

Богатов Николай Маркович, Володин Владимир Сергеевич,
Григорьян Леонтий Рустемович, Коваленко Максим Сергеевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ *N-P* ПЕРЕХОДА С УЧЕТОМ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ

*Влияние поверхностных состояний на распределение электрического поля в диффузионном *n-p* переходе в кремнии промоделировано численно. Краевое условие для уравнения Пуассона учитывает общую электронейтральность образца и плотность электронных состояний на поверхности эмиттера. Показано, что изменение электрического потенциала вследствие существования поверхностных электронных состояний создает электрическое поле, направляющее неосновные носители заряда к поверхности и повышающее скорость их рекомбинации.*

**N-p* переход, потенциал электрического поля, уравнение Пуассона, поверхностные состояния, электроны, дырки, кремний.*

Bogatov Nikolay Markovich, Volodin Vladimir Sergeevich,
Grigoryan Leontiy Rustemovich, Kovalenko Maxim Sergeevich

SIMULATION OF THE ELECTRIC FIELD OF *N-P* JUNCTION WITH SURFACE STATES

*The influence of surface states on the electric field distribution in a diffusion *n-p* junction in silicon is simulated numerically. The boundary condition for the Poisson equation takes into account the overall electrical neutrality of the sample and the density of electronic states on the emitter surface. It is shown that a change in the electric potential due to the existence of surface electronic states creates an electric field that directs minority charge carriers to the surface and increases the rate of their recombination.*

**N-p* junction, electric field potential, Poisson's equation, surface states, electrons, holes, silicon.*

Введение

Уменьшение размеров полупроводниковых структур с *n-p* переходом – современная тенденция развития электроники. При этом для планарных переходов возрастает влияние поверхности, играющей, как правило, отрицательную роль. Основными физическими факторами являются существование плотности поверхностных состояний в зоне запрещенных энергий, создающих эффективный заряд, и рекомбинация через эти состояния.

Исследования поверхностной области, электрофизических характеристик полупроводниковой структуры, содержащей *n-p* переход, является современной актуальной задачей. Результаты этих исследований позволяют повысить эффективность ФЭП [1], уменьшить нестабильность диодов [2].

В работах [3, 4] показано, что накопление неравновесного поверхностного заряда на границе Si-SiO₂ является дополнительной причиной снижения эффективности собирания фотогенерированных носителей заряда. Отрицательное влияние туннельно-рекомбинационных переходов электронов через поверхностные состояния на границе раздела Si-ITO на эффективность разделения неравновесных носителей заряда в фотовольтаических приборах экспериментально доказано в [5]. Поверхностные заряды создают поверхностный электрический потенциальный барьер, что отрицательно влияет на перенос электронов и дырок через поверхность [6].

Цель работы – промоделировать влияние поверхностных состояний на распределение электрического поля в диффузионном *n-p* переходе.

Основные уравнения

Координатные параметры n - p перехода: при $-w_n \leq x \leq -d_n$ расположен эмиттер n -типа проводимости; при $-d_n < x < d_p$ расположена область, обедненная носителями заряда, (ООНЗ); при $d_p \leq x \leq w_p$ расположена база p -типа проводимости, в которой выполняется условие локальной нейтральности.

Концентрация примесей определяется формулой

$$N(x) = N_D(x) - N_A \text{ при } -w_n \leq x \leq w_p. \quad (1)$$

В формуле (1) N_D – концентрация доноров

$$N_D(x) = N_{D0} \operatorname{erfc}\left(\frac{(x + w_n)}{x_0}\right) \quad (2)$$

согласно модели диффузии из неограниченного источника [7], N_A – концентрация акцепторов $N_A = \text{const}$.

Концентрация ионизованных доноров и акцепторов [8]

$$N_D^{\text{ion}}(x) = \frac{N_D(x)}{1 + g_d e^{\frac{F - E_d}{kT}}}, \quad N_A^{\text{ion}} = \frac{N_A}{1 + g_a e^{\frac{E_a - F}{kT}}}, \quad (3)$$

где F – электрохимический потенциал (уровень Ферми), k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, E_d – энергетический уровень донорной примеси в запрещенной зоне, g_d – фактор вырождения донорного уровня, E_a – энергетический уровень акцепторной примеси в запрещенной зоне, g_a – фактор вырождения акцепторного уровня. Металлургическая граница n - p перехода расположена при $x = 0$, где выполняется условие $N^{\text{ion}}(0) = 0$.

