ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

LIII 1971 3

УДК 537.311.33

ФИЗИКА

Член-корреспондент АН Армянской ССР Г. М. Авакьянц

О концентрации электронов в приконтактном слое полупроводника

(Представлено 26/III 1971)

До сих пор в теории контакта полупроводника с металлом или контакта двух полупроводников, при исследовании распределения электрического поля E вблизи контакта и изменения концетрации носителей тока n в этой области не учитывали квантовой природы носителей тока. Такое состояние теории является несколько логически незавершенным, так как, с другой стороны, квантовые эффекты в приконтактном слое двух твердых тел изучались весьма подробно.

К таким эффектам относится прежде всего тунельный эффект, зонная структура энергетического спектра частиц и ее изменения в приконтактном слое и т. д.

Правда, несмотря на то, что уравнения, определяющие E и n, оставались „классическими", ряд параметров, входящих в эти уравнения (например, подвижность, u, элементарных носителей заряда) с самого начала подсчитывались методами квантовой механики. Между тем, можно ставить задачу о квантовом обобщении самых основных уравнений. В принципе такое обобщение достигается сравнительно просто.

Прежде всего надо написать химический потенциал системы или даже свободную энергию, исходя из квантовой термодинамики (см. напр. ([1]). Однако, практически такой прямой метод преобразования „классического" выражения свободной энергии в квантовое оказывается мало эффективным. Дело в том, что полученное т. о. квантовое выражение выглядит сравнительно просто, лишь если квантовые поправки малы. Но тогда и обобщение является в таких случаях излишним. В своем же точном виде свободная энергия не может быть эффективно использована.

Остается путь построения уравнения менее точного, но более эффективного. Такой путь впервые предложен в связи с теорией сверхпроводимости В. Л. Гинзбургом и Л. Д. Ландау ([2]).

Действуя в духе идей В. Л. Гинзбурга и Л. Д. Ландау, мы можем сформулировать следующим образом основной шаг в наших рассуждениях, ведущий в конечном итоге к квантовому диффузионному уравнению. Будем вместо числа электронов (или дырок) в единице объема полупроводника рассматривать некоторую функцию ψ, которая будет считаться нормированной таким образом, что $n = |\psi|^2$. Естественно, что ψ не является истинной волновой функцией системы электронов (или дырок), но некоторым усредненным значением этой функции ([2]). Рассматривая систему электронов (или дырок) как идеальный газ, находящийся в электрическом поле, описываемым потенциалом Φ, мы можем свободную энергию системы записать через функцию ψ следующим образом:

$$F_{кл} = \varphi(T)|\psi|^2 + |\psi|^2 kT \ln|\psi|^2 + e\Phi|\psi|^2. \qquad (1)$$

Как известно, в квантовой механике с градиентом волновой функции связана определенная энергия, в связи с этим (и это есть второй основной шаг в рассуждениях В. Л. Гинзбурга и Л. Д. Ландау) мы должны дополнить классическую свободную энергию членом вида $\frac{h^2}{2m}|\nabla\psi|^2$, который аналогичен по смыслу плотности кинетической энергии в квантовой механике.

Таким образом мы принимаем, что, по крайней мере, пока $|\nabla\psi|$ мал, свободная энергия идеального газа, находящегося в электрическом поле должна выглядеть при квантово-механическом обобщении следующим образом:

$$F_{кв} = \varphi(T)|\psi|^2 + kT|\psi|^2\ln|\psi|^2 + e\Phi|\psi|^2 + \frac{h^2}{2m}|\nabla\psi|^2. \qquad (2)$$

Чтобы теперь построить диффузионное уравнение нам нужно найти квантовое выражение для химического потенциала $\mu_{кв}$.

Как известно ([1])

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial n}\right)_{T,V}, \qquad (3)$$

что в нашем случае должно быть записано так:

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial |\psi|^2}\right)_{T,V}. \qquad (4)$$

В дальнейшем мы ограничимся лишь действительными функциями ψ, в таком случае:

$$\mu_{кв} = \varphi'(T) + kT\ln\psi^2 + e\Phi - \frac{h^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi}{\psi}. \qquad (5)$$

Как известно, основным шагом при выводе диффузионного уравнения является предположение, что при отклонении системы от равновесия, возникающие при этом потоки частиц в первом приближении пропорциональны градиенту химического потенциала. Обозначая через $\vec{j}$ плотность тока, мы, следовательно, можем записать:

$$\bar{j} = -\gamma\nabla\mu_{ki} = -\gamma\left(kT\frac{\nabla\psi^2}{\psi^2} + e\nabla\Phi + \frac{h^2}{2m}\frac{\nabla\psi\nabla^2\psi - \psi\nabla^3\psi}{\psi^2}\right). \qquad (6)$$

