриховая кривая).

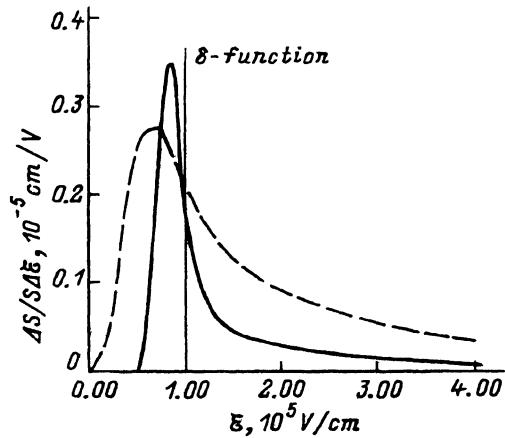


Рис. 3. Плотность распределения напряженности поля на поверхности полупроводника: модель собственных делокализованных поверхностных состояний (сплошная кривая); модель дискретных примесных поверхностных состояний (штриховая кривая).

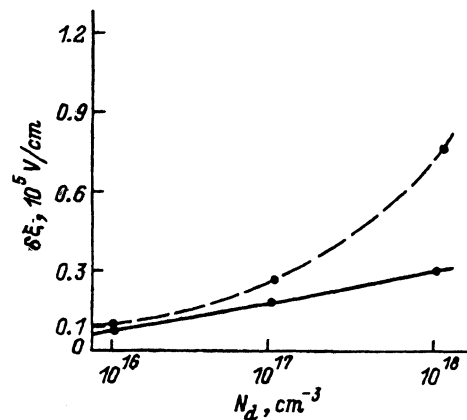


Рис. 4. Зависимости средних флуктуаций поверхностного поля $\delta\xi$ от уровня легирования: модель собственных делокализованных поверхностных состояний (сплошная кривая); модель дискретных примесных поверхностных состояний (штриховая кривая).

Ситуация с дискретными поверхностными состояниями обстоит проще. Поскольку нет перетекания поверхностного заряда, однозначное (но случайное) задание координат заряженных доноров и заполненных дискретных поверхностных состояний однозначно определяет поле и потенциал во всем пространстве и, следовательно, в плоскости поверхности. Используя диэлектрическую модель полупроводника, потенциал на поверхности можно записать в виде

$$\phi(x, y) = \frac{2e}{1 + \epsilon} \left[\sum_i \sum_j \frac{1}{\sqrt{(x - x_{ij})^2 + (y - y_{ij})^2 + z_{ij}^2}} - \sum_m \sum_n \frac{1}{\sqrt{(x - x_{mn})^2 + (y - y_{mn})^2}} \right]. \quad (11)$$

Здесь первое слагаемое описывает потенциал ионизованных доноров, второе — суммарный потенциал заполненных дискретных поверхностных состояний. Величины x_{ij} , y_{ij} , z_{ij} определяют координаты примеси в ОПЗ, а x_{mn} , y_{mn} — координаты центров, ответственных за поверхностные состояния. Расчет потенциала $\phi(x, y)$ производился также на ЭВМ; значения координат x_{ij} , y_{ij} , z_{ij} , x_{mn} , y_{mn} задавались генератором случайных чисел. Полученная функция распределения потенциала на поверхности $\Delta S/\Delta U(U)$ представлена на рис. 2.

Абсолютная величина суммарной напряженности электрического поля на поверхности полупроводника в модели примесных поверхностных состояний рассчитывалась исходя из простого соотношения

$$\mathcal{E} = \sqrt{\left[\sum_m \sum_n (\mathcal{E}_x)_{mn} \right]^2 + \left[\sum_m \sum_n (\mathcal{E}_y)_{mn} \right]^2 + \left[\sum_m \sum_n (\mathcal{E}_z)_{mn} \right]^2}, \quad (12)$$

где $(\mathcal{E}_x)_{mn}$, $(\mathcal{E}_y)_{mn}$, $(\mathcal{E}_z)_{mn}$ — декартовы составляющие электрических полей, создаваемых точечными зарядами — заряженными донорами и дискретными поверхностными состояниями. На рис. 3 представлен результат обработки рассчитанного по (12) поля \mathcal{E} как функции от координаты в плоскости поверхности — зависимость $\Delta S/\Delta \mathcal{E}(\mathcal{E})$.

