

УДК 530.1

З. Ж. ЖАНАБАЕВ, Т. Ю. ГРЕВЦЕВА

ФРАКТАЛЬНОСТЬ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК

Показана возможность моделирования пространственного распределения электронов, дырок и примесей (дефектов различного типа) в наноструктурированных полупроводниковых тонких пленках. При помощи численного анализа описаны перемежаемые, неоднородные распределения концентрации частиц, характерные для картин поверхностей, полученных при помощи сканирующей туннельной, атомно-силовой и электронной микроскопии.

Полупроводниковые пленки имеют кластерную структуру, которая является иерархически самоподобной и самоаффинной на разных пространственных масштабах, т.е. фрактальной и мультифрактальной. Для описания физических явлений в тонких полупроводниковых пленках необходимо знать распределение носителей тока, зависящее от фрактальной размерности их множества. Определение фрактальных размерностей неоднородных, анизотропных (аффинных) объектов само по себе является отдельной научной проблемой. Однако можно использовать значения размерностей модельных фракталов, а также известные значения для самоподобных (информационных) и самоаффинных (энтропийных) множеств [1–3]. Целью настоящей работы является получение фрактального и мультифрактального распределения концентраций носителей тока в наноструктурированных полупроводниках и сравнение результатов с электронно-микроскопическими данными.

1. Уравнения, описывающие неравновесное распределение носителей тока

Обозначим через n , p , a соответственно концентрации квазичастиц – электронов, дырок и кластеров – дефектов различных типов – образований из атомов, молекул вещества и примесей в полупроводнике. Будем интересоваться изменением концентраций по координате x вблизи $x = x_*$, где x_* – координата центра кластера. Можно принять, что центром кластеризации преимущественно являются собственные и примесные атомы, молекулы. В более общем виде под кластеризацией можно понимать агрегацию (образование рыхлых скоплений) однотипных нейтральных дефектов.

Для учета нерегулярности движения носителей тока во фрактальной среде примем условие Липшица–Гёльдера, ограничивающее производную через дробный показатель степени аргумента $a < 1$. Этот показатель примем в виде $a = 1 - g_0$, где g_0 – фрактальная размерность множества точек разбиения аргумента. При $g_0 = 0$ имеем обычную производную. После этого производную концентрации электронов $n(x)$ запишем через конечные разности в виде

$$\frac{dn(x)}{dx} = \pm \frac{\delta_n}{(|x - x_*|)^{1-\gamma_n}}, \quad (1)$$

где d_n – масштаб измерения величины $n(x)$. В формулу (1) концентрация и координата входят в безразмерном виде относительно некоторых характерных масштабов. Знак «минус» («плюс») соответствует положительной (отрицательной) разности $\delta_n = n(x) - n(x_*)$.

Фрактальную меру $n(x)$ представим в виде

$$n(x) = n_0(x) \delta_n^{-(D-d)}, \quad (2)$$

где d – топологическая размерность ячейки (структуры) с пространственным масштабом, соответствующим d_n ; D – фрактальная размерность множества всех различных ячеек; $n_0(x)$ – равновесная (не фрактальная) концентрация электронов. Исключив d_n из формул (1), (2), имеем

$$\frac{dn(x)}{dx} = \pm (|x - x_*|)^{\gamma_n - 1} \left(\frac{n(x)}{n_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_n}},$$

$$\gamma_n = D_n - d, \quad d = 0, 1, 2, 3. \quad (3)$$

Неравновесная концентрация $n(x_1)$ для фиксированного значения x_1 задается в виде граничного условия.

Уравнение (3) запишем для множества случайно расположенных (из-за динамических, тепловых факторов) кластеров различного строения, т.е. для случая

$$x_* = \{x_{*j}(n, p, a)\}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

где x_{*j} – случайные числа, реализуемые в интервале $0 < x_{*j} < x_{\max}$. Тогда чередование знаков «плюс», «минус» в формуле (1) будет случайным, и его можно описать выражением $\text{sign}(\xi(x))$, где $x(x)$ – дельта-коррелированный случайный процесс. Положение электрона в интервале $x-x_*$ тоже определяется вероятностным образом. Эту вероятность определим как

$$P_n(x) = |\psi_n(n, a, p, x)|^2 (|x - x_*|), \quad (4)$$

где $\psi_n(n, a, p, x)$ – волновая функция электрона, находящегося в поле электронов, дырок, примесей (кластера). Эта функция должна быть выбрана на основе простых моделей взаимодействия электрона с кластером.

