На правах рукописи

Власов Артур Николаевич

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ И КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АНИЗОТРОПНЫХ И КЛАСТЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР

Специальность 01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Липецк – 2014

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Липецкий государственный педагогический университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Филиппов Владимир Владимирович

Официальные оппоненты: Курганский Сергей Иванович,
доктор физико-математических наук, профессор,
Воронежский государственный университет,
кафедра физики твердого тела и наноструктур,
профессор

Буданов Александр Владимирович,
кандидат физико-математических наук, доцент
Воронежский государственный университет
инженерных технологий, кафедра физики, доцент

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет»

Защита состоится 27 июня 2014 года в 15^{20} на заседании диссертационного совета Д 212.038.10 при Воронежском государственном университете по адресу: 394006, Воронеж, Университетская пл., 1, ауд. 428.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Воронежского государственного университета и на сайте www.science.vsu.ru.

Автореферат разослан “ 25 ” апреля 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Маршаков Владимир Кириллович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Развитие полупроводниковой микроэлектроники в значительной степени основано на использовании новых материалов. В частности, сегодня в полупроводниковой электронике и наноэлектронике все более применяются пленки с характерной анизотропией физических свойств, причем, зачастую, электропроводность в разных направлениях может быть существенно различной, отличающейся иногда даже в несколько раз. Известно, что анизотропные полупроводники $A^{II}B^{V}$ используются для получения *p-n* переходов, источников спонтанного излучения, термоэлементов, фотоэлементов, при создании, измерительных и других приборов. Сдерживание применения данных полупроводников связано недостаточным количественным описанием физических явлений, возникающих в ограниченных образцах при переносах заряда. Поэтому при практическом использовании полупроводниковых пленок различного характера в применяемых электронных и электротехнических приборах, возникают, прежде всего, проблемы распределения электрического потенциала и значение плотности тока в исследуемых полупроводниках, обладающих анизотропией электрических параметров. Изучение распределния потенциала токового зонда в исследуемых пленках является также важным для анализа данных сканирующей зондовой микроскопии.

Особый интерес у исследователей вызывают псевдоморфные напряженные гетероструктуры, в частности, кремний-германиевые структуры с совмещенной решеткой, что обусловлено возможностью управлять широким спектром физических свойств композиционных слоев структуры изменением величины деформации и соотношением толщин контактирующих полупроводников. Кроме того, в современной полупроводниковой микро- и наноэлектронике все больше используются пленки растянутого кремния на германиевой подложке. В настоящее время уже достаточно подробно описано влияние деформаций на отдельно взятый полупроводник. Существуют как чисто экспериментальные работы, так и теоретические исследования. Однако, практически отсутствуют модели, описывающие расчет внутренних деформаций в напряженных гетеропереходах и их влияние на основные энергетические параметры кремний-германиевых гетеропереходов и сверхрешеток, нет достаточно полной модели, описывающей связь деформации растяжения в кремнии с проводимостью канала в МДП структурах.

На сегодняшний день методы изучения полупроводников довольно сильно совершенствуются, в них находят свое применение разработки нанотехнологий. Структурными элементами электроники становятся всевозможные устройства, учитывающие конкретные свойства квантовых точек и молекулярных кластеров. Необходимо отметить, что одно из самых основных свойств низкоразмерных структур – анизотропия электрических и магнитных характеристик. Создание приборов, учитывающих свойства молекулярных структур, обладает рядом преимуществ – это возможность формирования цифровых систем, в которых используется кодирование информации с помощью отдельных электронов, при этом происходит очень малое потребление энергии в таких объектах, а также возможность работы систем при высокой (до 300К) температуре. Проявления анизотропии, связанных и экситонных образований, излучение одиночных квантовых точек, резонансное комбинационное рассеяние света сегодня найдены у большого числа различных полупроводниковых наноструктур. Анизотропия различных свойств органически присуща реальным современным наноструктурам – даже тогда, когда изначально они выращиваются как изотропные.

Самым распространенным и исследованным материалом современной электроники является кремний. Естественно считать, что различные наноструктуры кремния возможно использовать как основу для элементов наноэлектронных транзисторов, диодных структур и т.д. Необходимо заметить, что интерес к полупроводниковым кластерам и наночастицам связан также с их ролью в технологическом процессе получения аморфных полупроводниковых материалов.

На сегодняшний день расчеты энергетических параметров кремниевых кластеров и наночастиц представлены в литературе недостаточно полно. Как правило, расчеты ограничиваются оптимальной геометрической структурой и некоторыми энергетическими параметрами при отсутствии внешних возмущающих полей. Одна из основных проблем расчета физико-химических свойств полупроводниковых наночастиц заключается в том, что используемые на современном этапе способы вычисления рассматриваемых свойств молекулярных и кластерных форм не позволяют с равной степенью точности вычислять весь спектр энергетических и кинетических параметров.

На основании изложенного, задача исследования электронного транспорта в субмикронных и искусственно анизотропных полупроводниковых структурах является актуальной и служит увеличению эффективности лабораторных исследований контроля качества полупроводниковых структур.

Цель работы: установить особенности явлений электронного транспорта в анизотропных полупроводниковых пластинах, пленках и кластерах.

Научные задачи:

1. Исследование особенностей распределения потенциала в объеме анизотропных полупроводниковых кристаллов и пленок, в том числе в случае зондовых измерений. Исследовать структуру стационарного электрического поля в анизотропных полупроводниках при различных граничных условиях.
2. Разработка модели механических деформаций, энергетической структуры и кинетических свойств напряженных гетероструктур кремний-германий.
3. Анализ основных характеристик полупроводниковых кремниевых кластеров с малым числом атомов. В частности выявить влияние числа атомов структуры, величины заряда наночастиц, примесей и внешних полей на значение энергии связи и электронной структуры кремниевых наноформ.
4. Теоретическая разработка и практическое обоснование оригинальных методик измерения и контроля электрофизических параметров анизотропных и неоднородных полупроводников.

Методы исследования. Цели диссертационной работы достигаются путем формулирования и решения определенных краевых задач электродинамики и квантовой физики и экспериментальной проверкой с дальнейшим обсуждением имеющихся решений с применением вычислительной техники.

