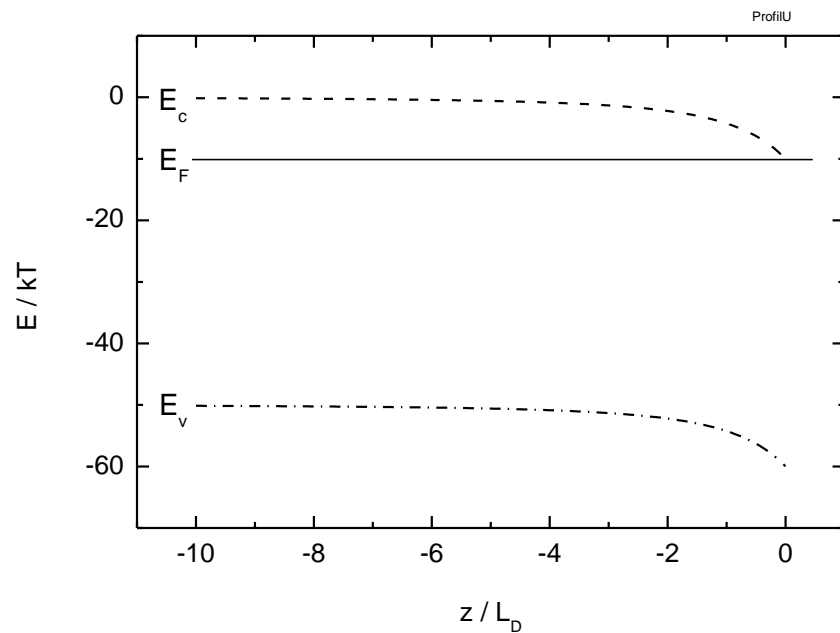


## 9. Vrstva prostorového náboje u rozhraní

Vznikne-li mezi objemem krystalu a rozhraním s jiným prostředím (i povrchem) potenciálový rozdíl, přerozdělí se volně pohyblivé náboje v krystalu a vytvoří tzv. oblast (vrstvu) prostorového náboje. Tato vrstva stíní elektrické pole, které bychom pozorovali v případě absence volně pohyblivých nábojů. Rovnovážné rozložení náboje závisí na potenciálovém rozdílu na rozhraní, na koncentraci volných nábojů, na statické permitivitě a na teplotě. Rovnováha se nastaví tak, že tendence elektrického pole přitáhnout nebo odtlačit volné náboje k nebo od rozhraní je v rovnováze s tendencí plynout volných nosičů k rovnoměrnému rozptýlení do celého objemu krystalu.

Pro kvalitativní popis vybereme jako příklad situaci, kdy je potenciálový rozdíl  $\Delta\varphi$  způsoben přítomností nekonečně tenké vrstvy kladného náboje s plošnou hustotou  $\eta$  a objem krystalu má elektronovou vodivost. První předpoklad znamená, že potenciál na rozhraní je větší než v objemu (kladná testovací částice zvyšuje při přiblížení k vrstvě kladného náboje svou potenciální energii, je touto vrstvou odpuzována). Volně pohyblivé (kvazi)elektrony jsou naopak kladným nábojem na rozhraní přitahovány. Při teplotě absolutní nuly by se na rozhraní vytvořila nekonečně tenká vrstva záporného náboje s plošnou hustotou  $-\eta$ , stínící dokonale elektrické pole kladného náboje. Při konečné teplotě vede tepelný pohyb elektronů k rozšíření této vrstvy. Schematicky je tento stav nakreslen v obrázku dole jako závislost energií dna vodivostního pásu  $E_c$  a vrcholu valenčního pásu  $E_v$  na souřadnici  $z$ . Symbol  $E_F$  znamená chemický potenciál (v běžném vyjadřování " Fermiho energii "), který je v rovnováze nezávislý na  $z$ .



Pásové energie u nabitého rozhraní.

### Rovnováha ve vrstvě prostorového náboje

Kvantitativní popis musí respektovat souvislost potenciálu  $\varphi(z)$  s hustotou náboje  $\rho(z)$  danou Poissonovou rovnicí

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi}{\varepsilon}\rho(z), \quad (9.1)$$

kde  $\varepsilon$  je statická dielektrická konstanta krystalu. Při praktickém provádění výpočtů je třeba dbát na použitou soustavu jednotek. Vztah (9.1) je platí v soustavě cgs, v SI je statická permitivita  $\varepsilon$  nahrazena součinem  $4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r$ , kde  $\varepsilon_r$  je bezrozměrná relativní permitivita a  $\varepsilon_0$  permitivita vakua ( $8.854\text{E-}12$  F/m):

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = -\frac{1}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\rho(z). \quad (9.1 \text{ SI})$$

V homogenní vrstvě izolátoru tloušťky  $d$ , s přiloženým napětím  $U$ , dává Poissonova rovnice konstantní intenzitu elektrického pole  $U/(d\varepsilon_0\varepsilon_r)$  a kvadratickou závislost potenciálu na poloze. Kapacita  $C$  (náboj na jednotkové napětí) kondenzátoru s plochou  $S$  je  $\varepsilon_0\varepsilon_r S/d$ ; relativní statická permitivita křemíku je přibližně 11.4, což dává kapacitu plochy  $1 \text{ cm}^2$  při tloušťce 1 mm zhruba 10.4 pF.

