

## Равновесное распределение мелкой примеси и потенциала в приповерхностной области полупроводника в модели полностью обедненного слоя

© В.В. Гавриловец, В.Б. Бондаренко<sup>†</sup>, Ю.А. Кудинов, В.В. Кораблев

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

(Получена 18 октября 1999 г. Принята к печати 16 ноября 1999 г.)

В модели полностью обедненного слоя получены аналитические зависимости равновесных распределений мелкой примеси, электрического поля и потенциала в приповерхностной области полупроводника. Результаты расчета были применены для оценки изменения параметров структуры конечного размера. Получено, что в данном приближении возможно уменьшение концентрации электрически активных дефектов в несколько раз для полупроводниковых слоев толщиной  $\sim 1$  мкм.

Анализируя процессы в приповерхностных обедненных слоях полупроводника и контактных структур, как правило, принимается модель, согласно которой легирующая примесь распределена равномерно, а зависимость потенциала от координаты либо параболическая (для полностью обедненного слоя), либо экспоненциальная (случай дебаевского экранирования). Между тем очевидно, что подобное состояние полупроводника принципиально не равновесно, как было показано в работах [1–6], в любом однородно легированном полупроводниковом кристалле после его раскола происходит диффузионно-дрейфовое перераспределение заряженной примеси в поле, инициированном поверхностным зарядом. Например, на этапе очистки поверхности, которая нередко проводится при температурах, далеких от реализации собственной проводимости, заряженная примесь должна перераспределяться в области пространственного заряда (ОПЗ), что повлияет на потенциальный профиль изгиба зон. Распределение примеси при достижении равновесия диффузионной и дрейфовой составляющих ионного тока стремится к состоянию, отличному от равномерного. Последнее реализуется в отсутствие вынуждающей силы (электрического поля) или при достижении предельного уровня растворимости примеси в данной матрице.

В большинстве случаев результаты по проблеме равновесного распределения примеси и потенциала у поверхностей и границ раздела полупроводников могут быть получены только численно и лишь в некоторых ситуациях возможно аналитическое решение данной задачи. Например, в работе [6] представлено подробное решение задачи для случая глубоких примесных уровней, в которой последовательное изложение обусловлено малой степенью ионизации примеси и линейным экранированием объемного заряда в большей части приповерхностной области. Следует отметить, что данная модель несправедлива при больших изгибах зон и легирования мелкой примесью, характерных для широкого круга полупроводниковых структур. Как будет показано далее,

этот случай при выполнении определенных условий также допускает аналитическое решение.

Равновесное состояние ОПЗ полупроводника описывается из совместного решения стационарного уравнения диффузии и уравнения Пуассона. Для определенности рассмотрим полубесконечный полупроводник, легированный донорами. В случае полностью и однократно ионизированной примеси, невырожденного электронного газа в зоне проводимости и в пренебрежении объемным зарядом дырок в валентной зоне имеем

$$\frac{dN(z)}{dz} - e\mathcal{E}(z)\frac{N(z)}{kT} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{d^2U(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \left\{ N(z) - N_0 \exp \left[ -\frac{U(z)}{kT} \right] \right\}. \quad (2)$$

Здесь  $z$  — координата, направленная от поверхности в глубь полупроводника,  $N(z)$  — концентрация доноров,  $N_0 = N(\infty)$  — уровень легирования,  $U(z)$  — потенциальная энергия электрического поля,  $\mathcal{E}(z) = (1/e)dU(z)/dz$  — электрическое поле в области изгиба зон,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость полупроводника (для полупроводников — простых веществ и соединений  $A^{III}B^V$ ,  $A^{IV}B^{IV}$  и некоторых других —  $\epsilon \sim 10$ ). Дифференциальное уравнение (1) записано в предположении, что  $|\mathcal{E}(z)|$  в основной области своего существования невелико, т.е. по крайней мере  $e|\mathcal{E}(z)|a \ll kT$  ( $a$  — длина диффузионного прыжка примесного атома [7,8]; данная величина обычно порядка межатома расстояния), что практически всегда справедливо при поверхностных полях меньше чем  $10^6$  В/см. Правая часть уравнения (2) записана аналогично случаю равномерно распределенной мелкой примеси одного типа (см., например, [9]). Величину потенциала будем отсчитывать от дна зоны проводимости.