Полученные результаты показывают, что дискретность заряда, хаотически распределенного в ОПЗ примесного полупроводника, приводит к неоднородностям электрического поля и потенциала на поверхности. Для GaAs с $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в случае непрерывных поверхностных состояний основная часть поверхности «завята» потенциалами с разбросом около заданного значения (изгиб зон 0.3 эВ), не превышающим kT (10 ÷ 15 мэВ) при комнатной температуре. Но также имеется небольшая (~ 5%) часть площади, имеющая потенциал на 50 мэВ и более отклоняющийся от величины изгиба зон. Существование низкопотенциального «хвоста» у зависимости $\Delta S/\Delta U(U)$ обусловлено достаточно большой вероятностью обнаружения заряженного донора близко от поверхности. Значительно большие перепады поверхностного потенциала были получены в случае дискретных поверхностных состояний. Здесь ширина на полувысоте зависимости $\Delta S/\Delta U(U)$ превысила величину 100 мэВ. Эта зависимость качественно отличается от аналогичной в случае непрерывных поверхностных состояний. Она существенно

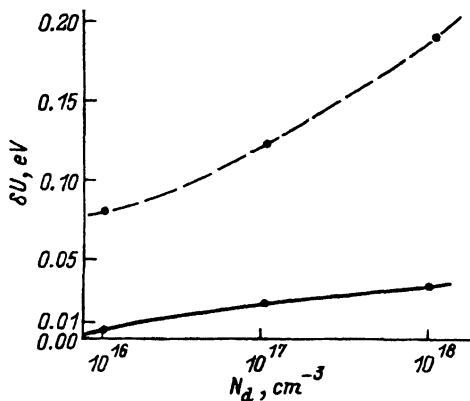


Рис. 5. Зависимости средних флуктуаций поверхностного потенциала ΔU от уровня легирования: модель собственных делокализованных поверхностных состояний (сплошная кривая); модель дискретных примесных поверхностных состояний (штриховая кривая).

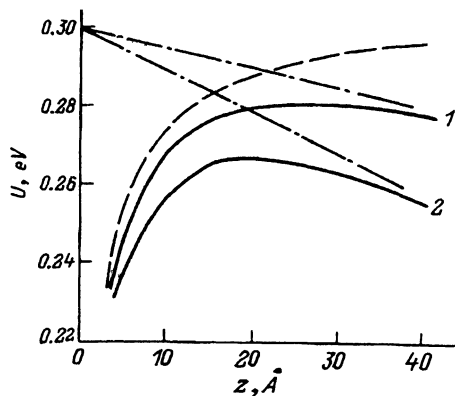


Рис. 6. Изменение высоты барьера Шоттки для электрона (сплошные кривые) при разных значениях электростатического поля на границе раздела металл-полупроводник: 1 — $\mathcal{E} = 0.5 \cdot 10^5$ В/см, 2 — $\mathcal{E} = 10^5$ В/см; показаны вклады потенциала сил зеркально изображения (штриховая кривая) и приконтактного поля (штрихпунктирные прямые).

шире и имеет высокопотенциальный «хвост», обусловленный высокой вероятностью положительных флуктуаций потенциальной энергии относительно уровня изгиба зон. Большое количество точечных зарядов на поверхности определяет и значительные флуктуации полей. Из зависимости $\Delta S/\Delta \mathcal{E}(\mathcal{E})$ следует, что примерно 2 ÷ 3% поверхности характеризуются напряженностью, на порядок превышающей значение, полученное в модели «желе» (10^5 В/см).

Расчеты, произведенные для различных степеней легирования в диапазоне $10^{16} \div 10^{18}$ см $^{-3}$, показали, что величины средних флуктуаций электрических полей и потенциалов на поверхности полупроводника монотонно возрастают при увеличении концентрации примеси (рис. 4, 5). При уровнях легирования более чем 10^{18} см $^{-3}$ неоднородности поля и потенциала продолжают расти. Однако при этом в модели необходимо учесть квантовые свойства объемных и поверхностных свободных носителей заряда, поскольку длина волны огибающей волновой функции теплового электрона в зоне проводимости при комнатной температуре (~ 200 Å) становится больше ширины ОПЗ, а поверхностные барьеры становятся прозрачными. Рассмотрение квантового предела выходит за рамки настоящей работы.