V přítomnosti volně pohyblivých nosičů náboje (vybereme elektrony) je dále ve hře statistická souvislost koncentrace volných elektronů  $n(z)$  a vzájemné polohy dna vodivostního pásu

$$E_c(z) = E_{cB} - e\varphi(z) \quad (9.2)$$

a Fermiho energie  $E_F$ ; zde jsme limitní hodnotu  $E_c$  v objemu krystalu ( $z \rightarrow -\infty$ ) označili jako  $E_{cB}$ . Pro parabolickou disperzní relaci s efektivní hmotností  $m^*$  je koncentrace elektronů dána hustotou stavů

$$D(E) = V \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m^*)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E - E_c} \quad \text{pro } E > E_c, \quad (9.3)$$

$$D(E) = 0 \quad \text{pro } E < E_c$$

a Fermi-Diracovou statistikou,

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} . \quad (9.4)$$

S uvážením spinové degenerace orbitálních stavů je tedy hustota elektronů

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m^*)^{3/2}}{\hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c}}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} dE . \quad (9.5)$$

S pomocí symbolu pro Fermi-Diracovy integrály můžeme vztah pro koncentraci přepsat jako

$$n(z) = N_c F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_{cB} - e\varphi(z)}{kT}\right) , \quad (9.6)$$

kde

$$N_c = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{(m^* kT)^{3/2}}{\hbar^3} . \quad (9.7)$$

Poznámka: v limitě použitelnosti klasické statistiky použijeme vztah (8.19) a pro koncentraci dostaneme z (9.6) přibližný výsledek

$$n(z) = 2 \frac{(2\pi m^* kT)^{3/2}}{8\pi^3 \hbar^3} \exp\left(\frac{E_F - E_{cB} - e\varphi(z)}{kT}\right) , \quad (9.6a)$$

což je modifikovaný vztah (8.21) s polohovou závislostí potenciálu elektronů.

Pro další rozbor zjednodušíme zápisy zavedením dvou bezrozměrných veličin

$$u(z) = \frac{e\varphi(z)}{kT}, \quad \alpha = \frac{E_F - E_{cB}}{kT}, \quad (9.8)$$

koncentraci elektronů v objemu označíme  $n_B$ . Z Poissonovy rovnice (9.1) dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dz^2} &= -\frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{e}{kT} e [n_B - n(z)] = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon kT} N_c [F_{1/2}(\alpha) - F_{1/2}(\alpha + u)] \\ &= -\frac{4\pi e^2 N_c F_{1/2}(\alpha)}{\varepsilon kT} \left[ 1 - \frac{F_{1/2}(\alpha + u)}{F_{1/2}(\alpha)} \right] = -\frac{1}{L_D^2} \left[ 1 - \frac{F_{1/2}(\alpha + u)}{F_{1/2}(\alpha)} \right], \end{aligned} \quad (9.9)$$

kde jsme použili označení

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{4\pi e^2 N_c F_{1/2}(\alpha)}} = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{4\pi e^2 n_B}} \quad (9.10)$$

pro tzv. Debyeovu stínicí délku v objemu krystalu. V soustavě SI:

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_o \varepsilon_r kT}{e^2 n_B}}. \quad (9.10 \text{ SI})$$

Nelineární diferenciální rovnici (9.9) druhého řádu pro redukovaný potenciál  $u(z)$  lze pomocí jednoduchého triku převést na rovnici prvního řádu:

$$2 \frac{du}{dz} \frac{d^2u}{dz^2} dz = d \left[ \left( \frac{du}{dz} \right)^2 \right] = 2 \frac{du}{dz} \left\{ -\frac{1}{L_D^2} \left[ 1 - \frac{F_{1/2}(\alpha + u)}{F_{1/2}(\alpha)} \right] \right\} dz, \quad (9.11)$$

neboli

$$\left( \frac{du}{dz} \right)^2 = \frac{2}{L_D^2} \int_{-\infty}^{u(z)} \left[ -1 + \frac{F_{1/2}(\alpha + t)}{F_{1/2}(\alpha)} \right] dt = \frac{2}{L_D^2} \left[ -u + \frac{2}{3} \frac{F_{3/2}(\alpha + u) - F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)} \right]. \quad (9.12)$$

Zde jsme využili následující vlastnost Fermi-Diracových integrálů,

$$\frac{d}{dt} F_j(t) = j F_{j-1}(t). \quad (9.13)$$

kterou můžeme prověřit přímo z definičních vztahů.

