

Лекции 11-12

Генерация электроиндуцированной ВГ

Поле волны ВГ $\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{R}, 2\omega) \exp(i(2\omega t - \mathbf{k}_{2\omega}\mathbf{R}))$, в точке наблюдения \mathbf{R} есть решение неоднородного волнового уравнения

$$\left(\nabla \times \nabla \times - (2\omega/c)^2 \varepsilon\right) \mathbf{E}(2\omega) = 4\pi(2\omega/c)^2 \mathbf{P}^{NL}(2\omega), \quad (1)$$

с вектором нелинейной поляризации \mathbf{P}^{NL} в правой части в качестве источника; ε - диэлектрическая проницаемость среды на частоте ВГ. Формально, решение уравнения (8) может быть записано через тензорную функцию Грина $\vec{G}(\mathbf{R}, \mathbf{r}', 2\omega)$, являющейся решением волнового уравнения с точечным источником:

$$\left(\nabla \times \nabla \times - (2\omega/c)^2 \varepsilon\right) \vec{G}(\mathbf{R}, \mathbf{r}', 2\omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{1}. \quad (2)$$

Амплитуда поля ВГ является интегральной сверткой функции Грина и нелинейной поляризации:

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, 2\omega) = \int \vec{G}(\mathbf{R}, \mathbf{r}', 2\omega) \mathbf{P}^{NL}(\mathbf{r}', 2\omega) d\mathbf{r}', \quad (3)$$

Интегрирование в (10) ведется по всему пространству. В рассматриваемом случае оно сводится к интегрированию по области, где $\mathbf{P}^{NL} \neq 0$, т.е. по объему полупроводника. Если электростатическое поле \mathbf{E}_0 направлено по нормали к границе раздела, то трансляционная симметрия в плоскости $\mathbf{x}\mathbf{y}$ сохраняется и интегрирование в (10) ведется только по z . Для геометрии на отражение электроиндуцированная компонента поля ВГ $\mathbf{E}^{BD}(\mathbf{R}, 2\omega)$ задается как

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{BD}(\mathbf{R}, 2\omega) &= F_{2\omega} F_{\omega}^2 \chi_{eff}^{BD} I_{\omega} \mathbf{p} \exp(i\mathbf{k}_{2\omega}\mathbf{R}) \times \\ &\times \int_0^{+\infty} E_0(z') \exp(i(k_{2\omega,z} + 2k_{\omega,z})z') dz', \end{aligned} \quad (4)$$

где $\mathbf{k}_{2\omega}$ - волновой вектор волны ВГ, χ_{eff}^{BD} - линейная комбинация компонент кубичной восприимчивости $\chi^{(3),BD}$, определяемая геометрией эксперимента и кристаллографической ориентацией границы раздела, I_{ω} - интенсивность накачки, а $k_{\omega,z}$ и $k_{2\omega,z}$ - нормальные компоненты волновых векторов накачки и ВГ, соответственно. Единичный вектор \mathbf{p} определяет поляризацию поля ВГ, а F_{ω} и $F_{2\omega}$ - коэффициенты, учитывающие френелевские факторы для прохождения волн накачки и ВГ, а также поправки на многолучевую интерференцию в оксидной пленке.

При $\mathbf{E}_0 = (0, 0, E_0)$ пространственное распределение электростатического поля может быть найдено решением одномерного уравнения Пуассона

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial z} \varphi \right) = -4\pi n(\varphi), \quad (5)$$

где $\epsilon = \epsilon_{sc}(\epsilon_d)$ - статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника (диэлектрика), а $n = n(\varphi(z))$ - плотность заряда.