Система (1)–(2) требует задания физически обоснованных граничных условий. Уравнение (1) выражает условие стационарности процесса переноса, при котором полный поток частиц равен нулю. Поэтому наиболее естественным условием на поверхности для диффузионного уравнения является паритет между диффузионной и

<sup>†</sup> Факс: (812)2472088

дрейфовой составляющими потока заряженной примеси, что эквивалентно случаю отражающей границы раздела. Соответственно, при  $z = \infty$  равен нулю диффузионный поток, поскольку  $\mathcal{E}(\infty) = 0$ . Следует отметить, что условие на поверхности для (1) в таком виде предполагает известным и постоянным  $\mathcal{E}(0)$ . Это возможно, если поверхностный заряд остается постоянным в процессе перераспределения объемного заряда. Реализоваться данная ситуация может по причине полного заполнения поверхностных состояний, либо наличия на поверхности так называемых медленных поверхностных состояний, инициализированных адсорбтом или пассивирующими покрытиями. На атомно-чистых поверхностях имеются собственные состояния, обычно с высокой плотностью, что приводит к закреплению уровня Ферми. При этом изменение объемного заряда в приповерхностной области полупроводника практически не приведет к изменению величины изгиба зон. Очевидно, что в этом случае граничное условие на поверхности — постоянство потенциала. В общем виде решение (1)–(2) при любых физически обоснованных условиях может быть получено только численно. Однако существует модельное упрощение, которое допускает аналитическое интегрирование системы и получение самосогласованного решения — модель полностью обедненного слоя. Данные приближения возникают при соответствующих величинах изгиба зон.

Пусть величина изгиба зон  $U_0 \gg kT$  и не изменяется при перераспределении заряженной примеси. При этом предполагается отсутствие электронов в некотором приповерхностном слое. Тогда в (2) можно пренебречь экспоненциально малым слагаемым в правой части, которое отвечает за экранирование ионизированных доноров. В данном случае задача формулируется следующим образом:

$$\frac{dN(z)}{dz} - \frac{dU(z)}{dz} \frac{N(z)}{kT} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d^2U(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} N(z), \quad (4)$$

$$N|_{z=L} = N_0, \quad \frac{dN}{dz}|_{z=L} = 0, \quad U|_{z=0} = U_0,$$

$$U|_{z=0} = 0, \quad \frac{dU}{dz}|_{z=L} = 0.$$

Параметр  $L$  имеет смысл ширины области обеднения. Выражая логарифмическую производную от  $N(z)$  из (3), проинтегрируем полученное выражение по  $z$ . После подстановки (4) и введения новой функции  $W(z) = \ln[N(z)/N_0]$  имеем

$$\frac{d^2W(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon kT} N_0 \exp W(z) \quad (5)$$

с однородными условиями  $W|_{z=L} = 0$ ,  $\frac{dW}{dz}|_{z=L} = 0$ . Применяя стандартный алгоритм решения нелинейного

уравнения к (5), получаем

$$\exp W = \cos^{-2} \left( \frac{L-z}{2l} \right)$$

или

$$N(z) = N_0 \cos^{-2} \left( \frac{L-z}{2l} \right), \quad (6)$$

$$\text{где } l = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{8\pi e^2 N_0}}.$$

Таким образом, получено распределение заряженной примеси в ОПЗ. Теперь, для определения потенциала можно переписать (4) с известной координатной зависимостью в правой части

$$\frac{d^2U(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} N_0 \cos^{-2} \left( \frac{L-z}{2l} \right). \quad (7)$$

Первое интегрирование (7) с использованием условия  $dU/dz(L) = 0$  дает распределение электрического поля

$$\frac{dU}{dz} = -\frac{kT}{l} \operatorname{tg} \left( \frac{L-z}{2l} \right). \quad (8)$$

