

О. О. Птащенко*, Ф. О. Птащенко**

* Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова

** Одеська національна морська академія

ФОРМУВАННЯ ПОВЕРХНЕВОГО ПРОВІДНОГО КАНАЛУ В P-N СТРУКТУРАХ ПРИ АДСОРБЦІ ІОНІВ

Доповідь зроблено на засіданні наукового семінару
кафедри фізики твердого тіла і твердотільної електроніки ОНУ 29.01.2003 р.

Проведено двовимірні чисельні розрахунки розподілу потенціалу і густини струму в р-п структурах на основі GaAs з урахуванням поверхневої рекомбінації та викривлення зон під дією адсорбованих іонів. Дія адсорбованих іонів, локалізованих на поверхні власного оксиду, врахована в граничних умовах наявністю сильного поверхневого електричного поля. Розрахунки підтверджують модель створення поверхневого провідного каналу під дією іонів і виявляють ряд особливостей його параметрів.

Проведены двумерные численные расчеты распределения потенциала и плотности тока в р-п структурах на основе GaAs с учетом поверхностной рекомбинации и искривления зон под действием адсорбированных ионов. Действие адсорбированных ионов, локализованных на поверхности собственного оксида, учтено в граничных условиях наличием сильного поверхностного электрического поля. Расчеты подтверждают модель образования поверхностного проводящего канала под действием ионов и обнаруживают ряд особенностей его параметров.

Two-dimensional numerical calculations of potential- and current density distributions in p-n structures on GaAs were performed taking into account surface recombination, as well as the band bending due to adsorbed ions. The action of adsorbed ions, located on the surface of the natural oxide, was described in the boundary condition by the presence of a strong surface electric field. The calculations reinforce the model of the surface conductive channel forming due to the ions and reveal some features of its parameters.

1. Вступ. На величину поверхневого струму в р-п структурах на основі напівпровідників $A^{III}B^V$ впливає склад навколишньої атмосфери, що можна використати для створення газових сенсорів [1, 2]. В даних роботах досліджено вплив парів води, етилену, ацетону і аміаку на вольт-амперні характеристики (ВАХ) прямого і зворотного струмів у лазерних гетероструктурах на основі AlGaAs–GaAs та в р-п структурах на основі GaAs.

Виміряні в повітрі ВАХ прямих струмів досліджених р-п структур в області до 10 мкА мали вигляд

$$I(V) = I_0 \exp(qV / n_i kT), \quad (1)$$

де коефіцієнт неідеальності $n_i \approx 2$ при $T=300\text{K}$ і зростає при зниженні температури. Аналіз вказаних ділянок ВАХ свідчить, що вони пов'язані з поверхневою рекомбінацією носіїв заряду поблизу р-п переходу [3]. Пари води, етилену і ацетону лише незначно змінювали поверхневий струм досліджених структур, в той час як пари аміаку значно збільшували його.

В [1,2] встановлено такі закономірності впливу парів аміаку на поверхневий струм в р-п структурах:

а) зміни поверхневого струму всіх досліджених р-п переходів під дією парів аміаку були оборотними: при видаленні з навколишньої атмосфери парів аміаку всі характеристики зразків відновлювалися. Це свідчить про фізичний, а не хімічний механізм адсорбції молекул NH_3 на поверхні GaAs. Аналогічний результат дали вимірювання на р-п переходах на основі GaP, GaAsP і AlGaAs [4];

б) пряма і зворотна компоненти надлишкового поверхневого струму (НПС), пов'язаного з адсорбцією молекул NH_3 , лінійно залежали від прикладеної напруги, тобто

$$I = a(V - V_0), \quad (2)$$

де величина $V_0 = \pm 0,12\text{В}$, причому знак "+" відповідає прямому струму, а "-" – зворотному; коефіцієнт a має розмірність Ом^{-1} . Таку залежність $I(V)$ можна пов'язати з виникненням провідного приповерхневого каналу в р-п структурах, поміщених в пари аміаку, який "закорочує" р-п перехід [1, 2];