Научная новизна исследования:

1. Выполнено теоретическое исследование трехмерного распределения потенциала электрического поля при многозондовых измерениях на анизотропных полупроводниковых пластинах и пленках. Впервые представлены выражения для нахождения распределений потенциала, дающие возможность определять величину электрического поля в конкретной области для малого токового зонда при сканировании поверхности анизотропной пленки, с учетом граничных условий. Предложены новые теорети-

ческие выражения для определения сопротивления слоистых структур, основой которых служит контакт двух анизотропных полупроводниковых кристаллов.

2. Построены модели гетероструктур на основе напряженных пленок кремния и германия. Разработана оригинальная модель деформаций в напряженной полупроводниковой структуре, состоящей из произвольного числа тонких кристаллических слоев Si и Ge на податливой пленке. Впервые изучено влияние деформации и соотношения толщин композиционных слоев на основные параметры энергетической зонной диаграммы неоднородной многослойной структуры кремний-германий. Предложена модель показывающая, что в напряженных кремниевых пленках на германиевой подложке подвижность в направлении растяжения возрастает более чем в два раза.

3. Представлены результаты полуэмпирических квантовохимических расчетов воздействия внешнего электрического поля и избыточного заряда на энергетические характеристики кремниевых наноструктур $\mathrm{MetalSi}_{12}$. Проведена оптимизация атомной структуры и расчет электронных параметров напряженных кремниевых нанокластеров Si на германиевой подложке, исследовано распределение электронных состояний.

4. Разработана и практически реализована новая методика совместных измерений удельной электропроводности и холловской подвижности носителей заряда в слоистых полупроводниках. Теоретически обоснована методика измерений удельных электропроводностей σ_1 и σ_2 двуслойных $n+/n$ и $p+/p$ полупроводниковых структур на основе четырехзондового метода с линейным расположением зондов.

Достоверность и надежность результатов исследования обеспечивается выбором известных методов математической физики для решения соответствующих краевых задач, подбором надежного сертифицированного оборудования для экспериментов, сопоставлением с результатами других авторов. Основные положения работы не только теоретически обоснованы, но и подтверждены экспериментально. Необходимо указать, что все использованные в диссертации алгоритмы реализованы автором в виде пакетов прикладных программ в средах MathCad и MatLab, при написании которых использовались стандартные подпрограммы. Результаты расчетов, приведенные в главе 3, выполнены на базе свободного программного обеспечения (PC-Gamess, Mopac-2012, Ghemical, Molekel).

Практическая и научная значимость результатов диссертационной работы. Представленные в работе формулы для распределений электрических полей в анизотропных пленках полезны при разработке новых методик определения анизотропии и неоднородности пленок и наноструктур, а также при анализе данных сканирующей зондовой микроскопии. Полученные и проанализированные в работе выражения для деформаций и параметров зонной диаграммы напряженных гетеропереходов могут быть использованы для моделирования физических свойств деформированных полупроводников и электрических характеристик приборов на основе напряженных полупроводниковых гетероструктур различных составов. Результаты работы позволяют производить расчет и моделирование на ПК наиболее важных кинетических и энергетических свойств кремниевых наноструктур. Выполненные нами расчеты позволяют предлагать использование исследуемых наночастиц в одноэлектронных приборах наноэлектроники.

Положения и результаты, выносимые на защиту.

1. Теоретические выражения в виде рядов аналитических функций для расчета трехмерных распределений потенциалов при зондовых измерениях в объеме анизотропного полупроводника с плоскими границами, позволившие показать эффекты концентрирования и растекания плотности тока в анизотропных материалах.
2. Модель искусственной анизотропии в структуре на основе пленок кремния и германия с совмещенной решеткой позволившей выявить, что смещение дна зоны проводимости долины Δ_1 в пленке кремния приводит двукратному возрастанию подвижности электронов и концентрированию плотности электрического тока в растянутом n-Si с анизотропией проводимости.
3. Результаты полуэмпирических квантовохимических расчетов по оптимизации атомной структуры и расчету электронных характеристик кремниевых напряженных нанокластеров и сфероидальных кластеров $\mathrm{MetalSi_n}$, показывающие, что при возрастании величины внешнего электрического поля значения ширины HOMO - LUMO щели у наночастиц $\mathrm{FeSi_{12}}$, $\mathrm{NiSi_{12}}$ – возрастают, а у наночастиц $\mathrm{CuSi_{12}}$, $\mathrm{ZnSi_{12}}$ – убывают, при оптимизации атомной структуры нанокластеров кремния на германиевой подложке происходит перенос отрицательного заряда от подложки германия к кластеру кремния.
4. Оригинальные методики исследований кинетических параметров полупроводников: четырехзондовый метод определения компонент тензоров удельной электропроводности и холловской подвижности анизотропных и слоистых полупроводниковых материалов, методика измерений удельных электропроводностей σ_1 и σ_2 двуслойных $n+/n$ и $p+/p$ полупроводниковых структур четырехзондовым методом с линейным расположением зондов.

Апробация. Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях и семинарах:
Международная научно-техническая конференция «Микроэлектроника и наноинженерия – 2008» (Москва, 2008); Всероссийская конференция «Неравновесные процессы в природе», (Елец, 2010); Международные семинары «Физико-математическое моделирование систем» (Воронеж, 2009, 2010, 2011); Международная конференция молодых ученых «Молодежь в науке: Проблемы и перспективы» (Липецк, 2010); Всероссийская конференция «Актуальные проблемы естественных наук и их преподавания» (Липецк, 2008), Школы молодых ученых Липецкой области «Актуальные проблемы естественных наук и их преподавания» (Липецк, 2008, 2009, 2010, 2011, 2012); Школа молодых ученых Липецкой области «Актуальные проблемы технических наук и их преподавания» (Липецк, 2009, 2012); Международная конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (Москва, 2011); Международная школа «Физическое материаловедение» (Тольятти, 2011); Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (Москва, 2011).

В 2010 г. за цикл работ по теме «Исследование физических свойств кремниевых и кремний-германиевых наноструктур» автор был награжден региональной научной премией им. С.Л. Коцаря, в период обучения в аспирантуре удостоен стипендии Президента РФ.

Публикации. По теме диссертации автором опубликована 31 работа, среди которых: 7 статей в журналах рекомендованных ВАК, 6 – статей в тематических сборниках и научных журналах, 18 – работ в материалах конференций, 1 учебное пособие.