Derivace redukovaného potenciálu podle souřadnice je tedy podle (9.12)

$$\frac{du}{dz} = \frac{\sqrt{2}}{L_D} F(u, \alpha), \quad (9.14)$$

kde

$$F(u, \alpha) = \pm \sqrt{-u + \frac{2}{3} \frac{F_{3/2}(\alpha + u) - F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)}} \quad (9.15)$$

se znaménkem + pro kladné  $u$  a znaménkem – pro záporné  $u$ .

Přepíšeme-li vztah (9.14) do tvaru

$$\frac{du}{F(u, \alpha)} = \frac{\sqrt{2}}{L_D} dz, \quad (9.16)$$

můžeme dostat hledanou závislost potenciálu na souřadnici v implicitním tvaru další integrací:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \int_{u(0)}^{u(z)} \frac{dt}{F(t, \alpha)} = \frac{z}{L_D}. \quad (9.17)$$

Dobrou představu o monotónní závislosti  $u(z)$  můžeme získat tak, že ji aproximujeme exponenciálou

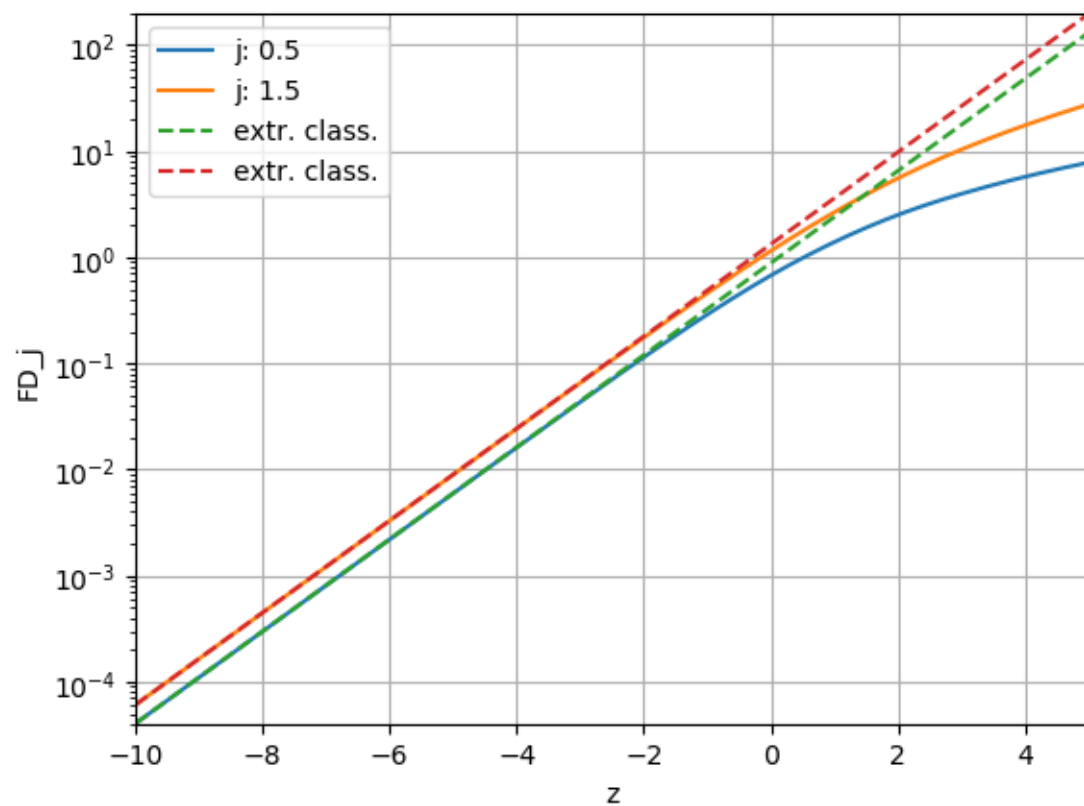
$$u(z) \approx u(0) \exp\left(\frac{z}{L}\right) \quad (9.18)$$

tak, aby její derivace podle  $z$  v bodě  $z = 0$  souhlasila se správnou hodnotou podle vztahu (9.14), neboli dávala správnou hodnotu intenzity elektrického pole na rozhraní. Tuto podmínku splňuje (efektivní stínící) délka

$$L = L_D \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{u(0)}{F[u(0), \alpha]}. \quad (9.19)$$