в) вигляд ВАХ свідчить, що при адсорбції молекул NH_3 в р-п переходах виникає, згідно з формулою (2), електрорушійна сила (ЕРС) величиною $0,12\text{В}$. Знак ЕРС свідчить, що при взаємодії молекул NH_3 з р-п структурою генеруються неосновні носії заряду. Враховуючи, що молекули аміаку ведуть себе як донори на поверхні GaAs, можна зробити висновок, що провідний канал, обумовлений адсорбцією молекул NH_3 , створюється у р-області за рахунок приповерхневого вигину зон, який веде до інверсії знаку основних носіїв;

г) при прикладеній напрузі до 1В величина НПС в більшості зразків лінійно залежала від парціального тиску парів NH_3 . Це пояснювалося лінійністю залежності концентрації електронів у приповерхневому провідному каналі від концентрації молекул NH_3 у навколишній атмосфері. Вказана закономірність спостерігалася і для прямого, і для зворотного струмів у р-п структурах;

д) величина додаткового прямого струму, пов'язаного з адсорбцією молекул NH_3 , була значно більша, ніж величина додаткового зворотного струму при тій же концентрації парів аміаку. Це пояснювалося залежністю довжини поверхневого провідного каналу від знаку прикладеної напруги.

Метою даної роботи було провести чисельні розрахунки розподілу потенціалу і

густини струму в р-п структурах на основі GaAs з урахуванням поверхневої рекомбінації та викривлення зон під дією адсорбованих іонів.

2. Модель і основні рівняння. Для розрахунків обрана р-п структура, показана на рис. 1 (спрощений варіант р-п структури на основі GaAs, описаної в [5]). Вся товщина структури – 7мкм , а ширина – 40мкм . Розрахунки велись для

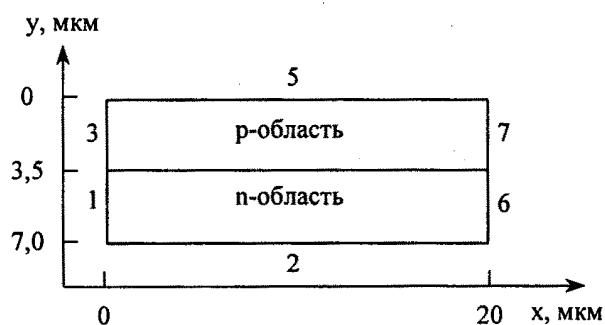


Рис. 1. Схема р-п структури, взята для розрахунків

половини ширини структури, яка складає приблизно 4 дифузійних довжини для електронів. Наявність низькоомної підкладинки не враховувалася. Товщина р-області взята приблизно рівною половині довжини дифузії електронів.

Розподіл потенціалу в об'ємі напівпровідника знаходився з рівняння Пуассона

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0\varepsilon}(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad (3)$$

де e – заряд електрона; ε_0 – електрична стала; ε – діелектрична проникність напівпровідника; n і p – концентрації електронів і дірок в даній точці; N_D^+ і N_A^- – концентрації іонізованих донорів і акцепторів.

Для стаціонарного стану густина електронної та діркової компонент струму розраховувалась на основі рівнянь

$$\nabla j_n = -eR; \quad (4)$$

$$\nabla j_p = -eR, \quad (5)$$

де n_0 , p_0 – рівноважні концентрація електронів та дірок; інтенсивність рекомбінації електронів та дірок

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + N_{cl}) + \tau_{n0}(p + N_{vl})}, \quad (6)$$

n_i – власна концентрація електронів при даній температурі;

$$N_{cl} = N_c \exp(E_c / kT); \quad N_{vl} = N_v \exp(E_v / kT), \quad (7)$$

N_c , N_v – ефективні щільності станів відповідно у с- та v- зонах; E_c , E_v – відстані рекомбінаційного рівня від с та v-зон відповідно; величини τ_{n0} , τ_{p0} визначаються виразами

$$\tau_{n0} = 1/(C_m N_t); \quad \tau_{p0} = 1/(C_p N_t), \quad (8)$$

де C_m , C_p – коефіцієнти захоплення рекомбінаційних центрів (t-центрів) для електронів та дірок; N_t – концентрація вказаних центрів.