Личный вклад автора. Направление исследований, постановка задач, разработка методов исследования определялись совместно с научным руководителем. Основные теоретические и экспериментальные результаты, а также компьютерные модели, включенные в диссертацию, получены лично автором или при его непосредственном участии. Автор внес значительный вклад в написание статей, раскрывающих содержание работы. Анализ и интерпретация полученных результатов, выводы и научные положения, выносимые на защиту сформулированы лично автором.

Структура диссертационной работы. Диссертационная работа включает в себя введение, три главы основного текста, заключение и список использованной литературы из 209 наименований. Работа изложена на 166 страницах, содержит 18 таблиц и 47 рисунков.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во ***введении*** описана актуальность темы, обозначена цель работы, задачи и методы исследования, определена научная новизна, положения, выносимые на защиту, дана общая характеристика диссертационной работы.

Многие полупроводниковые соединения обладают ярко выраженной анизотропией физических свойств и уже находят практическое применение, в частности, на основе соединений CdSb, $CdAs_2$ получены чувствительные анизотропные термоэлементы, которые используются для регистрации излучения в инфракрасном диапазоне и измерения мощности тепловых потоков. Высокая чувствительность новых термоэлементов обусловлена именно анизотропией кинетических свойств этих соединений. Соответственно, ***первая глава*** диссертации направлена на теоретическое исследование распределений электрических полей в анизотропных пластинах при зондовых измерениях.

В разделе 1.1 диссертации осуществлен обзор кинетических явлений в анизотропных полупроводниках, опираясь на общеизвестные источники. Описаны экспериментально наблюдаемые особенности основных характерных процессов в анизотропных полупроводниках и учтены ключевые моменты, связанные с их рассмотрением. Результатом анализа проделанного обзора, в частности, является вывод о том, что на практике, большую роль играют макроскопические распределения потенциала и плотности электрического тока, которые необходимы для расчета величин кинетических коэффициентов и прогнозирования работы полупроводниковых структур.

Учитывая цели диссертационного исследования, в разделе 1.2 осуществляется теоретический анализ распределения потенциала электрического тока в ситуациях, соответствующих зондовым измерениям на анизотропных полупроводниковых пластинах и пленках. Рассмотрены выражения для распределений потенциала, с помощью которых можно устанавливать область локализации поля зонда силового туннельного микроскопа при проведении сканирования анизотропной пленки.

Ниже приведен пример результатов теоретических расчетов, выполненных в диссертации. Тензор удельной электропроводности исследуемых материалов в декатровой системе координат можно записать в следующем виде:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{\text{II}} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\text{II}} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\perp} \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где $\sigma_{\perp}$ – значение удельной электропроводности вдоль оси z; σ_{II} – удельная прово-

димость, которая определяется для осей x и y (рис. 1).

Значения для потенциала вблизи границы в области прямоугольного образца на металлической подложке имеют вид:

$$\sigma_{\text{II}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \sigma_{\text{II}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \sigma_{\perp} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0, \tag{2}$$

$$\sigma_{\text{II}} \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{x=0,a} = \sigma_{\text{II}} \frac{\partial \phi}{\partial y}\bigg|_{y=0,b} = 0, \quad \phi\big|_{z=d} = 0, \quad \sigma_{\perp} \frac{\partial \phi}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \begin{cases} -\dfrac{I_1}{4\varepsilon^2}, x_1 - \varepsilon \le x \le x_1 + \varepsilon, \\ \qquad y_1 - \varepsilon \le y \le y_1 + \varepsilon; \\ 0, \text{ в остальной области}. \end{cases} \tag{3}$$

Заключительные формулы для нахождения распределения потенциала в ограниченной пленке выглядят в виде двойного ряда Фурье:

$$\phi(x,y,z) = \frac{I_1}{ab\sigma_{\perp}}[d - z] - \frac{4I_1}{ab\sigma_{\perp}} \times$$
$$\times \sum_{n,k=0}^{\infty} \Theta_{nk} \frac{\sin(\alpha_n \varepsilon)}{\alpha_n \varepsilon} \cdot \frac{\sin(\beta_k \varepsilon)}{\beta_k \varepsilon} \cdot \frac{\text{sh}(\eta_{nk}(z-d))}{\eta_{nk}\,\text{ch}(\eta_{nk} d)} \cos(\alpha_n x)\cos(\beta_k y)\cos(\alpha_n x_1)\cos(\beta_k y_1), \tag{4}$$

$$\alpha_n = \frac{\pi n}{a}, \ \beta_k = \frac{\pi k}{b}, \ \eta_{nk} = \sqrt{\frac{\sigma_{II}}{\sigma_{\perp}}\left(\alpha_n^2 + \beta_k^2\right)}, \quad \Theta_{nk} = \begin{cases} 1, n \ne 0 \wedge k \ne 0; \\ 1/2, n = 0 \wedge k \ne 0 \vee n \ne 0 \wedge k = 0; \\ 0, n = k = 0. \end{cases} \tag{5}$$

Также получены распределения потенциалов для потенциала зонда к пленке на высокоомной подложке и на бесконечной пленке.

С помощью компьютерного моделирования полученных распределений потенциала (рис. 2) можно наглядно изобразить связь между электропроводностью и возникающим концентрированием или растеканием тока в пластинах и пленках.

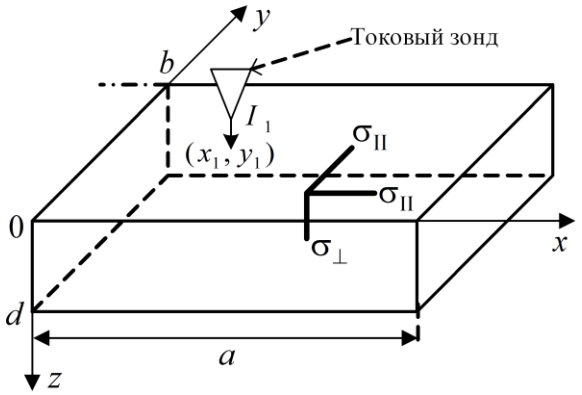

Рис. 1. *Размещение токового зонда к исследуемой пленке.* I_1 *– ток зонда;* (x_1, y_1) *– координаты центра токового зонда;* a, b, d *–длина. ширина, высота пленки пленки.*