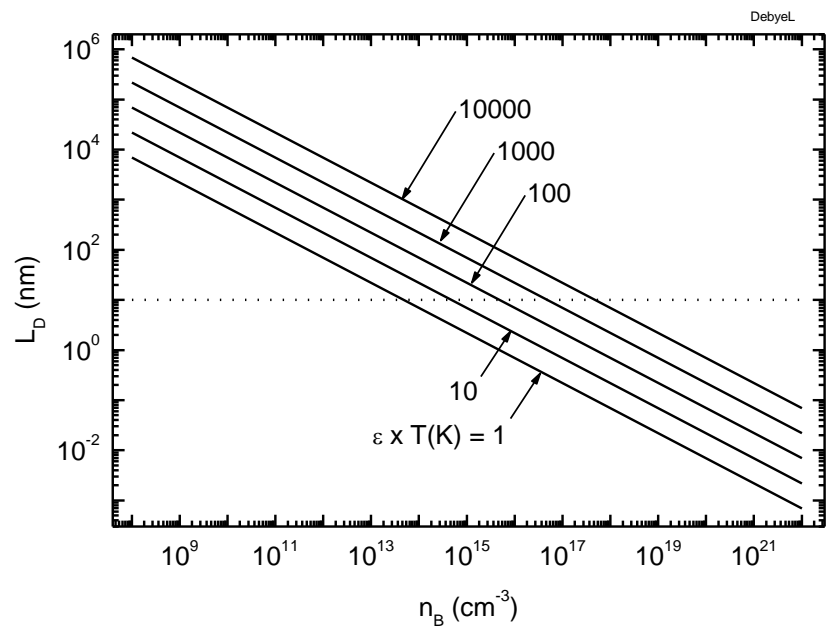
Debyeova stínící délka (9.10) je vhodnou veličinou pro rychlou orientaci. V následujícím obrázku je nakreslena pro široký rozsah koncentrací volných nosičů v objemu materiálu; pro relativní permitivitu 10 a teplotu 300 K dosahuje hodnoty 10 nm pro koncentraci zhruba  $1E17 \text{ cm}^{-3}$ .

Fermi-Dirac int.



Fermi-Diracovy integrály indexu  $1/2$  a  $3/2$ , vhodné k posouzení platnosti klasické limity ( $z \rightarrow -\infty$ ) při větších hodnotách  $z$ .





Debyeova stínící délka v závislosti na koncentraci volných nosičů, pro několik hodnot součinu relativní permitivity a teploty.

Efektivní stínící délka ze vztahu (9.19) je (jako násobek Debyeovy délky) nakreslena ve dvou následujících obrázcích.

Pro kladné hodnoty redukovaného potenciálu (jde o vrstvu obohacenou o elektrony) a tloušťka vrstvy prostorového náboje s růstem potenciálu klesá. Parametr  $\alpha$  udává polohu Fermiho energie vůči dnu vodivostního pásu v objemu, záporné hodnoty znamenají Fermiho energii uvnitř pásu zakázaných energií.

Pro záporné hodnoty redukovaného potenciálu jde o ochuzenou vrstvu a tloušťka vrstvy prostorového náboje s růstem velikosti potenciálu roste. V oblasti použitelnosti klasické statistiky („daleko od degenerace“) použijeme aproximace Fermi-Diracových integrálů exponenciálami (pro  $z$  záporné s velkou absolutní hodnotou)

$$F_{1/2}(z) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(z), \quad F_{3/2}(z) \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \exp(z) \quad (9.20)$$

a funkci  $F$  ze vztahu (9.15) nahradíme vztahem

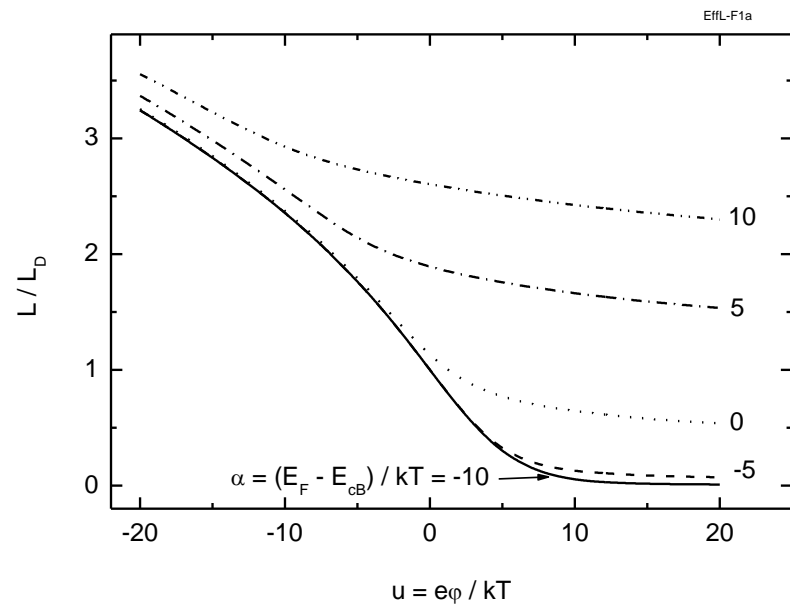
$$F(u, \alpha) \approx -\sqrt{-u + \frac{\exp(\alpha + u) - \exp(\alpha)}{\exp(\alpha)}} = -\sqrt{-u + \exp(u) - 1}. \quad (9.21)$$