Величина $u = \frac{\gamma}{n} = \frac{\gamma}{\psi^2}$ выражает собой скорость перемещающих частиц под действием единичной силы [3] и носит название подвижности. Следовательно выражение [6] мы можем еще записать в таком виде:

$$\bar{j} = -ukT\nabla\psi^2 - u\psi^2 e\nabla\Phi - u\frac{h^2}{2m}(\nabla\psi\nabla^2\psi - \psi\nabla^3\psi) \qquad (7)$$

Это и есть искомое квантовое обобщение диффузионного уравнения.

Уравнение (7) должно быть дополнено еще одним уравнением в силу того, что у нас две неизвестные функции ψ и Φ. Обычно таким является уравнение Пуассона, которое в случае полупроводиков в большинстве случаев пишется в следующем виде [4]:

$$\nabla^2\Phi = \frac{4\pi eP}{\varepsilon}\left(\frac{\psi_\infty^4}{\psi^2} - \psi^2\right). \qquad (8)$$

Здесь P—величина порядка единицы; ψ_∞^2—равновесная концентрация электронов (или дырок) вдали от контакта. Для случая одного измерения система наших уравнений принимает вид:

$$\frac{d^2\Phi}{dz^2} = \frac{4\pi eP}{\varepsilon}\left(\frac{\psi_\infty^4}{\psi^2} - \psi^2\right),$$

$$\frac{j}{u} = -kT\frac{d\psi^2}{dz^2} - \psi^2 e\frac{d\Phi}{dz} - \frac{h^2}{2m}\left(\frac{d\psi}{dz}\frac{d^2\psi}{dz^2} - \psi\frac{d^3\psi}{dz^3}\right). \qquad (9)$$

Обычная „классическая" система уравнений получается из уравнений (9) при $h \to 0$ и имеет вид:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\Phi}{dz^2} = 4\pi eP\left(\frac{\psi_\infty^4}{\psi^2} - \psi^2\right), \\ &\frac{j}{u} = -kT\frac{d\psi^2}{dz^2} - e\psi^2\frac{d\Phi}{dz}. \end{aligned} \qquad (10)$$

Мы теперь рассмотрим контакт двух полупроводников одного типа проводимости (электронной или дырочной) и найдем, исходя из системы (9), электрическое поле и концентрацию носителей заряда в приконтактном слое, при прихождении через последний тока. Затем мы сравним полученные результаты с результатами, полученными для того же примера, найденными с помощью системы (10) [4].

Граничные условия нашей задачи могут быть сведены к двум требованиям. Во-первых, на контакте должна быть непрерывной нормальная составляющая вектор электрической индукции.

Если мы выберем плоскость $z = 0$, как границу раздела двух полупроводников, то, следовательно, будем иметь:

$$\varepsilon' F'(0) = \varepsilon'' E''(0). \tag{11}$$

Здесь ε—диэлектрическая постоянная полупроводника. Один и два штриха различают, соответственно, величины, относящиеся к первому и второму полупроводнику. Второе граничное условие выражает факт равенства потока электронов из одного полупроводника в другой, в стационарном состоянии. Если принять, как это и имеет место обычно, что скорости приобретаемые электронами в электрическом поле внутри полупроводника малы по сравнению с тепловыми скоростями, то второе граничное условие может быть записано в наших обозначениях следующим образом [1].

$$\frac{\psi'(0)}{\psi'_\infty} = \frac{\psi''(0)}{\psi''_\infty}. \tag{12}$$

Решение системы (9) производим методом последовательных приближений. С этой целью ψ и E разлагаем в ряд по степеням проходящего через контакт тока j:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_\infty + \psi_1 + \psi_2 + \cdots \\ E &= E_1 + E_2 + E_3 + \cdots \end{aligned} \tag{13}$$

Подставляя ряды (13) в (9), и ограничиваясь первым приближением, получаем следующие уравнения для $E_1\left(= -\frac{d\Phi_1}{dz}\right)$ и ψ_1

$$\frac{h^2}{2m}\frac{d^3\psi_1}{dz^3} + e\psi_\infty E_1 - 2kT\frac{d\psi_1}{dz} = 0, \tag{14}$$

$$\varepsilon\frac{dE_1}{dz} = 16\pi eP\psi_\infty\psi_1$$

Дифференцируя первое уравнение по z и исключая из него с помощью второго уравнения $\frac{dE_1}{dz}$, получаем уравнение для ψ_1

$$\frac{h^2}{2m}\frac{d^4\psi_1}{dz^4} - 2kT\frac{d^2\psi_1}{dz^2} + \frac{16\pi e^2P\psi_\infty^2}{\varepsilon}\psi_1 = 0. \tag{15}$$