Плотность заряженных состояний в поверхностной области задавалась в виде функции

$$N_s(x) = \begin{cases} N_{surf} \frac{w_{surf} - w_n - x}{w_{surf}}, & \text{при } -w_n \leq x < (w_{surf} - w_n), \\ 0, & \text{при } (w_{surf} - w_n) \leq x \leq w_p \end{cases}, \quad (4)$$

где w_{surf} – толщина поверхностного слоя. Плотность поверхностных состояний

$$N_{ss} = \int_{-w_n}^0 N_s(x) dx = \frac{1}{2} N_{surf} w_{surf}.$$

Концентрации электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ заданы формулами [8]:

$$n(x) = N_c e^{\frac{F - E_g + q\varphi(x)}{kT}}, \quad p(x) = N_v e^{\frac{-F - q\varphi(x)}{kT}}, \quad (5)$$

где N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, q – элементарный заряд, $\varphi(x)$ – потенциал внутреннего электрического поля, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_g – ширина запрещенной зоны, уровень Ферми F отсчитывается от вершины валентной зоны в точке $x = w_p$.

Потенциал внутреннего электрического поля является решением уравнения Пуассона:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p(x) - n(x) + N^{ion}(x) + N_s(x)), \quad (6)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость вещества, ε_0 – диэлектрическая постоянная, $N^{ion}(x)$ – концентрация ионизованных доноров и акцепторов.

Дополнительным условием для уравнения (6) является условие общей электронейтральности:

$$\int_{-w_n}^{w_p} (p(x) - n(x) + N^{ion}(x) + N_s(x)) dx = 0. \quad (7)$$

Из условия (7) следует, что

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p}. \quad (8)$$

В базе в равновесных условиях напряженность электрического поля $E(x) = -\frac{d}{dx} \varphi(x)$ равна нулю, тогда условие (8) принимает вид

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x \leq -w_n} = 0, \quad (9)$$

Выбор начала отсчета потенциала произволен, поэтому считаем, что $\varphi(w_p) = 0$. Используя условие локальной нейтральности базы, найдем равновесное значение F .

Из (9) следует, что $\varphi(x) = \varphi_0$ при $x \leq -w_n$. Константа φ_0 явно не задается, а определяется в итерационном процессе. В этом заключается отличие используемого численного метода решения уравнения Пуассона.

Уравнение (6) в разностной форме (10) решалось численно методом последовательных приближений.

$$\frac{\varphi^j(x-h) - 2\varphi^j(x) + \varphi^{j-1}(x+h)}{h^2} = -\frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(N_v e^{\frac{-F-q\varphi^j(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^j(x)}{kT}} + N^{ion}(x) + N_s(x) \right). \quad (10)$$

Краевые условия для уравнения (10): $\varphi^j(-w_n - h) = \varphi^j(-w_n)$, $\varphi^j(w_p) = 0$. В формуле (10) h – шаг дискретизации, j – номер итерации. Начальное приближение $\varphi^0(x)$ является решением уравнения локальной нейтральности

$$N_v e^{\frac{-F-q\varphi^0(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^0(x)}{kT}} + N^{ion}(x) + N_s(x) = 0. \quad (11)$$

Значения $\varphi^j(x)$ находим, решая алгебраические уравнения (10) во всех точках отрезка дискретизации от $x = -w_n$ до $x = w_p - h$, используя $\varphi^{j-1}(x)$. Итерационный процесс прекращается при достижении условия (7).