Предложенный метод расчета позволяет оценивать неоднородности электростатических полей и потенциалов на реальной поверхности примесного полупроводника. Подобное описание можно также применить для границ раздела металл-полупроводник, но, поскольку поле практически не проникает в металл, зеркальные изображения зарядов примеси будут «идеальными» и результаты вычислений более точными. Однако в данном случае анализировать надо флуктуации приконтактного барьера для электрона, которые формируются в неоднородном поле. Потенциал изображения электрона вызовет неодинаковое

для различных областей контакта типа контакта понижение поверхностного барьера в зависимости от локального значения поверхностного поля (рис. 6). Таким образом дискретность заряда примеси приводит к принципиально неизбежным флуктуациям высоты барьера Шоттки.

Обсудим некоторые следствия полученных результатов. Неоднородности электрических полей и потенциалов на свободных поверхностях примесного полупроводника, возможно, определяют формирование неоднородных потенциальных барьеров в контактах. В частности, экспериментальные данные по измерению флуктуаций высоты барьера Шоттки, полученные в работе [4], качественно согласуются с результатами расчетов неоднородностей поверхностного потенциала в модели собственных делокализованных поверхностных состояний (см. рис. 2). Количественное различие средних величин флуктуаций высоты барьера (в [6] получены величины флуктуаций примерно в 6 раз больше), возможно, вызвано усилением первичных неоднородностей потенциала в процессе роста металлического слоя. Подобное предположение объяснило бы также наблюдавшееся в [6] увеличение неоднородностей с ростом степени легирования полупроводника. В этой связи можно говорить о влиянии флуктуаций поверхностного потенциала на процессы зародышеобразования и роста пленок.

В модели дискретных поверхностных состояний имеет место «провисание» локальных неоднородностей поля в вакуум. Точечные заряды в ОПЗ и на поверхности являются неэкранированными. При этом спад потенциала в вакуум быстрее, чем по закону $1/z$, начнется с масштаба не менее чем $\sim \langle d_i \rangle$ от поверхности. Вследствие этого силовые линии электрического поля существенно провисают в вакуум на несколько сотен ангстрем. Наличие таких полей может серьезным образом повлиять на движение заряженных частиц в вакууме у поверхности полупроводника. В этих условиях, например, можно ожидать отклонения от дипольного приближения колебательной спектроскопии.

Таким образом, оценки пространственной неоднородности поверхностного потенциала примесного полупроводника показывают, что одномерная модель ОПЗ является по сути некорректной. Наличие счетного количества точечных зарядов в объеме d^3 не позволяет без большой погрешности заменить их на непрерывно распределенный заряд. Локальные флуктуации полей и потенциалов могут влиять на структуру поверхности и на протекание кинетических процессов в контактах.

Список литературы

- [1] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [2] В.А. Гергель, Р.А. Сурис. *ЖЭТФ*, **75**, 191 (1987).
- [3] В.А. Гергель, Р.А. Сурис. *ЖЭТФ*, **84**, 719 (1983).
- [4] В.А. Гергель, Г.В. Шпатаковская. *ФТП*, **27**, 923 (1993).
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред* (М., Наука, 1982).
- [6] Н. Palm, M. Arbes, M. Schulz. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 2224 (1993).

Редактор Т.А. Полянская

Natural the potential fluctuations at a doped semiconductor surface

V.B. Bondarenko, Yu.A. Kudinov, S.E. Ershov, V.V. Korablev

St.-Petersburg State Technical University,
195251 St. Petersburg, Russia

Fax: (812) 552-6616 (V.B. Bondarenko)

We present calculations of the electrical fields and potentials at doped semiconductor surface in constructed model of the charge region. The sum field is defined with taking into account of discrete atom charges and its images. It is obtained that potential fluctuations may reach values of band bending.