Легко проверить, что решение уравнения (15) можно записать в следующем виде:

$$\psi_1 = A\cos\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\sqrt{\beta-\alpha^2}}{(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}}z\cdot e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}z} +$$

$$+ B\cos\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\sqrt{\beta-\alpha^2}}{(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}}z\cdot e^{-\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}z}, \qquad (16)$$

Здесь A и B произвольные постоянные. Очевидно, что мы должны положить $A = 0$ для полупроводника, лежащего справа от плоскости $z = 0$, так как в глубине полупроводника ψ должно переходить в ψ_∞, а для полупроводника, лежащего слева от $z = 0$, напротив, принять $B = 0$. Далее в (16) введены следующие сокращенные обозначения:

$$\alpha = \frac{2mkT}{h^2}, \qquad \beta = \frac{32\pi e^2 Pm\psi_\infty^2}{\varepsilon h^2}, \qquad (17)$$

Подставляя во второе уравнение (14) вместо ψ_1 его выражение из (16) получаем следующее решение для E:

$$E_1 = E_0 + A\frac{16\pi eP\psi_\infty}{\varepsilon\sqrt{\beta}}[\gamma\cos\delta z + \delta\sin\delta z]\,e^{\gamma z} +$$

$$+ B\frac{16\pi eP\psi_\infty}{\varepsilon\sqrt{\beta}}[-\gamma\cos\delta z + \delta\sin\delta z]\,e^{-\gamma z}, \qquad (18)$$

где:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}, \qquad \delta = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\sqrt{\beta-\alpha^2}}{(\alpha+\sqrt{\beta})^{1/2}}. \qquad (19)$$

Постоянная E_0 есть поле внутри полупроводника на большом расстоянии от контакта (при $z = \pm\infty$) и связана с током, проходящим через полупроводник соотношением:

$$E_0 = \frac{j}{eu\psi_\infty^2}. \qquad (20)$$

Решение (16), как видно из самой формулы, справедливо пока $\beta > \alpha^2$. Как было указано выше, в каждом из полупроводников отлична от нуля лишь одна постоянная из A и B. Мы должны, следовательно, написать ψ_1 и E_1 для первого и второго полупроводника в виде:

$$E_1 = a'\frac{16\pi eP'\psi'_\infty}{\varepsilon'\sqrt{\beta'}}[-\gamma'\cos\delta' z + \delta\sin\delta' z]\,e^{-\gamma' z} + E_0$$

$$\psi_1 = a'\cos\delta' z\, e^{-\gamma' z} \qquad z > 0 \qquad (21)$$

$$E''_1 = a'' \frac{16\pi e P'' \psi''_-}{\varepsilon'' \sqrt{\beta''}} \left[\gamma'' \cos \delta'' z + \delta'' \sin \delta'' z\right] e^{\gamma'' z} + E''_0$$

$$\psi''_1 = a'' \cos \delta'' z e^{\gamma'' z} \qquad z < 0 \tag{22}$$

С помощью граничных условий находим следующие выражения для постоянных a' и a'':

$$\frac{a'}{\psi'_-} = -\frac{a''}{\psi''_-} = \frac{\varepsilon' E'_0 - \varepsilon'' E''_0}{\dfrac{16\pi e P' \gamma' \psi'^2_-}{\sqrt{\beta'}} + \dfrac{16\pi e P'' \gamma'' \psi''^2_-}{\sqrt{\beta''}}} . \tag{23}$$

Решение той же задачи, исходя из „классической" системы уравнений (10), приводит к следующим результатам:

$$\psi'_1 = a' e^{-\mu' z}, \quad E'_1 = E'_0 - a' \frac{16\pi e P' \psi'_-}{\varepsilon' \mu'} e^{-\mu' z}, \quad z > 0$$

$$\psi''_1 = a'' e^{\mu'' z}, \quad E''_1 = E''_0 + a'' \frac{16\pi e P'' \psi''_-}{\varepsilon'' \mu''} e^{\mu'' z}, \quad z < 0 \tag{24}$$