Густина електронної та діркової компонент струму виражалася через концентрації електронів і дірок згідно з виразами

$$j_n = -e(\mu_n n \nabla \varphi - D_n \nabla n), \quad (9)$$

$$j_p = -e(\mu_p p \nabla \varphi + D_p \nabla p), \quad (10)$$

де μ_n і μ_p – рухливості електронів і дірок; D_n і D_p – коефіцієнти дифузії відповідно електронів та дірок. Величини τ_n і τ_p , μ_n і μ_p , D_n і D_p вважалися просто-ривно незалежними.

Для повної густини струму використовувався вираз

$$j = j_n + j_p. \quad (11)$$

Враховувалося співвідношення Ейнштейна

$$D_{n,p} = \frac{kT}{e} \mu_{n,p}, \quad (12)$$

де k – стала Больцмана; T – температура.

Дифузійні довжини електронів та дірок розраховувалися як

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \tau_{n,p}}. \quad (13)$$

Концентрації електронів та дірок пов'язувалися з положенням відповідних квазі-рівнів Фермі

$$n = n_i \exp \left[\frac{e(\varphi - \varphi_n)}{kT} \right], \quad (14)$$

$$p = n_i \exp \left[\frac{e(\varphi_p - \varphi)}{kT} \right], \quad (15)$$

де n_i – власна концентрація носіїв заряду при даній температурі; φ – потенціал, що визначає середину забороненої зони в даній точці; $e\varphi_n$, $e\varphi_p$ – квазірівні Фермі відповідно, для електронів та дірок в даній точці.

Тоді вирази (9) і (10) для відповідних компонент густини струму набувають вигляду:

$$j_n = -e\mu_n n \nabla \varphi_n; \quad (16)$$

$$j_p = -e\mu_p p \nabla \varphi_p. \quad (17)$$

3. Граничні умови. Для кожної з ділянок 1–3 і 5–7 зовнішньої границі структури, показаної на рис. 1, встановлювалися такі умови:

а) для ділянок 1 і 3, що відповідають лінії симетрії зразка, враховувалося, що x -компоненти електронного і діркового струмів відсутні, тобто, виходячи з формули (16),

$$j_{nx} = -e\mu_n n \frac{\partial \varphi_n}{\partial x} = 0; \quad j_{px} = -e\mu_p p \frac{\partial \varphi_p}{\partial x} = 0. \quad (18)$$

З виразів (18) випливає, що на ділянках 1 і 3 маємо

$$\frac{\partial \varphi_n}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial \varphi_p}{\partial x} = 0, \quad (19)$$

тобто квазірівні Фермі в даному напрямку не змінюються.

Крім того, електростатичний потенціал також не змінюється в даному напрямку, тобто

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0; \quad (20)$$

б) границя 2 (металічний контакт до n -області, див. рис. 1) вважалася заземленою, що відповідає

$$\varphi = 0, \quad (21)$$

причому (на металічному контакті) швидкість поверхневої рекомбінації вважалася нескінченною, що веде до

$$\varphi_n = 0; \quad \varphi_p = 0; \quad (22)$$

в) до границі 5 (металічного контакту до р-області) прикладено зовнішню напругу V , так що на даній ділянці

$$\varphi = V. \quad (23)$$

На даному контакті також швидкість поверхневої рекомбінації вважалася нескінченною, що дає

$$\varphi_n = V; \quad \varphi_p = V; \quad (24)$$

г) ділянки 6 і 7 правої границі структури (див. рис. 1) є ділянками відкритої поверхні структури. На цих ділянках необхідно враховувати поверхневу рекомбінацію. Інтенсивність поверхневої рекомбінації (число актів рекомбінації, що відбуваються на одиниці площі за 1с) можна виразити, згідно з [6, 7], як

$$R_s = \frac{np - n_i^2}{S_p^{-1}(n + N_{cs}) + S_n^{-1}(p + N_{vs})}, \quad (25)$$

де n , p – концентрації електронів і дірок в даній точці (біля поверхні);

$$N_{cs} = N_c \exp(E_{cs} / kT); \quad N_{vs} = N_v \exp(E_{vs} / kT), \quad (26)$$

E_{cs} , E_{vs} – відстані поверхневого рекомбінаційного рівня від с– та v– зон відповідно; величини τ_{n0} , τ_{p0} визначаються виразами

$$S_n = (C_{sn} N_s^+); \quad S_p = (C_{sp} N_s^-), \quad (27)$$

де C_{sn} , C_{sp} – коефіцієнти захоплення поверхневих рекомбінаційних центрів (t–центрів) для електронів та дірок; N_s^- і N_s^+ – поверхневі (розраховані на одиницю площі поверхні) концентрації вказаних центрів.