Efektivní stínicí délka (9.19) je pak

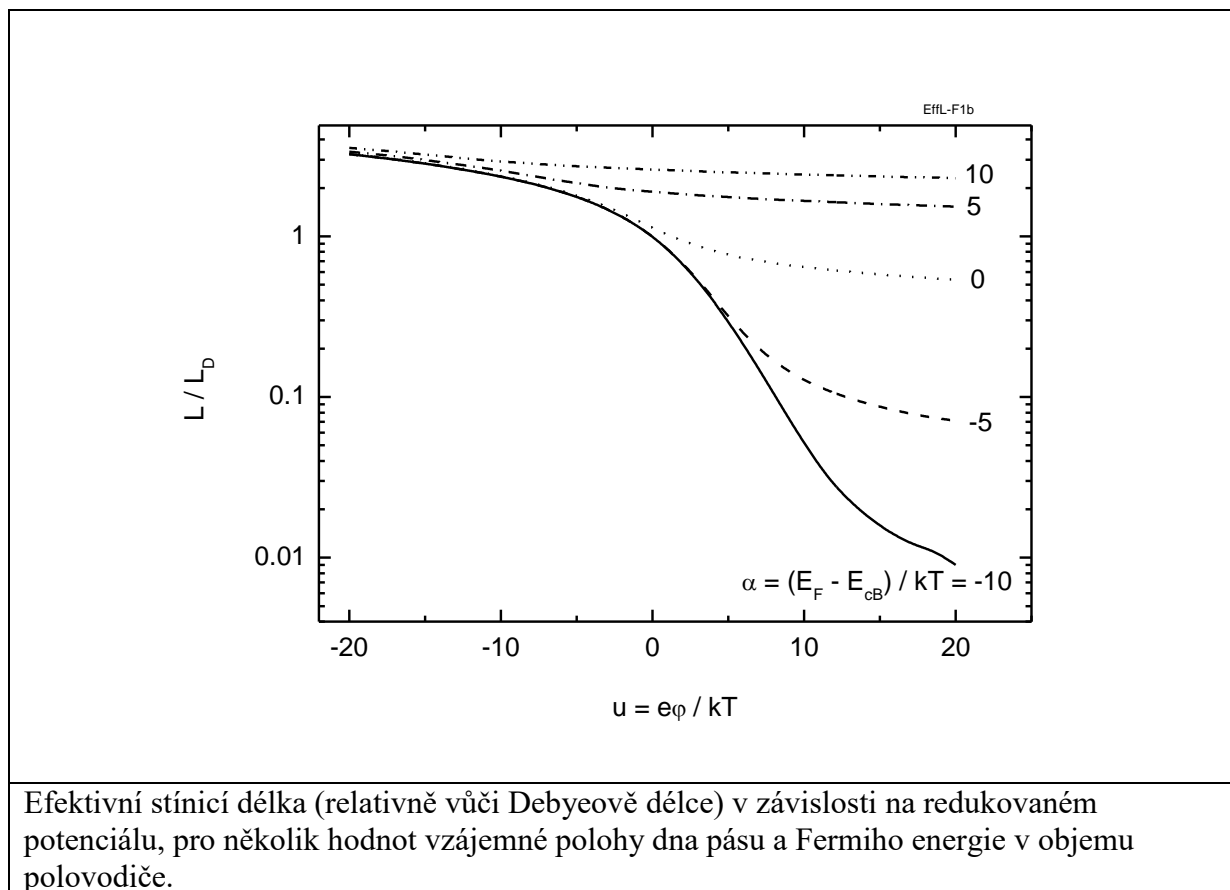
$$L = L_D \sqrt{\frac{-u(0)}{2}} \quad \text{pro } -u(0) \gg 1. \quad (9.22)$$

Naopak, pro malé hodnoty  $|u|$  je

$$F(u, \alpha) \approx -\sqrt{-u + 1 + u + \frac{u^2}{2} - 1} = -\frac{|u|}{\sqrt{2}} \Rightarrow L \approx L_D. \quad (9.23)$$



Efektivní stínicí délka (relativně vůči Debyeově délce) v závislosti na redukovaném potenciálu, pro několik hodnot vzájemné polohy dna pásu a Fermiho energie v objemu polovodiče.