Результаты моделирования

Объектом моделирования являлся n - p переход в кремнии, созданный диффузией фосфора в подложку, легированную бором. В расчетах использованы следующие значения: поверхностная концентрация фосфора $N_{D0} = 10^{26} \text{ м}^{-3}$, концентрация бора в пластине $N_A = 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Диффузионный n - p переход, глубина залегания $w_n = 0.45 \cdot 10^{-6} \text{ м}$, является достаточно плавным, чтобы уменьшить эффект образования области, обогащенной электронами, в области пространственного заряда [9]. На рис. 1 продемонстрировано влияние знака поверхностного заряда на изменение $\varphi(x)$ в поверхностной области n - p перехода. В эмиттере n -типа поверхностные состояния в запрещенной зоне, расположенные ниже уровня Ферми, заряжены отрицательно, поэтому в формуле (4) $N_{surf} < 0$. В эмиттере p -типа $N_{surf} > 0$. В расчетах использованы следующие значения параметров формулы (4) $|N_{surf}| = 10^{26} \text{ м}^{-3}$, $w_{surf} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ м}$, так что $|N_{ss}| = 10^{17} \text{ м}^{-2}$.

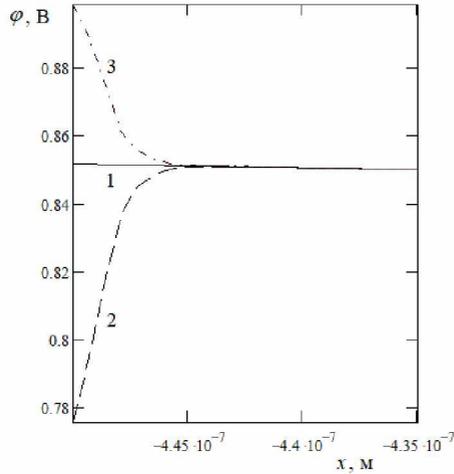


Рис. 1. Изменение электрического потенциала в поверхностной области.

$$1 - N_{ss} = 0; \quad 2 - N_{ss} = -10^{17} \text{ м}^{-2};$$

$$3 - N_{ss} = 10^{17} \text{ м}^{-2}$$

Условие $N_{ss} = 0$ соответствует отсутствию поверхностных состояний (рис. 1.), $N_{ss} = -10^{17} \text{ м}^{-2}$ – наличию отрицательно заряженных состояний ниже уровня Ферми на поверхности эмиттера n -типа (рис. 1.2), $N_{ss} = 10^{17} \text{ м}^{-2}$ – созданному положительному заряду на поверхности (рис. 1.3).

Поверхностные состояния существуют как нарушения трансляционной симметрии кристалла – таммовские поверхностные уровни, поверхностные состояния типа Шокли, состояния, обусловленные дефектами кристаллической решетки и примесными атомами. В зависимости от способа обработки поверхности [10], облучения ионизирующими частицами [11], состава атмосферы и других факторов плотность поверхностных электронных состояний принимает значения $10^{15} \div 10^{19} \text{ м}^{-2}$, толщина поверхностного слоя в кремнии $\sim 2 \cdot 10^{-9} \text{ м}$ [12].

Выводы

В теоретических моделях фотоэлектрических преобразователей влияние поверхностных состояний на вольтамперную характеристику учитывается посредством скорости поверхностной рекомбинации. Результаты расчетов показывают, что изменение электрического потенциала превышает kT при комнатной температуре вследствие существования электронных состояний в запрещенной зоне на поверхности эмиттера. Это означает суще-

ствование электрического поля, направляющего неосновные носители заряда к поверхности и повышающего скорость их рекомбинации. Для компенсации этого эффекта необходимо в 10 раз уменьшить плотность поверхностных состояний или изменить знак поверхностного заряда на противоположный.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Мельник Н.Н., Трезгулов В.В., Скопцова Г.Н., Иванов А.И., Косцов Д.С. Свойства p - n -перехода, сформированного в пленке пористого кремния, выращенной металл-стимулированным травлением // Краткие сообщения по физике ФИАН, 2022, № 9, С. 3–10.

2. Papež V., Hájek J., Koječký B. Influence of surface states on the reverse and noise properties of silicon power diodes // IET Circuits Devices Syst., 2014, V. 8, I. 3, P. 213–220.