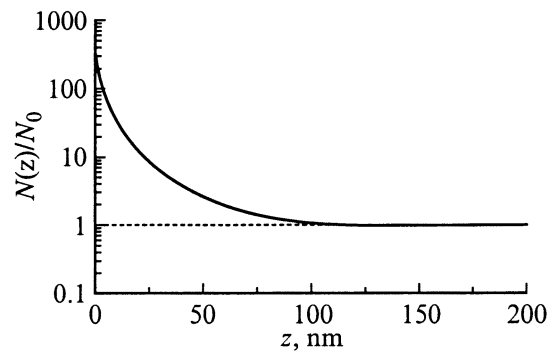
Второе интегрирование при условии  $U(L) = 0$  приводит к результату

$$U = -2kT \ln \cos \left( \frac{L-z}{2l} \right). \quad (9)$$

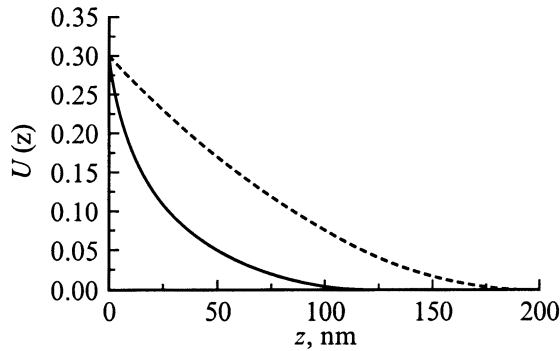
Условие  $U(0) = U_0$  доопределяет параметр  $L$ :

$$L = 2l \arccos \left[ \exp \left( -\frac{U_0}{2kT} \right) \right]. \quad (10)$$

Итак, самосогласованным (а значит, и равновесным) результатом поставленной задачи (3)–(4) в модели обедненного слоя являются полученные функции  $N(x)$  и  $U(x)$ . Заметим существенное отличие данных зависимостей (их вид представлен соответственно на рис. 1 и 2) от случая равномерно распределенной примеси. Значение концентрации примесных атомов в непосредственной близости от поверхности может достигать величин порядка  $N(0) = N_0 \exp(U_0/kT)$ . Например, если



**Рис. 1.** Равновесное распределение мелкой примеси в ОПЗ при постоянной величине изгиба зон (сплошная кривая) и равномерное распределение (штриховая прямая) с параметрами  $N_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $U_0 = 0.3 \text{ эВ}$ ,  $T = 600 \text{ К}$ .



**Рис. 2.** Равновесный профиль изгиба зон при постоянном потенциале на поверхности (сплошная кривая) и параболический изгиб зон (штриховая кривая) с параметрами  $N_0 = 10^{16}$  см,  $U_0 = 0.3$  эВ,  $T = 600$  К.

$U_0 = 0.3$  эВ и  $T = 600$  К, то  $N(0)/N_0 \approx 320$ . Как видно из графика  $U(x)$ , в данном случае ( $N_0 = 10^{16}$  см,  $\epsilon = 12$  (Si)) происходит значительное увеличение (в указанном примере примерно в 8 раз) значения электрического поля на поверхности полупроводника. Отметим, что полученный результат не учитывает ограничения на значение концентрации в приповерхностной области при низких температурах ( $\sim 300\text{--}400$  К) и при высоких ( $\sim 10^{18}\text{--}10^{19}$  см $^{-3}$ ) степенях легирования. Очевидно, что в этих условиях может достигаться предельный уровень растворимости примеси в полупроводниковом кристалле.