Принимая аналогичные рассуждения для концентрации дырок $p(x)$ и примесей (кластеров) $a(x)$, мы можем записать следующую систему уравнений:

$$\frac{dn(x)}{dx} = \text{sign}(\xi(x)) |\psi_n(n, a, p, x)|^2 \Theta(|x - x_*|)^{\gamma_{0n}} \left(\frac{n(x)}{n_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_n}}, \quad (5)$$

$$\frac{dp(x)}{dx} = \text{sign}(\xi(x)) |\psi_p(n, a, p, x)|^2 \Theta(|x - x_*|)^{\gamma_{0p}} \left(\frac{p(x)}{p_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_p}}, \quad (6)$$

$$\frac{da(x)}{dx} = \text{sign}(\xi(x)) |\psi_a(n, a, p, x)|^2 \Theta(|x - x_*|)^{\gamma_{0a}} \left(\frac{a(x)}{a_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_a}}, \quad (7)$$

$$\text{sign}(\xi(x)) = \begin{cases} +1, & \xi(x) > 0 \\ -1, & \xi(x) < 0 \end{cases}$$

Для учета специфики кристаллического или аморфного строения полупроводников волновые функции могут быть выбраны в виде функций Блоха, учитывающих зависимости концентраций от координаты. Если подставить в уравнения (5)–(7) даже самые простые выражения для волновых функций, то все равно невозможно интегрировать полученную систему дифференциальных уравнений в силу их стохастичности. Поэтому рассмотрим их дискретную форму.

2. Нелинейное отображение для концентраций носителей тока

Для простоты вначале запишем уравнение (1) с определенным знаком плюс через последовательность дискретных значений n :

$$\frac{n_{i+1}}{\Delta x} = \left(\frac{n_i}{\Delta x} \right)_{\gamma_0} + \frac{\delta_{n,i}}{|\Delta x|^{1-\gamma_{0n}}}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (8)$$

где индекс γ_0 означает необходимость регуляризации (ограничения) данного члена в пределах масштаба измерения δ_{ni} путем введения дробного показателя степени γ_0 . По структуре правой части формулы (1) запишем

$$\left(\frac{n_i}{\Delta x} \right)_{\gamma_0} = \frac{n_i \delta_{n,i}}{|\Delta x|^{1-\gamma_{0n}}}. \quad (9)$$

Дискретные значения отсчета n_i можно взять через равные интервалы $\Delta x = 1$, тогда формулы (5)–(7) принимают вид

$$n_{i+1} = \left\{ n_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_n(a, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{n_i}{n_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_n}}, \quad (10)$$

$$p_{i+1} = \left\{ p_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_p(a, n_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{p_i}{p_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_p}}. \quad (11)$$

$$a_{i+1} = \left\{ a_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_a(n_i, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{a_i}{a_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_a}} \quad (12)$$

Возможны различные подходы к определению

волновых функций квазичастиц. Разделив электроны на электроны кластера и свободные (валентные) электроны, запишем гамильтониан для рассматриваемой задачи в следующем виде [4]:

$$H = \sum_l \frac{\hat{P}_l^2}{2M_l} + \sum_{l,m} U(\hat{R}_l - \hat{R}_m) + \sum_i \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + \sum_{i,l} V(\hat{r}_i - \hat{R}_l) + \sum_{i,j} \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{|\hat{r}_i - \hat{r}_j|}, \quad (13)$$

где индексы l и m нумеруют кластеры, индексы i и j – электроны; \hat{P} , M – импульс и масса кластера; \hat{P} , m – импульс и масса электрона; $U(\hat{R}_l - \hat{R}_m)$ – потенциал взаимодействия между кластерами; $V(\hat{r}_i - \hat{R}_l)$ – потенциал взаимодействия свободных электронов с кластерами. Считая, что каждый электрон взаимодействует с кластером независимо от остальных, получим уравнение Шредингера в виде

$$\left\{ \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + \sum_l V(\hat{r}_i - \hat{R}_l) \right\} \psi_i(\hat{r}_i, \hat{R}) = E_i \psi_i(\hat{r}_i, \hat{R}), \quad (14)$$