Гранична умова для електронної компоненти струму, що враховує вирази (16) і (25), на ділянках поверхні 6 і 7 має вигляд:

$$\mu_n n \frac{\partial \varphi_n}{\partial x} = - \frac{np - n_i^2}{S_p^{-1}(n + N_{cs}) + S_n^{-1}(p + N_{vs})}, \quad (28)$$

а для діркової компоненти

$$\mu_p p \frac{\partial \varphi_p}{\partial x} = \frac{np - n_i^2}{S_p^{-1}(n + N_{cs}) + S_n^{-1}(p + N_{vs})}. \quad (29)$$

Поверхневий провідний канал у р-п структурі створюється під дією електричного поля позитивних іонів, локалізованих на поверхні власного оксиду (що повинен прилягати до ділянок 6 і 7 поверхні, але для простоти не показаний на рис. 1). Наявність вказаного поля враховується граничною умовою для потенціалу на вказаних ділянках

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = E, \quad (30)$$

де напруженість поля (яка є від'ємною) використовується як параметр, що визначається поверхневою концентрацією адсорбованих іонів та товщиною шару власного оксиду на поверхні напівпровідника.

4. Результати розрахунків. На рис. 2 представлено результати розрахунку розподілу електронів (у логарифмічному масштабі) в р-п структурі при напрузі прямого зміщення $V=0,4\text{В}$. Максимальне значення концентрації $n_m = 10^{17}\text{см}^{-3}$ досягається в п-області (при $y > 3,5\text{мкм}$).

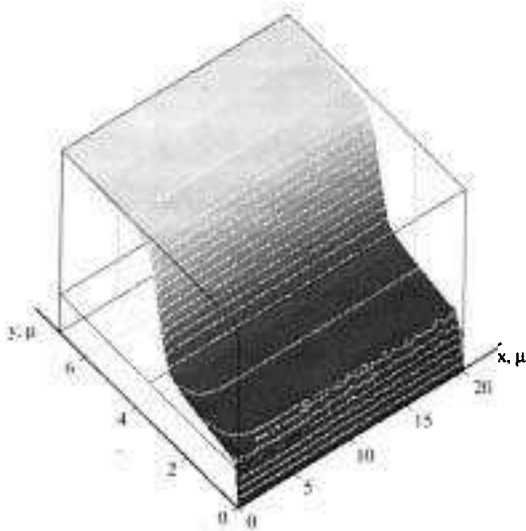


Рис. 2. Розподіл електронів у р-п структурі при напрузі 0,4 В

Розрахунки проведено при таких значеннях параметрів р-п структури: матеріал структури GaAs; температура $T=300\text{К}$; концентрація власних носіїв заряду $n_i = 1,79 \cdot 10^6\text{см}^{-3}$; параметри у виразі (6) $\tau_{n0} = \tau_{p0} = 5 \cdot 10^{-9}\text{с}$; рухливості електронів і дірок складають $\mu_n = 3500\text{см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ і $\mu_p = 200\text{см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ відповідно; значення швидкості поверхневої рекомбінації для електронів і дірок $S_n = S_p = 5 \cdot 10^6\text{см/с}$. Рекомбінаційні рівні в об'ємі кристала вважалися локалізованими на середині забороненої зони, так що в формулі (6) має місце рівність $N_{ct} = N_{vt} = n_i$. Поверхневі рекомбінаційні рівні теж вважалися локалізованими на середині забороненої зони, що

вело до $N_{cs} = N_{vs} = n_i$ в формулах (28) і (29).