Рассмотрим металл-оксид-полупроводник (МОП) структуру, состоящую из полупроводника, занимающего полупространство $z > 0$, оксида толщиной D и тонкой пленки металла расположенной в $z = -D$ (для решения задачи о распространении электростатического поля внутри полупроводника и диэлектрика толщина металлической пленки не важна). Предполагаем, что МОП структура бесконечна в плоскости xu и краевыми эффектами можно пренебречь. Тогда граничные условия для уравнения (5) следующие:

$$\begin{aligned}\varphi(+\infty) &= \mu, \\ \varphi(-D) &= \mu + U,\end{aligned}\tag{6}$$

где μ - химический потенциал полупроводника. Первое уравнение в (6) есть выражает условие нейтральности объема полупроводника. Второе уравнение - условие наложения внешнего напряжения U на металлический электрод относительно объема полупроводника.

Разделим плотность зарядов n из уравнения (5) на две компоненты,

$$n = n_{fi} + n_{fd},\tag{7}$$

одна из которых, n_{fi} , включает заряды, независимые от внешнего поля, а вторая, n_{fd} - зависящие. Плотность независимого от внешнего поля заряда образуется ионами примеси легирования полупроводника и зарядов, локализованных внутри оксида:

$$n_{fi} = N_D + N_A + \delta(0_-)n_{ox}, \quad z \geq 0.\tag{8}$$

Здесь N_D и N_A - плотности доноров и акцепторов, соответственно, а оксидные заряды полагаются локализованными возле границы раздела полупроводник-диэлектрик, что является хорошим приближением в случае границы раздела Si-SiO₂.

Пространственное распределение зависящих от поля зарядов $n_{fd}(z)$ в общем случае является нелинейным функционалом потенциала φ во всех точках полупроводника (в рамках модели подвижными зарядами внутри оксида пренебрегается). Однако при достаточно плавном пространственном распределении электростатического потенциала $\varphi(z)$, что выполняется почти для всех используемых в эксперименте значений напряжения, экранировка внешнего электростатического поля может быть описана в приближении изогнутых зон для фермиевского электронно-дырочного газа, в рамках которого связь между $n_{fd}(z)$ и $\varphi(z)$ подразумевается локальной, т.е. $n_{fd}(\varphi) = n_{fd}(\varphi(z))$. Плотность заряда n_{fd} состоит из плотности свободных электронов n_e , дырок n_h и плотности поверхностных состояний n_{it} на границе раздела полупроводник-диэлектрик, заряд которых зависит от величины электростатического потенциала на границе раздела:

$$n_{fd}(z) = n_h(\varphi(z)) + n_e(\varphi(z)) + \delta(0_+)n_{it}(\varphi(z = 0_+)), \quad z \geq 0.\tag{9}$$

Поскольку при $z > 0$ координата z входит в уравнения (8,9) неявно и плотность подвижного заряда n_{fd} зависит от z через $\varphi(z)$, уравнение Пуассона (5) имеет первый интеграл в виде:

$$E_0^2(\varphi) = \frac{8\pi}{\epsilon} \int_{\varphi}^{\mu} n(\varphi') d\varphi'.\tag{10}$$

С учетом выражений (8,9) компоненты плотности заряда $n(\varphi')$ из уравнения (10) имеют вид:

$$n_{fd}(\varphi(z)) = eN_V\Phi\left(\frac{\varepsilon_V - \varphi}{kT}\right) - eN_C\Phi\left(\frac{\varphi - \varepsilon_C}{kT}\right) + \delta(0_+)n_{it}, \quad (11)$$

$$n_{fi} = eN_C\Phi\left(\frac{\mu - \varepsilon_C}{kT}\right) - eN_V\Phi\left(\frac{\varepsilon_V - \mu}{kT}\right) + \delta(0_-)n_{ox}. \quad (12)$$

где $\Phi(\tau)$ - интеграл Ферми-Дирака:

$$\Phi(\tau) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{x} (1 + \exp(x - \tau))^{-1} dx. \quad (13)$$