где E_i – энергия электрона, $\psi_i(\hat{r}_i, \hat{R})$ – волновая функция. Собственную функцию электрона представим в виде функции Блоха

$$\begin{aligned} \psi_k(\hat{r}) &= \psi_R(\hat{r}) \exp(i\hat{k}\hat{r}), \\ \psi_R(\hat{r} + \hat{R}) &= \psi_R(\hat{r}), \end{aligned} \quad (15)$$

где \hat{k} – волновой вектор. Из условий (15) вытекает, что

$$\psi_k(\hat{r} + \hat{R}) = \psi_k(\hat{r}) \exp(i\hat{k}\hat{R}). \quad (16)$$

Можно построить волновые функции, центрированные на узлах кластеров \hat{R} , т.е. записать через функции Ванье $\phi(\hat{r} - \hat{R})$:

$$\psi_k(\hat{r}) = \sum_{\hat{R}} \phi(\hat{r} - \hat{R}) \exp(i\hat{k}\hat{R}). \quad (17)$$

В приближении сильной связи между электронами и кластерами можно аппроксимировать функции Ванье атомными орбиталями ($\phi(\hat{r} - \hat{R}) = \phi_{n,l}(r)$):

$$\begin{aligned} \phi_{n,l}(r) &= \frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \Theta \\ \Theta(2r)^l e^{-\frac{r}{n}} F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right), \end{aligned} \quad (18)$$

где n – главное квантовое число; l – орбитальное квантовое число; F – вырожденная гипергеометрическая функция. В системе центра масс электрона и дырки формула (17) описывает и поведение дырки. В другом предельном случае слабой связи электрона с кластером можно воспользоваться приближением плоских волн:

$$\psi_k(x) = \psi_0 \exp(i(k_x + k_p + k_a)x). \quad (19)$$

3. Результаты численного анализа

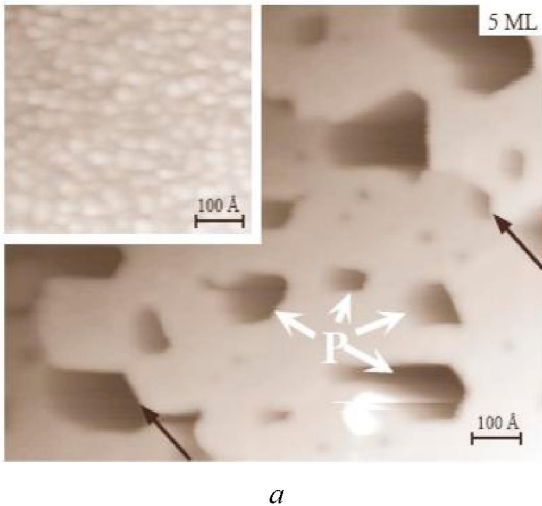


Рис. 1. Электронная микроскопия поверхности Ag, адсорбированного на подложке Si. (а) – эксп. [5], (б) – теор.: $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$, $n_0 = p_0 = a_0 = 5$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 100$