Причем:

$$\frac{a'}{\psi'_-} = -\frac{a''}{\psi''_-} = \frac{\varepsilon' E'_0 - \varepsilon'' E''_0}{\dfrac{16\pi e P' \psi'^2_-}{\mu'} + \dfrac{16\pi e P'' \psi''_-}{\mu''}} . \tag{25}$$

$$\mu = \sqrt{\frac{8\pi e^2 P \psi^2_-}{\varepsilon k T}} .$$

Сравнивая полученные результаты, мы видим, что квантовое диффузионное уравнение при низких температурах и высоких концентрациях вносит существенное изменение в результат, получаемый с помощью „классического" уравнения по двум пунктам. Во-первых: в то время как по „классике" размеры области в приконтактном слое, в котором происходит изменение концентрации носителей заряда по сравнению с концентрацией их в глубине полупроводника, определяется величиной обратной

$$\mu = \sqrt{\frac{8\pi e^2 P \psi^2_-}{\varepsilon k T}} , \tag{26}$$

квантовое уравнение вместо (26) дает другую величину, а именно:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{2mkT}{h^2} + \sqrt{\frac{32\pi e^2 P \psi^2_- m}{\varepsilon h^2}} \right]^{1/2} . \tag{27}$$

В силу условия $\beta > \alpha^2$ второй член в скобках больше первого и тогда γ слабо зависит от тепературы, а по величине становится меньше μ. Факт слабой зависимости размеров области, в которой разыгрываются изменения концентрации носителей тока от температуры при $\beta > \alpha^2$ является одним из наиболее интересных выводов нового уравнения.

Во-вторых, новое уравнение приводит к „тонкой структуре" приконтактного слоя, что выражается в осцилляции концентрации носителей заряда вблизи контакта.

Это видно из наличия в выражении для ψ_1, по новому уравнению $\cos \delta z$:

$$\psi_1 = a \cos \delta z \cdot e^{-\mu z} \tag{28}$$

в то время как „классическое" уравнение дает просто:

$$\psi_1 = a e^{-\mu z}. \tag{29}$$

При $h \to 0$ (28) не переходит в (29).

Если $\beta < \alpha^2$, то общее решение уравнения (15) таково:

$$\psi_1 = Ae^{\gamma_1 z} + Be^{\gamma_2 z} + Ce^{\gamma_3 z} + De^{\gamma_4 z}, \tag{30}$$

где

$$\gamma_{1,2} = \pm \left[\frac{2mkT}{h^2} + \sqrt{\frac{4m^2k^2T^2}{h^4} - \frac{35\pi e^2 Pm \psi_-^2}{\varepsilon h^2}} \right]^{1/2},$$
$$\gamma_{3,4} = \pm \left[\frac{2mkT}{h^2} - \sqrt{\frac{4m^2k^2T^2}{h^4} - \frac{32\pi e^2 Pm \psi_-^2}{\varepsilon h^2}} \right]^{1/2}. \tag{31}$$

Очевидно в этом случае требуя, чтобы ψ переходило в ψ_- при $z = \pm \infty$ мы должны либо положить $A = C = 0$, если полупроводник находится справа от плоскости $z = 0$, либо $B = D = 0$, если полупроводник находится слева. Здесь при $h \to 0$ решение (30) переходит в (29). Если же $h \neq 0$, то как мы указали, ψ_1, например справа от $z = 0$ имеет вид:

$$\psi_1 = Ae^{-(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta})z} + Ce^{-(\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \beta})z}. \tag{32}$$

Отметим, что с учетом квантовых эффектов состояния полупроводника могут быть, вообще говоря, различными, так что помимо состояния, отвечающего абсолютному минимуму свободной энергии при равновесии (мы изучали небольшие отклонения из состояний равновесия), существуют еще состояния —„метастабильные"—, отвечающие относительному минимуму F.

Институт радиофизики и электроники
Академии наук Армянской ССР

Հայկական ՍՍՀ ԳԱ թղթակից-անդամ Գ. Մ. ԱՎԱԿՅԱՆՑ

Կիսահաղորդիչների ներքոնտակտային շերտում էլեկտրոնների կոնցենտրացիայի մասին

Հոսանքի կլասիկ հավասարումը ընհանրացվում է այն դեպքի համար, երբ էական է դառնում հոսանքակիրների քվանտային բնույթի ազդեցությունը կիսահաղորդիչի ենթակոնտակտային երևույթներում։ Նոր հավասարման հիման վրա հաշվվում է էլեկտրոնների կոնցենտրացիան կիսահաղորդիչի ենթակոնտակտային շերտում։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *Л. Ландау* и *Е. Лифшиц*, Статистическая физика, 1950. [2] *В. Л. Гинзбург* и *Л. Д. Ландау*, ЖЭТФ, т. 20, 1064 (1950). [3] *Л. Гуревич*, Основы физической кинетики, М., 1937. [4] *Д. Блохинцев* и *Б. Давыдов*, ДАН СССР, т. 21, 20 (1938).