3. Богатов Н.М., Корнеев А.И., Матвеев М.П., Родоманов Р.Р. Исследование влияния неравновесного заряда границы SiO_2 - Si на динамику спектральной чувствительности солнечных элементов с субмикронным p - n -переходом // Известия высших учебных заведений Северо-Кавказский регион. Технические науки, 2006, № 2, С. 52–54.

4. Богатов Н.М., Матвеев М.П., Першин Н.В., Родоманов Р.Р. Определение времени захвата неравновесного поверхностного заряда в полупроводниковых структурах по спаду тока короткого замыкания // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Естественные науки, 2008, №6, С. 39–41.

5. Симашкевич А.В., Шербан Д.А., Брук Л.И., Фёдоров В.М., Коваль А., Усатый Ю.В. Особенности механизма прохождения тока через изотипную структуру ITO/nSi // Электронная обработка материалов, 2010, № 1, С. 44–47.

6. Deng S., Xu R., Li M., Li L., Wang Z.L., Zhang Q. Influences of surface charges and gap width between p -type and n -type semiconductors on charge pumping // Nano Energy, 2020, V. 78, 105287, P. 1–7.

7. Мерер Х. Диффузия в твердых телах / Долгопрудный: Интеллект, 2011.

8. Шалимова К.В. Физика полупроводников / М.: Лань, 2010. 400 с

9. Богатов Н.М. Распределение заряда в резком несимметричном равновесном n - p -переходе // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества, 2016, №3, С. 12–17.

10. Яфаров Р.К. Влияние встроенного поверхностного потенциала на ВАХ кремниевых МДП структур // Микроэлектроника, 2019, Т. 48, № 2, С. 155–159

11. *Александров О.В.* Влияние интенсивности ионизирующего облучения на отклик МОП-структур // Физика и техника полупроводников, 2021, Т. 55, В. 2, С. 152–158.

12. *Юров В.М., Жанабергенов Т., Гученко С.А.* Толщина поверхностного слоя типичных полупроводников // The scientific heritage, 2020, No 43, P. 20–23.

Богатов Николай Маркович, д.ф.-м.н., профессор, ФГБОУ ВО «КубГУ», Россия, г. Краснодар, ул. Ставропольская 149, 350040, тел.: +7(903) 451-31-06, email: bogatov@phys.kubsu.ru.

Володин Владимир Сергеевич, аспирант, ФГБОУ ВО «КубГУ», Россия, г. Краснодар, ул. Ставропольская 149, 350040, тел.: +7(989) 820-36-72, email: volodinvs1995@mail.ru.

Григорьян Леонтий Рустемович, к.ф.-м.н., доцент, ФГБОУ ВО «КубГУ», Россия, г. Краснодар, ул. Ставропольская 149, 350040, тел.: +7(918) 168-17-19, email: leonmezon@mail.ru.

Коваленко Максим Сергеевич, к.ф.-м.н., доцент, ФГБОУ ВО «КубГУ», Россия, г. Краснодар, ул. Ставропольская 149, 350040, тел.: +7(918) 469-49-54, email: m.s.kovalenko@ya.ru.

Bogatov Nikolay Markovich, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Kuban State University, 350040, Russia, Krasnodar, 149, Stavropolskaya street, phone: +7(903) 451-31-06, email: bogatov@phys.kubsu.ru.

Volodin Vladimir Sergeevich, Graduate Student, Kuban State University, 350040, Russia, Krasnodar, 149, Stavropolskaya street, phone: +7(989) 820-36-72, email: volodinvs1995@mail.ru.

Grigoryan Leontiy Rustemovich, Candidate of Physics and Mathematics Sciences, Associate Professor, Kuban State University, 350040, Russia, Krasnodar, 149, Stavropolskaya street, phone: +7(918) 168-17-19, email: leonmezon@mail.ru.

Kovalenko Maxim Sergeevich, Candidate of Physics and Mathematics Sciences, Associate Professor, Kuban State University, 350040, Russia, Krasnodar, 149, Stavropolskaya street, phone: +7(918) 469-49-54, email: m.s.kovalenko@ya.ru.