Chování ochuzené vrstvy můžeme ještě snadno posoudit v případě silné degenerace (velké koncentrace volných nosičů a/nebo nízké teploty). Použijeme aproximace Fermi-Diracových integrálů pro velké kladné  $z$  (integrand v definičním vztahu (8.17) aproximujeme funkcí  $t^j$  pro  $t < z$  a nulou pro  $t > z$ ):

$$F_j(z) \approx \frac{z^{j+1}}{j+1} . \quad (9.24)$$

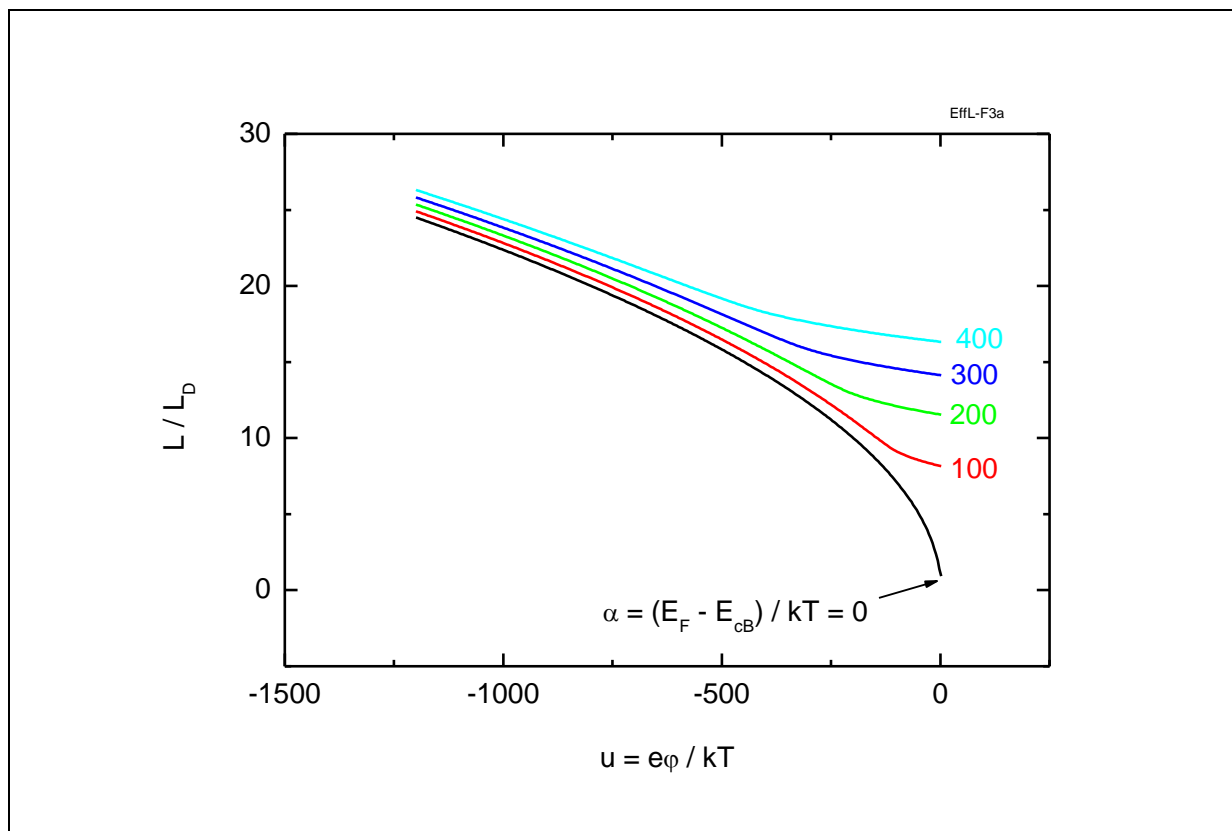
Funkce  $F$  ze vztahu (9.15) je přibližně

$$F(u, \alpha) \approx -\sqrt{-u + \frac{2}{5} \frac{(\alpha + u)^{5/2} - \alpha^{5/2}}{\alpha^{3/2}}} . \quad (9.25)$$

Při výpočtu efektivní stínící délky (9.19) je třeba zvláštní pozornost věnovat okolí nulové hodnoty bezrozměrného potenciálu  $u$ ; z Taylorova rozvoje v (9.25) do druhého řádu v  $u$  dostaneme například

$$L = L_D \sqrt{\frac{2\alpha}{3}} \quad \text{pro } u(0) = 0 . \quad (9.26)$$

Představu o ochuzené vrstvě v podmínkách významné degenerace dává následující obrázek.



Efektivní stínící délka (relativně vůči Debyeově délce) ochuzené vrstvy v závislosti na redukovaném potenciálu, pro několik hodnot vzájemné polohy dna pásu a Fermiho energie v objemu polovodiče.

Pro Fermiho energii 100 meV ve vodivostním pásu a teplotu 4 K je hodnota parametru  $\alpha$  zhruba 300, efektivní stínící délka pro potenciál 300 meV na okraji ochuzené vrstvy je pak zhruba 25-násobkem Debyeovy délky.