Розподіл електронів, наведений на рис. 2, розраховано для випадку, коли до вільної бокової поверхні р-п структури, що відповідає рівнянню $x = 0$, прикладено електричне поле напруженістю 5000В/см . Світлі лінії ("горизонталі") відповідають фіксованим значенням концентрації електронів, тобто це – ізоконцентраційні лінії. З рисунка видно дві особливості розподілу електронів: а) наявність вигину ізоконцентраційних кривих поблизу поверхні в сторону р-п переходу при малих значеннях x , тобто в р-області. Такий вигин свідчить про те, що концентрація електронів (неосновних носіїв заряду) в приповерхневому шарі менша, ніж в об'ємі р-області. Даний ефект обумовлений поверхневою рекомбінацією; б) всередині збідненого шару р-п переходу існує вигин ізоконцентраційних кривих в протилежну (до першого випадку) сторону. Такий ефект обумовлений прикладеним до поверхні електричним полем, що притягує електрони до поверхні. В реальних структурах цей ефект зумовлений дією електричного поля адсорбованих іонів.

На рис. 3 наведено розподіл густини струму в тонкому шарі, що прилягає до вільної поверхні р-п структури. Зовнішнє поперечне електричне поле на вільній поверхні відсутнє, що відповідає відсутності адсорбованих іонів. Вільна поверхня має рівняння $x=1\text{мкм}$ (тобто розташована справа). Межа між п-областю і р-областю відповідає

$y=1\text{ мкм}$. При цьому п-область знаходиться при $y < 1\text{ мкм}$. Поверхневий струм у від-

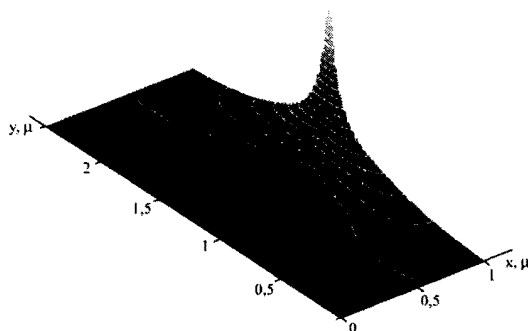


Рис. 3. Розподіл густини струму в приповерхневій частині р-п структури у відсутності адсорбованих іонів

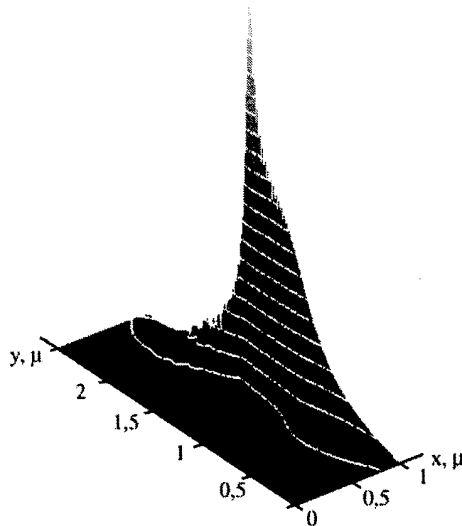


Рис. 4. Розподіл густини струму в приповерхневій частині р-п структури при наявності адсорбованих іонів

сутності зовнішнього поля обумовлений поверхневою рекомбінацією. З рисунка видно, що вказаний струм має такі особливості: а) він локалізований у приповерхневому шарі товщиною $d < 0,25\text{ мкм}$ при товщині збідненого шару $w = 0,25\text{ мкм}$ в об'ємі напівпровідника (що відповідає взятим для розрахунків концентраціям іонізованих донорів $N_D = 10^{17}\text{ см}^{-3}$ у п-області та акцепторів $N_A = 10^{17}\text{ см}^{-3}$ в р-області);

б) максимум поверхневої густини струму зміщений в р-область на $0,5\text{ мкм}$ в сторону р-області по відношенню до геометричної границі р- і п-областей. Внаслідок того, що повний поверхневий струм не залежить від координати y , наявність різкого максимуму густини струму свідчить про різке звуження провідного поверхневого каналу (при $y = 1,5\text{ мкм}$); в) спад густини струму в сторону п-області більш плавний, ніж в сторону р-області. Два останні ефекти пов'язані з тим, що рухливість електронів більша, ніж рухливість дірок.