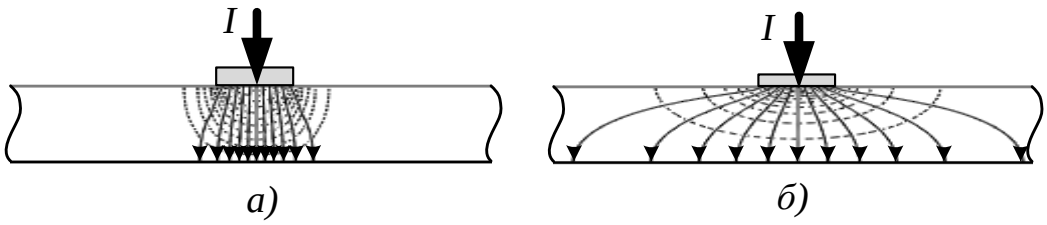

Рис. 2. *Рассчитанные модели линий электрического потенциала (пунктир) и тока (сплошные линии) в анизотропной пленке*
а) $\sigma_{\text{II}} = \sigma_{\perp}/5\sigma$ *(концентрирование тока); б)* $\sigma_{\text{II}} = 5\sigma_{\perp}$ *(растекание тока).*

В части 1.3 проведено теоретическое обоснование методики расчета распределения потенциала в ограниченных полупроводниках, имеющих тензорный характер электропроводимости, путем преобразований координат на плоскости и в пространстве.

Получены выражения в виде рядов аналитических функций, позволяющие определять распределения электрического потенциала в анизотропных полупроводниковых образцах прямоугольной и цилиндрической форм.

Тензор удельной электропроводности в случае анизотропного полупроводникового кристалла в выбранной нами декартовой системе координат может быть записан следующим образом

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где σ_x, σ_y, σ_z – значения удельных электропроводимостей по осям *x, y, z* – соответственно. Тензор удельной электропроводности для анизотропного цилиндра представлен в виде (1).

Уравнение для потенциала:

$$\sigma_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \cdot \tag{7}$$

В частности, потенциал точечного зонда, расположенного на поверхности анизотропной пленки определяется выражением:

$$\phi_1 = \frac{I}{2\pi\sqrt{\sigma_x \sigma_y \sigma_z}} \frac{1}{\sqrt{\frac{x^2}{\sigma_x} + \frac{y^2}{\sigma_y} + \frac{z^2}{\sigma_z}}} \cdot \tag{8}$$

Разработана методика нахождения значений распределения потенциала в ограниченных полупроводниковых кристаллах при много зондовых измерениях с помощью метода электрических изображений (рис. 2). Рассмотрен широкий спектр граничных условий, влияющий на характер распределения потенциала в анизотропном кристалле, находящемся на металлической, полупроводниковой и диэлектрической подложках.

Полученные распределения потенциала экспериментально проверены на анизотропных монокристаллах диарсенидов кадмия и цинка. Пример сопоставления теории и эксперимента приведен на рис. 3.

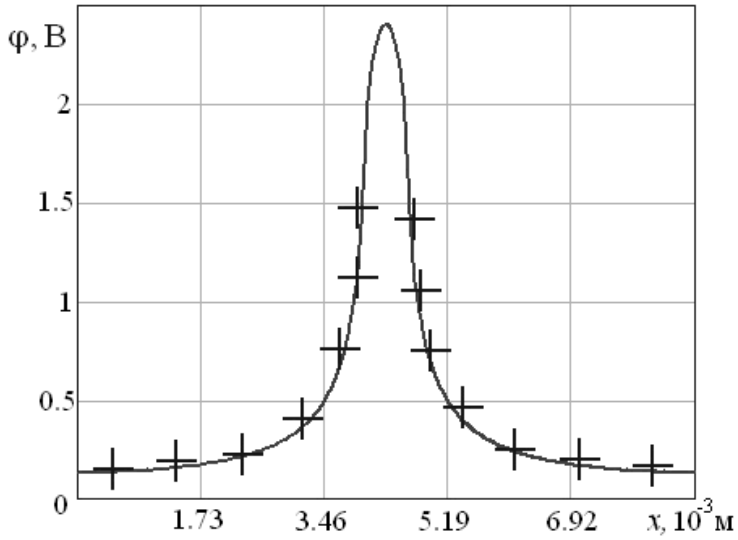

Рис. 3. *Сравнение данных эксперимента* (+) *и теоретического распределения потенциала* (*сплошная линия*) *в прямоугольной пленке диарсенида кадмия.*

В разделе 1.4 формулируется задача и рассматривается ее решение с учетом граничных условий для потенциала электрического поля, возникающего при измерении электропроводности анизотропных и слоистых полупроводников. На основе полученного решения для потенциала разработана методика определения удельной электропроводности слоистых материалов. Полученные результаты позволяют не только контролировать и измерять значение проводимости полупроводника, но и моделировать электрическое поле в объеме образца с помощью ПК.

Предложенная методика измерений компонент тензоров удельной электропроводности и подвижности носителей экспериментально проверена на монокристаллах диарсенидов кадмия и цинка.

Во ***второй главе*** выполнен анализ явлений электронного переноса в искусственно анизотропных структурах, в том числе кремний-германиевых наноструктурах.

В разделе 2.1 выполнен *обзор* физических явлений в материалах и приборах, в устройствах которых используются механически напряженные полупроводники, а также особенности искусственной анизотропии в элементах приборов современной электроники.

В разделе 2.2 произведено моделирование процесса механических деформаций и последующее изучение зонной диаграммы структуры $\mathrm{Si/Ge}$. Представлена оригинальная модель для учета деформаций в структуре из любого числа тонких кристаллических слоев Si и Ge с совмещенной решеткой, рассмотрена зависимость зонной диаграммы от главных характеристик деформации и соотношения размеров композиционных слоев. Вычисления опираются на последние литературные экспериментальные данные и выполненные нами аналитические расчеты.

Осуществлен расчет деформаций в полупроводниковой структуре из N слоев кремния и германия для такого случая, когда конфигурация слоев образуется путем сращивания по направлению $[001]$. В данных структурах появляется механическое напряжение, вследствие несоответствия постоянных решеток слоев. У кристаллических слоев понижается симметрия и появляется необходимость вводить два параметра решетки (в плоскости роста пленки a_{II}, и вдоль направления совмещения решеток $a_{\perp}$).