ε_V и ε_C в уравнениях (11,12) есть энергии верхнего края валентной зоны и нижнего края зоны проводимости, соответственно, k - постоянная Больцмана, и T - абсолютная температура. $N_V = 2(2\pi m_h k T h^{-2})^{3/2}$ и $N_C = 2M_C(2\pi m_e k T h^{-2})^{3/2}$ - эффективные плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости, соответственно, M_C - число эквивалентных минимумов зоны проводимости, m_e и m_e - эффективные массы электронов и дырок. Для кремния $M_C = 6$ и $N_V = 1.04 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $N_C = 2.8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Уравнение (11) получено сверткой энергетической плотности состояний с фермиевской функцией распределения в соответствующих пределах по энергии для дырочной и электронной подсистем электронно-дырочного газа, соответственно. Уравнение (12) получено из условия нейтральности объема полупроводника в отсутствии внешнего поля:

$$N_D + N_A = n_0 + p_0, \quad (14)$$

где n_0 и p_0 плотности электронов и дырок в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно, в отсутствии внешнего поля.

Поверхностные (интерфейсные) состояния на границе раздела полупроводник-диэлектрик, возникающие из-за нарушения периодичности кристаллической структуры полупроводника (таммовские состояния) или из-за дефектности границы раздела, могут быть промоделированы уровнями внутри запрещенной зоны полупроводника. При наложении внешнего электростатического поля зоны полупроводника изгибаются, и как только уровень Ферми пересекает уровень поверхностного состояния, состояние (ловушка) начинает заряжаться или разряжаться в зависимости от типа состояния. При дальнейшем изменении поверхностного потенциала изгиб зон и положение уровня Ферми не меняются до тех пор, пока ловушка полностью не зарядится (разрядится). Такой эффект называется стабилизацией уровня Ферми (pinning). Интерфейсные ловушки характеризуются их распределением по энергии $L^{a,d}(\varepsilon)$ внутри запрещенной зоны и их плотностью на 1 эВ $N_{a,d}$. Тогда плотность ловушек n_{it} при данном значении поверхностного потенциала $\varphi(z = 0_+)$ дается в виде:

$$n_{it}(\varphi) = e \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C} (N_d L^d(\varphi - \varepsilon) F^d(\varphi - \varepsilon) - N_a L^a(\varphi - \varepsilon) F^a(\varphi - \varepsilon)) d\varepsilon, \quad (15)$$

где индексы a, d определяют тип состояния - акцептор или донор, а

$$F^a(\tau) = \left(1 + \frac{1}{g^a} \exp\left(-\frac{\tau}{kT}\right)\right)^{-1}, \quad (16)$$

$$F^d(\tau) = \left(1 + g^d \exp\left(\frac{\tau}{kT}\right)\right)^{-1}. \quad (17)$$

есть функции распределения вероятности заполнения ловушки. Коэффициенты g^a и g^d - степень вырождения основного состояния акцепторных или донорных уровней. Для кремния, из-за двойного вырождения валентной зоны в центре зоны Бриллюэна, $a = 4$ и $g^d = 2$. Конкретная форма распределения ловушек по энергиям $L^{a,d}(\varepsilon)$ зависит от системы, для модельных вычислений она может быть взята в виде набора лоренцевых функций. Тогда плотность ловушек

$$n_{it}(\varphi(z = 0_+)) = e \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C} d\varepsilon \sum_M \operatorname{sgn}(n_{it}^M) F^M(\varphi - \varepsilon) \sum_j N_{M,j} L_{M,j}(\varphi - \varepsilon), \quad (18)$$

где

$$L_{M,j}(\varepsilon) = \delta_{M,j}^2 \left(\delta_{M,j}^2 + (\varepsilon - \varepsilon_{0M,j})^2\right)^{-1}. \quad (19)$$

В выражениях (18,19) j нумерует уровни, и $M = a, d$. $N_{M,j}$, $\delta_{M,j}$ и $\varepsilon_{0M,j}$ обозначают эффективную плотность состояний на эВ, ширину и центральное положение распределения ловушек по энергии. Такой набор лоренцевых пиков описывает непрерывное распределение ловушек, при $\delta_{M,j} \rightarrow 0$ с помощью (18) можно описать плотность ловушек в виде дискретных уровней.