## Kapacita vrstvy prostorového náboje

Vrstva prostorového náboje se očividně chová jako kondenzátor. Pro výpočet jeho kapacity použijeme nejlépe Poissonovu rovnici (9.1) přepsanou pro hustotu náboje následujícím způsobem:

$$\rho(z) = -\frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = -\frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{kT}{e} \frac{d^2u(z)}{dz^2} . \quad (9.27)$$

Pro druhou derivaci redukovaného potenciálu máme ovšem vztah (9.9), tedy

$$\rho(z) = \frac{\varepsilon kT}{4\pi e L_D^2} \left[ 1 - \frac{F_{1/2}[\alpha + u(z)]}{F_{1/2}(\alpha)} \right] . \quad (9.28)$$

Pro jednoduchost však vezmeme exponenciální závislost na poloze ze vztahů (9.18) a (9.19); po dvojitým derivování dostaneme

$$\rho(z) = -\frac{\varepsilon kT}{4\pi e L^2} u(0) \exp\left(\frac{z}{L}\right) . \quad (9.29)$$

Náboj vrstvy na jednotkovou plochu dostaneme integrací přes  $z$  do místa s redukovaným potenciálem  $u(0)$ :

$$Q_s = \int_{-\infty}^0 \rho(z) dz = -\frac{\varepsilon kT}{4\pi e L} u(0) = -\frac{\varepsilon}{4\pi L} \varphi(0) . \quad (9.30)$$

Kapacita jednotkové plochy je

$$C_s = \left| \frac{Q_s}{\varphi(0)} \right| = \frac{\varepsilon}{4\pi L} . \quad (9.31)$$

Tato veličina je závislá na potenciálu, protože na něm závisí délka  $L$ . Pro malé zakřivení pásů (blízko stavu „flat-band“) je podle (9.23), (9.10) a (9.6a) je kapacita přibližně nezávislá na potenciálu na povrchu:

$$C_{s0} = \frac{\varepsilon}{4\pi L_D} = \sqrt{\frac{\varepsilon e^2 n_B}{4\pi kT}} = \sqrt{\frac{\varepsilon e^2 (m^*)^{3/2} (2\pi kT)^{1/2}}{8\pi^3 \hbar^3}} \exp\left(\frac{E_F - E_{cB}}{2kT}\right). \quad (9.32)$$

Kapacita jednotkové plochy je tedy dána pouze permitivitou a Debyeovou stínící délkou; v SI:

$$C_{s0} = \frac{\varepsilon_o \varepsilon_r}{L_D}. \quad (9.32 \text{ SI})$$

S relativní statickou permitivitou křemíku 11.4 dává plocha  $1 \mu\text{m}^2$  při Debyeově délce 10 nm kapacitu (pro malé povrchové potenciály) zhruba 10.1 pF.

Závislost na povrchovém potenciálu sleduje nepřímou úměrnost efektivní stínící tloušťce:

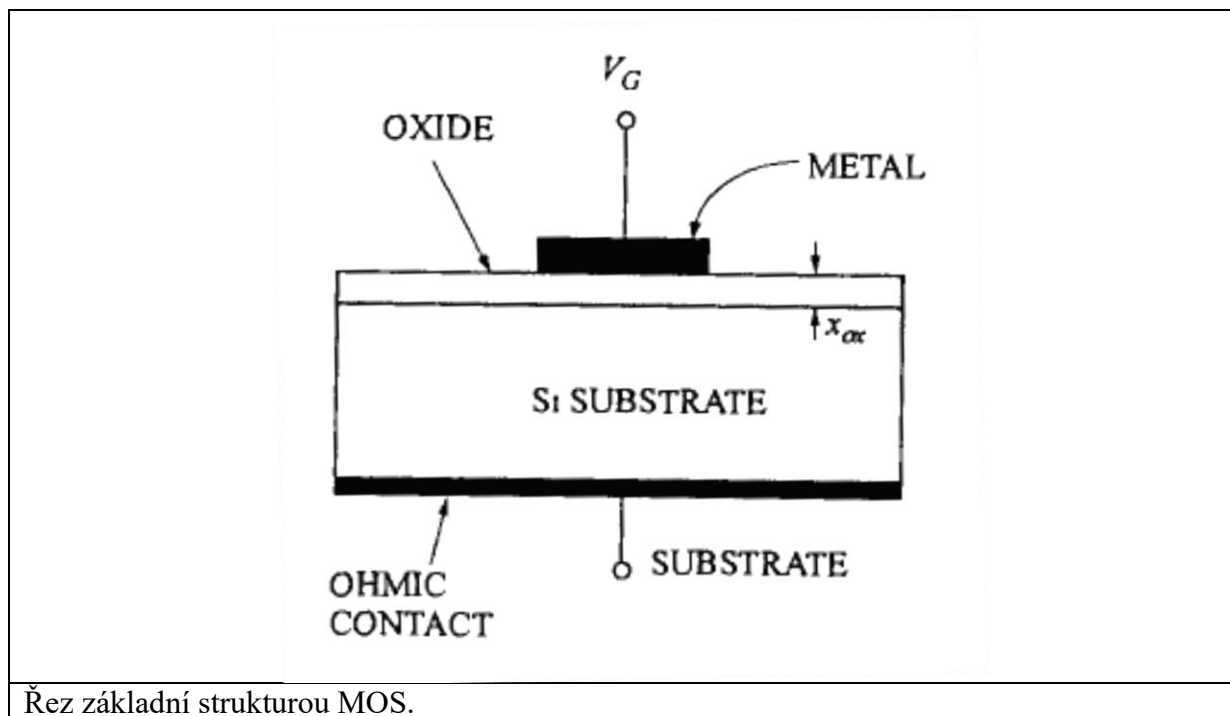
$$C_s = \frac{C_{s0}}{L/L_D}. \quad (9.33)$$