При рассмотрении кремний-германиевого слоистого образца, имеющего в совокупности N слоев, выражения, для постоянных решеток кристаллических слоев рассматриваемой структуры вдоль контактной плоскости a_{II} и в перпендикулярном направлении $a_{\perp i}$:

$$a_{\mathrm{II}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \chi_i h_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{\chi_i h_i}{a_i}}, \qquad a_{\perp i} = a_i + \frac{2\nu_i}{1-\nu_i}\left(a_i - \frac{\sum_{i=1}^{N} \chi_i h_i}{\sum_{i=1}^{N} \frac{\chi_i h_i}{a_i}} \right), \qquad \chi_i = \frac{E_i}{1-\nu_i}, \tag{9}$$

где E_i и ν_i – модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно, h_i – толщина i-го слоя структуры.

Показано значительное смещение дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в напряженном кремнии, приводящие к сокращению ширины запрещенной зоны до величины $\approx 0{,}5\,\text{эВ}$. Учитывая все смещения энергетических зон в кремнии и германии, нами показано, что наличие растяжения или сжатия приводит не только к количественным, но ведет также к изменению качественных состояний в зонной диаграмме напряженного наногетероперехода $\mathrm{Si/Ge}$.

Предлагаемая нами модель для деформаций и параметров зонной диаграммы напряженных гетеропереходов может быть полезна при прогнозировании физических

свойств структур получивших внешние или внутренние механические напряжения,

Раздел 2.3 работы посвящен изучению растекания тока проводимости в каналах транзисторов, у которых анизотропия проводимости обусловлена действием механических напряжений со стороны высокоомной подложки. Анизотропия подобных материалов может быть обусловлена не только сложной структурой кристалла, но, и, зачастую внешними полями и деформациями, имеющими место в структурах современной микро- и наноэлектроники. На изменение подвижности свободных носителей зарядов в n-Si, как было установлено, оказывает воздействие отношение толщин пленок и деформирующей подложки германия. Исследовались также зависимости для подвижности электронов (рис. 4), применимость которых возможна для определения изменения быстродействия приборов на основе напряженного кремния.

Анализируя выполненное моделирование, делаем вывод, что электрический ток в растянутом слое n-Si течет по более сжатому каналу, чем в обычном состоянии. Распределение токовых зарядов становится неодинаковым по объему кристалла – оно будет наибольшим по направлению токовых каналов малой ширины (рис. 5, 6), это приводит к уменьшению растекания тока в области канала транзистора.

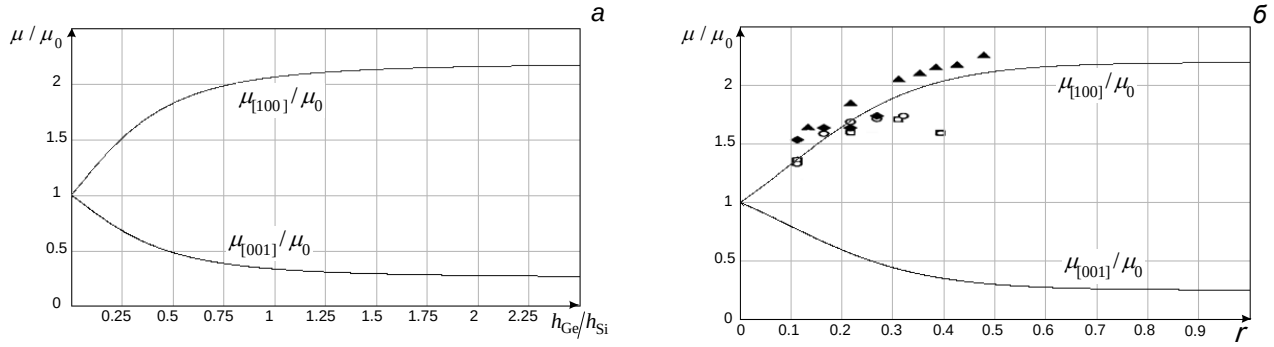

Рис. 4. *Рассчитанные изменения подвижностей электронов в деформированном n-Si: а - от отношения толщин Si и Ge(001); б – от содержания Ge в релаксированной подложке $Si_{1-r}Ge_r$(001). Экспериментальные значения (фигурные точки):* [*Lee M.L. // J. Appl. Phys. 2005. V.97. P.011101*].

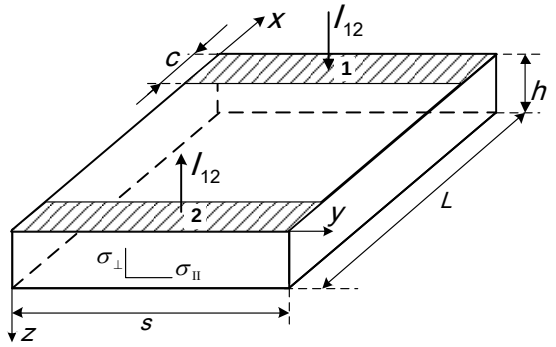

Рис. 5. *Пример расположения контактов к напряженному кремниевому каналу, штриховкой отмечены контуры токовых контактов 1 и 2.*

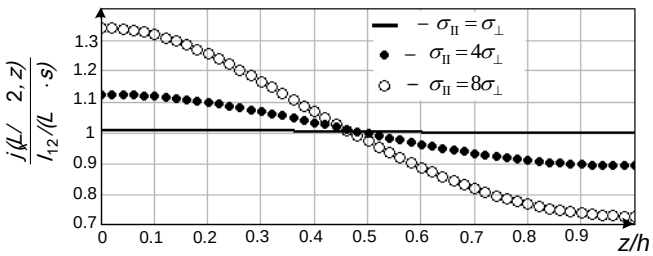

Рис. 6. *Изображение моделируемой плотности тока в среднем сечении канала транзистора при различных параметрах анизотропии.*

Основываясь на приведенных нами выражениях, можно показать, что значение сопротивления анизотропного напряженного слоя кристалла n-Si меняется от параметров анизотропии нелинейно, соответственно, данную зависимость необходимо учитывать при наличии деформации канала транзистора.

Раздел 2.4 работы посвящен моделированию распределения электрического поля в слоистых и неоднородных полупроводниках. Показан способ расчета стационарного электрического поля в образце прямоугольной формы, состоящего из двух составных частей с отличающимися электропроводностями $\hat{\sigma}^{(1)}$ и $\hat{\sigma}^{(2)}$ (рис. 7).