Распределение примеси в случае больших изгибов зон (6) получено в предположении небольших электрических полей в ОПЗ. Однако если исходная напряженность поля при равномерном распределении примеси невелика ( $< 10^6$  В/см), то равновесное значение электрического поля на поверхности, определяемое выражением (8), при  $z = 0$  с учетом (10)

$$\left. \frac{dU}{dz} \right|_{z=0} = -\frac{kT}{l} \sqrt{\exp\left(\frac{U_0}{kT}\right) - 1}$$

по абсолютной величине может превысить значения полей, при которых  $\mathcal{E}$  входит линейно в диффузионное уравнение (1) (или (3)). Например, при  $N_0 = 10^{17}$  см $^{-3}$ ,  $U_0 = 0.3$  эВ,  $\epsilon = 12$  и  $T = 600$  К величина  $\mathcal{E}(0)$  становится порядка  $10^6$  В/см, а если состояние равновесия реализуется при  $T = 500$  К, то поверхностное поле превышает данную величину. В таких случаях должна быть принята во внимание существенная несимметричность диффузионного прыжка примесного атома по полю и против поля.

Определенный теоретический и практический интерес может представлять распределение примеси и потенциала в конечном слое полупроводника. Дело в том, что значительное перераспределение примеси в ОПЗ может привести к изменению уровня легирования полупроводниковых структур микронных и субмикронных размеров.

Особенность изложенной выше модели и полученных результатов позволяет достаточно просто оценить влияние диффузии примеси во встроенном поле изгиба зон на величину важного электрофизического параметра системы — концентрацию электронов в зоне проводимости.

Для конечного слоя полупроводника должно быть выполнено уравнение баланса примесных атомов:

$$N_0^{(0)} \cdot D = \int_0^L N(z) dz + N_0^{(1)}(D - L), \quad (11)$$

где  $D$  — толщина слоя,  $N_0^{(0)}$  и  $N_0^{(1)}$  — начальное и конечное значения концентрации примеси в объеме. При этом полагается, что электрическое поле равно нулю при любом значении координаты  $z$  в промежутке  $[L, D]$ . Важно отметить, что распределение  $N(z)$ , ширина ОПЗ  $L$  и другие зависимости (поле и потенциал) имеют вид, аналогичный (6) и (8)–(10), но с другими параметрами. Последнее обстоятельство связано с эквивалентностью систем и граничных условий в принятой модели ОПЗ.

После вычисления интеграла в уравнении (11) получаем

$$N_0^{(0)} \cdot D = N_0^{(1)} \left( 2l \operatorname{tg} \frac{L}{2l} + D - L \right), \quad (12)$$

где теперь  $l = \sqrt{\frac{\epsilon kT}{8\pi e^2 N_0^{(1)}}}$  и  $L = 2l \arccos \left[ \exp\left(-\frac{U_0^{(1)}}{2kT}\right) \right]$ . При достижении равновесного состояния изменяется величина изгиба зон:

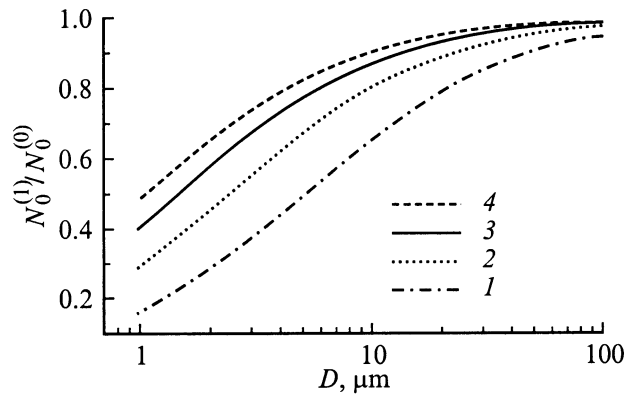
$$U_0^{(1)} = U_0^{(0)} + \Delta E_F, \quad (13)$$

где  $\Delta E_F = kT \ln \frac{N_0^{(1)}}{N_0^{(0)}}$  — изменение положения уровня Ферми в системе. Здесь, как и ранее, предполагается равенство концентраций доноров и свободных электронов в объеме образца.