Для приповерхневого шару можна ввести поняття поверхневої дифузійної довжини L_{ns} для електронів і L_{ps} для дірок, як це робиться в [7]. Величини L_{ns} і L_{ps} визначаються розподілом поверхневих концентрацій відповідних носіїв заряду згідно з формулами

$$n_s = n_{s0} \exp(-|y - y_o| / L_{ns}); \quad (31)$$

$$p_s = p_{s0} \exp(-|y - y_o| / L_{ps}), \quad (32)$$

де y_0 відповідає максимуму відповідної концентрації. З рис. 3 видно, що $L_{ps} > L_{ns}$, в той час як в об'ємі $L_p > L_n$, причому всі параметри, крім рухливості, в даних розрахунках взяті однаковими для електронів та дірок. Крім того, поверхневі ефективні значення дифузійних довжин на порядок величини менші, ніж в об'ємі кристала.

На рис. 4 показано розподіл густини струму в приповерхневій області тієї ж структури, розрахований для випадку, коли на вільній поверхні знаходяться адсорбовані іони, що створюють електричне поле напруженістю 5000 В/см. Зіставлення рис. 3 і рис. 4 показує таке: а) висота максимуму густини поверхневого струму в присутності іонів набагато більша, ніж без іонів, в той час як ширина каналу практично не змінюється при адсорбції іонів. Це прояснює механізм зростання поверхневого струму в р-п структурах при адсорбції молекул аміаку, що спостерігалось в [1, 2]: при адсорбції іонів ширина приповерхневого провідного каналу практично не змінюється, а зростає концентрація електронів у даному каналі. Крім того, спостерігається видовження каналу в n-області.

Висновки

Проведені розрахунки показали, що підвищення прямого струму в р-п структурах на основі напівпровідників A^3B^5 при адсорбції іонів аміаку обумовлено зростанням концентрації електронів у тонкому приповерхневому шарі, який закорочує р-п перехід. Провідний канал локалізований у збідненому шарі р-п переходу. Товщина вказаного каналу менша товщини збідненого шару в об'ємі р-п структури. Даний канал має різке звуження в збідненому шарі, властивостями якого і визначається чутливість р-п структури як газового сенсора.

1. Артеменко Е. С., Маслеева Н. В., Птащенко А. А., Птащенко Ф. А. Влияние окружающей атмосферы на поверхностный ток в р-п гетероструктурах на основе GaAs-AlGaAs // Вісник Одеськ. держ. ун-та. – 2000. – Т.5, вип.3. Фіз.-мат. науки. – С.185–190.
2. Птащенко О. О., Артеменко О. С., Птащенко Ф. О. Вплив газового середовища на поверхневий струм в р-п гетероструктурах на основі GaAs–AlGaAs // Фізика і хімія твердого тіла. – 2001. – Т. 2, № 3. – С. 481–485.
3. Ptashchenko A. A., Ptashchenko F. A. Tunnel surface recombination in optoelectrical device modelling // Proc. SPIE. – 1997. – V.3182. – P.145–149.
4. Птащенко О. О., Артеменко О. С., Птащенко Ф. О. Характеристики р-п структур як газових сенсорів // 1-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. Тези доповідей. Том 2. Стендові доповіді. – Одеса. – 2002. – С. 76.
5. Ptashchenko A. A., Melkonyan D. V., Moroz N. V., Ptashchenko F. A. Effect of local nonradiative recombination on time-resolved electroluminescence of p-n-junctions // Physica Status Solidi (a). – 1997. – V.159, №2. – P.523–534.
6. Dodd P. E., Stellwag T.B., Melloch M. R., Lundstrom M. S. Surface and perimeter recombination in GaAs diodes: an experimental and theoretical investigation // IEEE Transact. on Electron Devices. – 1991. – V. 38, №6. – P. 1253–1260.
7. Mazhari B., Morcoc H. Surface recombination in GaAs p-n junction diode // J. Appl. Phys. – 1993. – V. 73, №11. – P. 7509–7514.

Одержано 17.02.2003 р.