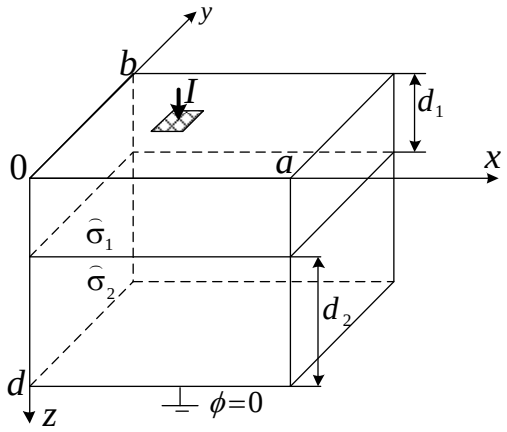

Рис. 7. *Пример расположения токового контакта при сканировании двухслойной структуры с заземленной нижней гранью.*

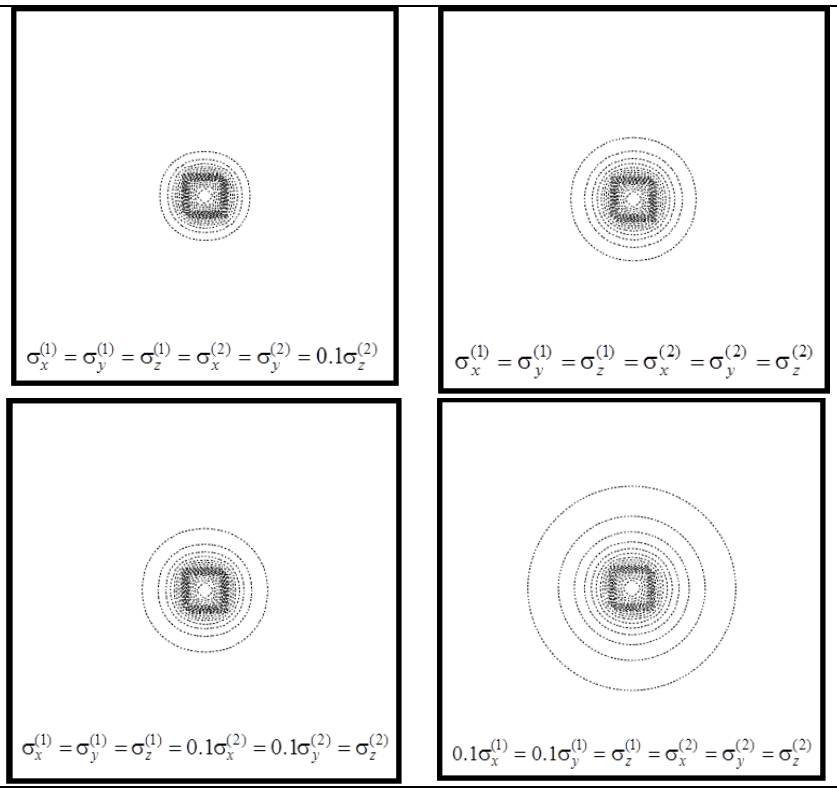

Рис. 8. *Примеры распределения эквипотенциалей на верхней грани двухслойной анизотропной структуры (в плоскости* $z=0$*) с заземленной нижней гранью (*$\phi(z=d)=0$*).Количество эквипотенциалей в каждом из случаев равно 21. Параметры структуры:* $a=b=10d$, $d_1=d_2$, $2c=a/10$, $x_1=a/2$, $y_1=b/2$.

Установленная зависимость для распределения потенциала представима в виде:

$$\phi^{(1,2)}(x,y,z)=\frac{I}{ab}\sum_{n,k=0}^{\infty}\left[A_{nk}^{(1,2)}\operatorname{ch}(\eta_{nk}z)+B_{nk}^{(1,2)}\operatorname{sh}(\eta_{nk}z)\right]\cos(\alpha_n x)\cos(\beta_k y), \qquad (10)$$

где $A_{nk}^{(1,2)}$, $B_{nk}^{(1,2)}$, α_n, β_n, η_{nk} определены из граничных условий. Пример моделирования распределения потенциала приведен на рис. 8.

Предложена методика измерений удельных электропроводностей σ_1 и σ_2 двуслойных $n+/n$ и $p+/p$ полупроводниковых структур (в пренебрежении контактной разности между слоями) четырехзондовым методом с линейным расположением зондов.

В третьей главе диссертационной работы исследованы особенности строения и электронного спектра структурных элементов наноэлектроники на основе кремниевых наноформ.

В первой части главы выполнен *обзор* возможных способов изучения и теоретического анализа свойств электронной структуры полупроводниковых кластеров и наночастиц. Определены основные параметры необходимые для описания приборов и структур молекулярной одноэлектроники. Проведенный литературный обзор по рассматриваемой теме дает возможность сделать заключение о том, что для кремниевых наночастиц с небольшим количеством атомов полуэмпирический метод квантовой химии РМ3 позволяет получать приемлемые расчетные значения важнейших квантово-энергетических величин.

В разделе 3.2 описаны основные параметры необходимые для представления одноэлектронного транспорта в нанокластерах и наночастицах, теоретически обоснован вид

гамильтониана переноса заряда в молекулярных структурах. Показано, что транспорт электрона в наноразмерных структурах может быть осуществлен с помощью модели переноса волнового пакета частиц через определенный набор потенциальных барьеров.

Раздел 3.3 посвящен расчету основных квантово-энергетических характеристик полупроводниковых кремниевых наночастиц Si_2-Si_{10} и Si_{13} (рис. 9) разными квантовохимическими методами и их сравнению. Геометрия структур (рис. 9) оптимизирована полуэмпирическим методом NDDO PM3. Определены энергия связи, энергетическая щель между верхним заполненным и нижним свободным энергетическими уровнями, работа выхода электрона, энергия электронного сродства. Расчеты были произведены полуэмпирическими (EHT, MINDO3, AM1, PM3) и неэмпирическими методами (HF (3-21G), HF (6-31G*)). Различные полуэмпирические и неэмпирические методы позволяют получать существенно отличные друг от друга результаты.