Дальнейший расчет проведем для толстых слоев:  $D \gg l, L$  (для больших изгибов зон  $L \approx \pi l$ ). В этих случаях в правой части уравнения (12) можно пренебречь третьим слагаемым. С учетом выражения (13) можно упростить первое слагаемое в (12):

$$\begin{aligned} 2l \operatorname{tg} \frac{L}{2l} &= 2l \sqrt{\exp\left(\frac{U_0^{(1)}}{kT}\right) - 1} \\ &\approx 2l \exp\left(\frac{U_0^{(0)}}{2kT}\right) \sqrt{\frac{N_0^{(1)}}{N_0^{(0)}}} \\ &= \exp\left(\frac{U_0^{(0)}}{2kT}\right) \sqrt{\frac{\epsilon kT}{2\pi e^2 N_0^{(0)}}}. \end{aligned}$$

После указанных упрощений получаем в явном виде неизвестный параметр системы — концентрацию примеси



**Рис. 3.** Зависимости концентрации мелкой примеси от размера структуры при различных температурах в равновесном состоянии.  $T, K$ : 1 — 400, 2 — 500, 3 — 600, 4 — 700.

в объеме конечного слоя в состоянии равновесия:

$$N_0^{(1)} = N_0^{(0)} D \left[ \exp \left( \frac{U_0^{(0)}}{2kT} \right) \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{2\pi e^2 N_0^{(0)}} + D} \right]^{-1}. \quad (14)$$

Теперь простой заменой в выражениях (6), (8)-(10) соответствующих параметров (изгиба зон и концентрации примеси в объеме) на соответствующие выражения (13), (14) получаем равновесные распределения примеси, поля и потенциала в ОПЗ конечной структуры.

Проанализируем результирующее выражение (14). Прежде всего отметим, что в пределе  $D \rightarrow \infty$  (полубесконечный образец) объемная концентрация примеси стремится к своему исходному значению. Характерные зависимости величины  $N_0^{(1)}$  от размера структуры и температуры установления равновесия представлены на рис. 3. Наличие экспоненциально растущего с понижением температуры слагаемого в знаменателе выражения (14) определяет снижение концентрации в несколько раз. Температура, при которой величина  $N_0^{(1)}$  в 2 раза меньше начальной концентрации, может быть найдена из трансцендентного уравнения

$$\exp \left( \frac{U_0^{(0)}}{2kT} \right) \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{2\pi e^2 N_0^{(0)}}} = D.$$

При указанных выше параметрах ( $N_0^{(0)} = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $U_0^{(0)} = 0.3 \text{ эВ}$ ,  $\varepsilon = 12$ ) и размерах структуры в два микрометра ( $D = 2 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ ) такое изменение происходит при  $\approx 540 \text{ К}$ , а для структуры вдвое тоньше —  $\sim 700 \text{ К}$ .

## Список литературы

- [1] В.С. Кузнецов, В.Б. Сандомирский. Кинетика и катализ, **3**, 724 (1962).
- [2] W. Nuyts, R. Van Overstraeten. Phys. St. Sol. (a), **15**, 329 (1973).

- [3] R.Sh. Malkovich, V.A. Pokoeva. Phys. St. Sol. (a), **48**, 329 (1978).
- [4] R. Shrivastava, A.H. Marshak. Sol. St. Electron., **23**, 73 (1980).
- [5] O. Hildebrand. Phys. St. Sol. (a), **72**, № 2, 575 (1982).
- [6] Ф.Ф. Волькенштейн. *Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции* (М., Наука, 1987) с. 157.
- [7] Дж.П. Старк. *Диффузия в твердых телах* (М., Энергия, 1980) с. 39.
- [8] П.В. Ковтуненко. *Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами* (М., Высш. шк., 1993) с. 258.
- [9] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977) с. 216.

Редактор В.В. Чалдышев

## Equilibrium distribution of impurity and potential in sub-surface space charge region of semiconductor in depletion layer model

V.V. Gavrilovets, V.B. Bondarenko, Yu.A. Kudinov, V.V. Korablev

State Technical University,  
195251 St. Petersburg, Russia

**Abstract** In this paper we present calculations of the equilibrium distribution of fully ionized impurity and potential in the sub-surface space charge region of semiconductor in the depletion layer model. Analytical expressions obtained are used to estimate the variation of some parameters of the finite semiconductor layer. It is shown that the impurity concentration is several times less if the semiconductor layer is about  $1 \mu\text{m}$ .