Diferenciální kapacita jednotkové plochy je

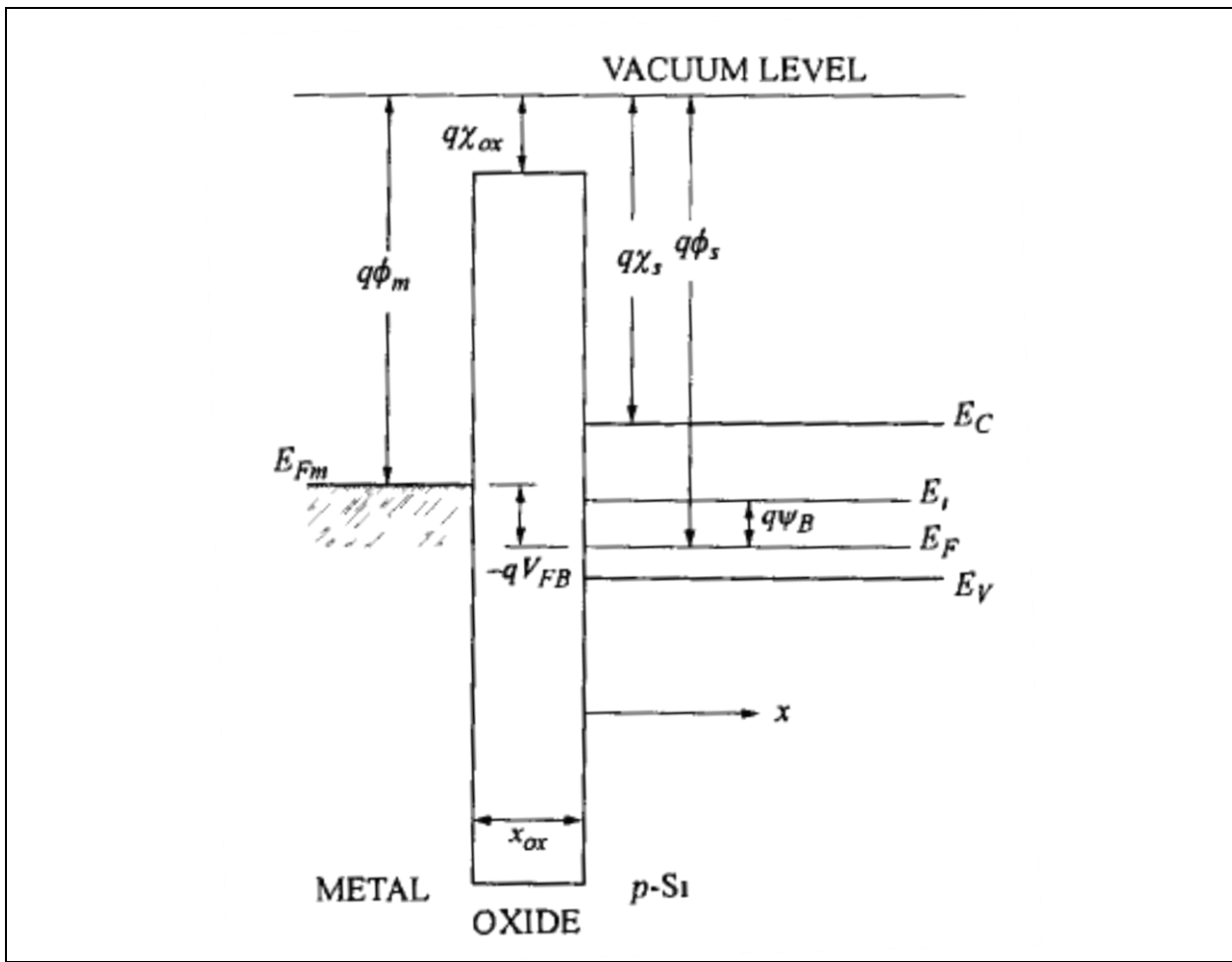
$$C_{sd} = \left| \frac{dQ_s}{d\varphi(0)} \right|. \quad (9.34)$$



## Kondenzátor MOS



Řez základní strukturou MOS.



Pásové schéma struktury MOS, stav flat-band.