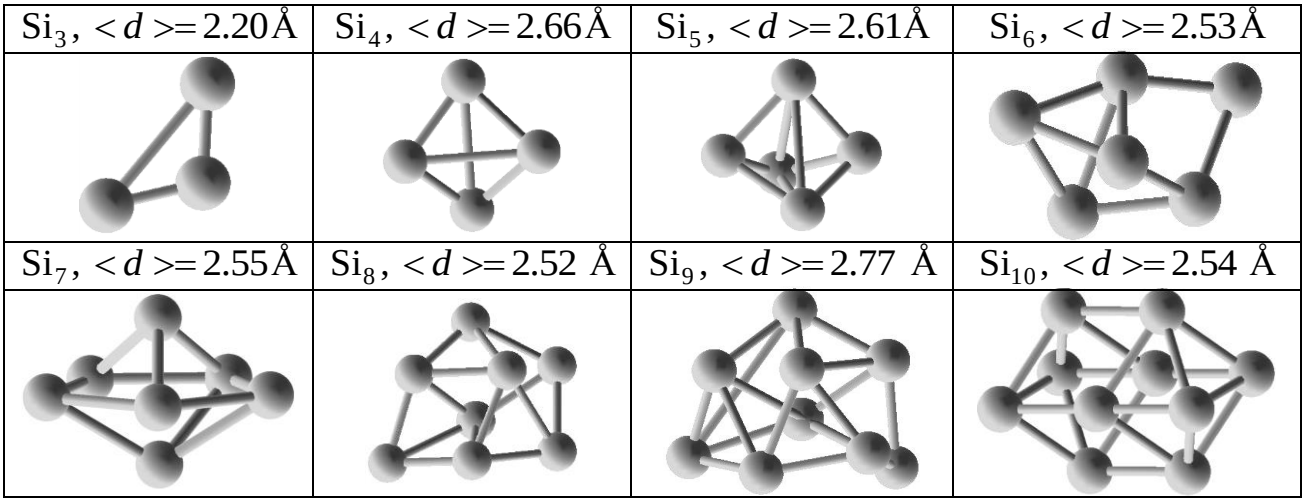

Рис. 9. *Модели строения наночастиц Si_3-Si_{10}.*

Результаты расчетов, выполненных в разделе 3.3, показали применимость полуэмпирического метода квантовой химии NDDO PM3 для расчета основных электронных свойств кремниевых наночастиц с небольшим числом атомов. Показано, что работа выхода электрона приближенно равна энергии верхнего заполненного уровня; энергия электронного сродства приблизительно соответствует значению энергетической щели между верхним заполненным и нижним свободным энергетичскими уровнями; у всех рассчитываемых конструкций получаются отрицательные значения энергии связи, что подтверждает их химическую устойчивость; наиболее близким к экспериментальным значениям являются результаты расчетов выполненных методом PM3.

В разделе 3.4 представлены результаты моделирования свойств сфероидальных кластеров кремния, обладающих плотной упаковкой. Проведен анализ состава и физических свойств наночастиц Si_{13} и $MetalSi_{12}$. Моделирование геометрической структуры и главных энергетических свойств нами произведено с использованием квантовохимического метода NDDO PM3 (UHF).

Как показывают результаты расчета, электронная структура наночастицы при изменении ее зарядового состояния изменяется значительно. Стабильность наночастицы повышается при захвате дополнительного электрона. Ширина HOMO-LUMO щели заряженного кремниевого кластера в зависимости от знака его заряда уменьшается на различную величину. Величина энергии связи сфероидальных кластеров возрастает с увеличением ковалентного радиуса атома металла, инкапсулированного внутрь структуры.

Выполненный анализ энергетических свойств наночастиц Si_{13} и кремниевых фуллеренов позволяет предлагать использование подобных наночастиц в одноэлектронных структрах наноэлектроники. Осуществлять управление энергетическими и кинетическими особенностями полупроводникового нанокластера можно как путем варьирования его заряда, так и внешнего электрического поля.

Большой интерес на сегодняшний день вызывают исследования свойств кремниевых наноструктур, получаемых на подложках с параметрами решетки, отличными от кристаллического кремния, и находящихся по этой причине в напряженном состоянии. В пятой части главы 3 осуществлен разбор наиболее существенных особенностей электронных свойств напряженных кремниевых наночастиц на германиевой подложке (плоскости (001)). Нами рассмотрены эффекты, вызванные взаимной связью граничных атомов кластера кремния с подложкой германия.

Нами моделировались свойства нанокристаллов как кластеров идеальной решетки кремния (с постоянной решетки 5.431Å). Объектом изучения взята структура из 8 элементарных кристаллических ячеек $(2\times2\times2)$. Величины удлинения связей в направлениях $[100]$ и $[010]$ выбирались равными 4.2% (разница постоянных решеток кремния и германия), размеры сокращения связей в направлении $[001]$, определялись как 3.1% (по экспериментальным данным упругих постоянных в кремниевых пленках). Полученная кремниевая структура оптимизировалась методом силового поля $\text{MM}+$, с учетом сцепления с подложкой германия. Действие валентных связей находящихся вблизи границы атомов кремниевого кластера с германиевой подложкой моделировалось путем насыщения связей граничных атомов водородом.

Результаты выполненных расчетов электронных свойств напряженных кремниевых наночастиц на германиевой подложке, показали существенное влияние подложки на электронную структуру кластера. Получены координаты и эффективные заряды атомов наноструктур, дающие возможность говорить о степени насыщенности орбиталей и распределении электростатического потенциала во внутренней части нанокристалла и на его поверхности. Показано, что в кластерах кремния на германиевой подложке положительный заряд располагается на верхней части кластера, при этом воздействие подложки Ge ведет к смещению положительного заряда от кластера кремния к подложке.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построена теоретическая модель расчета трехмерных распределений потенциалов при зондовых измерениях в объеме анизотропного полупроводника с плоскими границами. Предложены методики моделирования распределения потенциала в ограниченных анизотропных образцах при многозондовых измерениях с помощью методов разделения переменных и электрических изображений. В рамках разработанной теории рассчитаны величины эффектов концентрирования и растекания плотности тока.
2. Теоретически обоснованы новые методики исследования кинетических коэффициентов электронного переноса полупроводниковых материалов: восьмиконтактный метод нахождения компонент тензоров удельной электропроводности и холловской подвижности слоистых полупроводниковых структур; методика измерений удельных электропроводностей двуслойных полупроводниковых структур (в пренебрежении *p*-*n*-перехода между слоями) четырехзондовым методом с линейным расположением зондов.

3. Построена модель для расчета внутренних деформаций в структуре из кристаллических слоев кремния и германия. Выявлено, что увеличение отношения толщины подложки германия к толщине пленки кремния приводит к значительному уменьшению ширины запрещенной зоны в кремнии и двукратному возрастанию подвижности электронов в $n\text{-}Si$. Показан эффект концентрирования плотности тока проводимости в напряженных кремниевых слоях на германиевых подложках.
4. Путем квантовохимического моделирования выполнен анализ атомного строения, электронных и кинетических свойств полупроводниковых кремниевых наночастиц с малым числом атомов (Si_2-Si_{10}). Выявлены существенные моменты оптимизации атомной структуры, электронных и транспортных свойств сфероидальных кремниевых кластеров, позволившие показать, что инкапсулирование кремниевых наночастиц атомами переходных металлов приводит к увеличению энергии связи.
5. Осуществлен расчет электронных свойств напряженных кремниевых наночастиц на германиевой подложке, показывающий, что в деформированных кластерах кремния на германиевой подложке положительный заряд распределяется на поверхности кластера, причем влияние подложки Ge приводит к переносу отрицательного заряда к кластеру кремния от германиевой подложки.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ

[1] Филиппов, В.В. Моделирование электронных свойств кремниевых наночастиц с плотной атомной упаковкой / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Известия вузов. Физика. – 2010. – № 1 – С. 70-75.

[2] Филиппов, В.В. Моделирование электронных свойств напряженного кремния на германиевой подложке / В.В. Филиппов, А.Н. Власов, Е.Н. Бормонтов // Известия вузов. Физика. – 2014. – Т. 57, № 1. – С. 50-56.

[3] Филиппов, В.В. Зондовые измерения распределения потенциала в анизотропных полупроводниковых кристаллах и пленках / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Известия вузов. Электроника. – 2012. – № 1. – С. 48-53.

[4] Филиппов, В.В. Моделирование деформаций и зонной диаграммы гетероструктуры кремний-германий / В.В. Филиппов, А.Н. Власов, Е.Н. Бормонтов // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2010. – Т. 12, № 3. – С. 282-287.

[5] Филиппов, В.В. Моделирование электрических полей при зондовых измерениях в анизотропных полупроводниковых пленках / В.В. Филиппов, А.Н. Власов, Е.Н. Бормонтов // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2011– Т. 13. - № 4. С. 499-503.

[6] Власов, А.Н. Квантово-энергетические и кинетические свойства материалов кремниевой наноэлектроники на основе кластеров Si_2-Si_{10} / А.Н. Власов, В.В. Филиппов // Журнал радиоэлектроники (электронный журнал РАН). – 2011. – № 8. – URL: http://jre.cplire.ru/jre/aug11/6/text.html.

[7] Филиппов, В.В. Квантовохимическое моделирование структуры кремниевых фуллеренов / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Журнал радиоэлектроники (электронный журнал РАН). – 2011. – № 11. – URL: http://jre.cplire.ru/alt/nov11/15/text.html

Учебное пособие

[8] Филиппов, В.В. Квантовохимическое моделирование и проектирование полупроводниковых наноструктур (учебное пособие для студентов вузов) / В.В. Филиппов, А.Н. Власов. – Липецк: ЛГПУ, 2011. – 112 с.

Материалы международных и всероссийских конференций

[9] Филиппов, В.В. Моделирование электронных свойств кремниевых наночастиц с плотной атомной упаковкой / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Микроэлектроника и наноинженерия – 2008. Международная научно-техническая конференция: Тезисы докладов. – М.: МИЭТ, 2008. – С.120.

[10] Филиппов, В.В. Моделирование квантово-энергетических характеристик полупроводниковых наночастиц / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Физико-математическое моделирование систем: Материалы VI Междунар. семинара. – Воронеж: ВГТУ, 2009. – Ч. 1.– С. 46-51.

[11] Власов, А.Н. Моделирование электронных свойств кремниевых наночастиц Si_{13} и $MetalSi_{12}$ / А.Н. Власов, В.В. Филиппов // Материалы Всероссийской конференции «Неравновесные процессы в природе». – Елец: ЕГУ, 2010. – С. 25-29.

[12] Филиппов, В.В. Моделирование энергетической структуры напряженных кремний-германиевых наноструктур / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Материалы Всероссийской конференции «Неравновесные процессы в природе». – Елец: ЕГУ, 2010. – С. 64-67.

[13] Филиппов, В.В. Моделирование электронных свойств кремниевых наноструктур / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Материалы Международной конференции молодых ученых «Молодежь в науке: Проблемы и перспективы». – Воронеж: Артефакт, 2010. – С. 223-232.

[14] Филиппов, В.В. Моделирование электрических полей в полупроводниковых пленках при зондовых измерениях / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Физико-математическое моделирование систем: Материалы VII Междунар. семинара. – Воронеж: ВГТУ, 2010. – Ч. 1. – С. 210-212.

[15] Филиппов, В.В. Квантовохимическое моделирование электронной структуры напряженных нанокристаллов кремния на германиевой подложке / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Материалы Междунар. конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» Москва, ИМЕТ им. Байкова, 2011. – С. 970-972.

[16] Филиппов, В.В. Моделирование электрических полей при зондовых измерениях в анизотропных полупроводниковых пленках / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Материалы Междунар. школы «Физическое материаловедение» Тольятти, ТГУ, 2011. – С. 106-107.

[17] Власов, А.Н. Особенности распределения потенциала в анизотропных полупроводниковых кристаллах и пленках при зондовых измерениях / А.Н. Власов // Материалы VIII Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» Москва, ИМЕТ им. Байкова, 2011. – С. 148-149.

[18] Филиппов, В.В. Моделирование электронной и атомной структуры кремниевых фуллеренов / В.В. Филиппов, А.Н. Власов // Физико-математическое моделирование систем: Материалы VIII Междунар. семинара. – Воронеж: ВГТУ, 2011. – Ч. 2. – С. 79-85.

[19] Филиппов, В.В. Моделирование деформаций и зонной диаграммы гетероструктуры кремний-германий / В.В. Филиппов, А.Н. Власов, Е.Н. Бормонтов // Флуктуационные и деградационные процессы в полупроводниковых приборах – 2011: Материалы докл. науч.-техн. семинара. – М.: МНТОРЭС им. А.С. Попова, МЭИ, 2012. – С. 112-121.

Власов А.Н. Особенности электронных и кинетических свойств анизотропных и кластерных полупроводниковых структур

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Липецкий государственный педагогический университет» 398020, г. Липецк, ул. Ленина, 42.

Отпечатано в РИЦ ФГБУ ВПО «ЛГПУ».

Подписано в печать 25.04.2014г.

Заказ № 1049. Формат 60x84 1/16. 1 п.л. Тир. 120 экз.