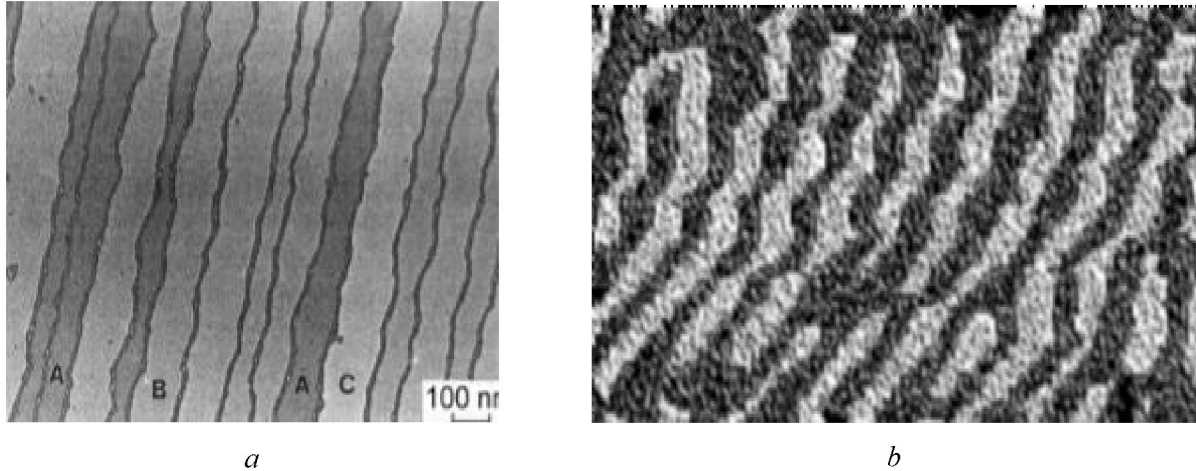


Рис. 2. Поверхность Si после осаждения на нее 4 монослоев In.

(a) – эксп. [6], (b) – теор.: $\gamma_n = 0.53$, $\gamma_p = 2 + I_2$, $\gamma_a = 3 + I_2$, $n_0 = p_0 = a_0 = 2.6$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 100$

На основе уравнений (10), (11), (12) и формул (17) и (19) получены численные реализации, представленные на рис. 1–5. В силу случайности функции $x(x)$ имеем в разных направлениях не идентичные, а случайно смещенные по фазе кривые. Форма поверхности полупроводниковой тонкой пленки зависит от фрактальной размерности. Варьируя значения параметров $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a, n_0, p_0, a_0$, можно получить картины, аналогичные электронно-микроскопическим снимкам поверхностей тонких полупроводниковых пленок [5–9].

Рис. 1 получен в эксперименте [5] по эпитаксии пленки из пяти монослоев Ag на Si (001)2 θ 1, выполненной при 65 К. Изображение получено при помощи сканирующей туннельной микроскопии. Пленка была подвергнута отжигу при туннельном токе 0.2 нА и максимальном напряжении 5 В при комнатной температуре. Рис. 2 соответствует эксперименту [6], при котором осаждение In проведено на подложку, полученную напылением одного монослоя Ga на поверхность Si(111) – $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ – Ga при комнатной температуре. Картина получена при помощи сверхвысоковакуумного сканирующего электронного микроскопа. Изображения поверхностей, показанные на рис. 3, получены при помощи атомно-силовой микроскопии в работе [7], в которой была исследована топология поверхностей GaAs (100) до и после обработки в парах селена. В данной работе использовался высокоомный ($\sim 10^{16}$ см $^{-3}$) арсенид галлия n-типа. После обработки арсенида

галлия в парах селена на его поверхности образовались островки Ga $_2$ Se $_3$ с латеральными размерами порядка 100–200 нм и высотой 50–70 нм. В экспериментальной работе [8] получено изображение полупроводниковой подложки GaAs (100) p^+ -типа (рис. 4), характеризующееся высокой концентрацией дырок. Изображение поверхности полупроводника получено атомно-силовым микроскопом в атмосферных условиях при комнатной температуре. На рис. 5, показана поверхность p – CdTe, полученная в работе [9] при помощи атомно-силовой микроскопии. В этой работе исследовано образование наноразмерных структур на поверхности кристаллов CdTe в зависимости от мощности лазерного излучения при однократном облучении.

Справа от экспериментальных снимков помещены модельные поверхности, полученные из уравнений (10)–(12) (рис. 1(b), 2(b), 3(d,e,f), 4(b)). Для построения моделей, показанных на рис. 5 (b,c), было использовано уравнение (10). Рис. 5(b) получен, когда функция $\varphi_{n,l}(r)$ выражена радиальной функцией электрона атома водорода в состоянии 1s, в остальных случаях она выражена через формулу (19). Результаты численного анализа, полученные при помощи формулы (19), согласуются с экспериментальными данными при сравнительно малых значениях фрактальной размерности. При больших значениях фрактальной размерности более эффективным является применение функций Блоха–Ванье, что под-

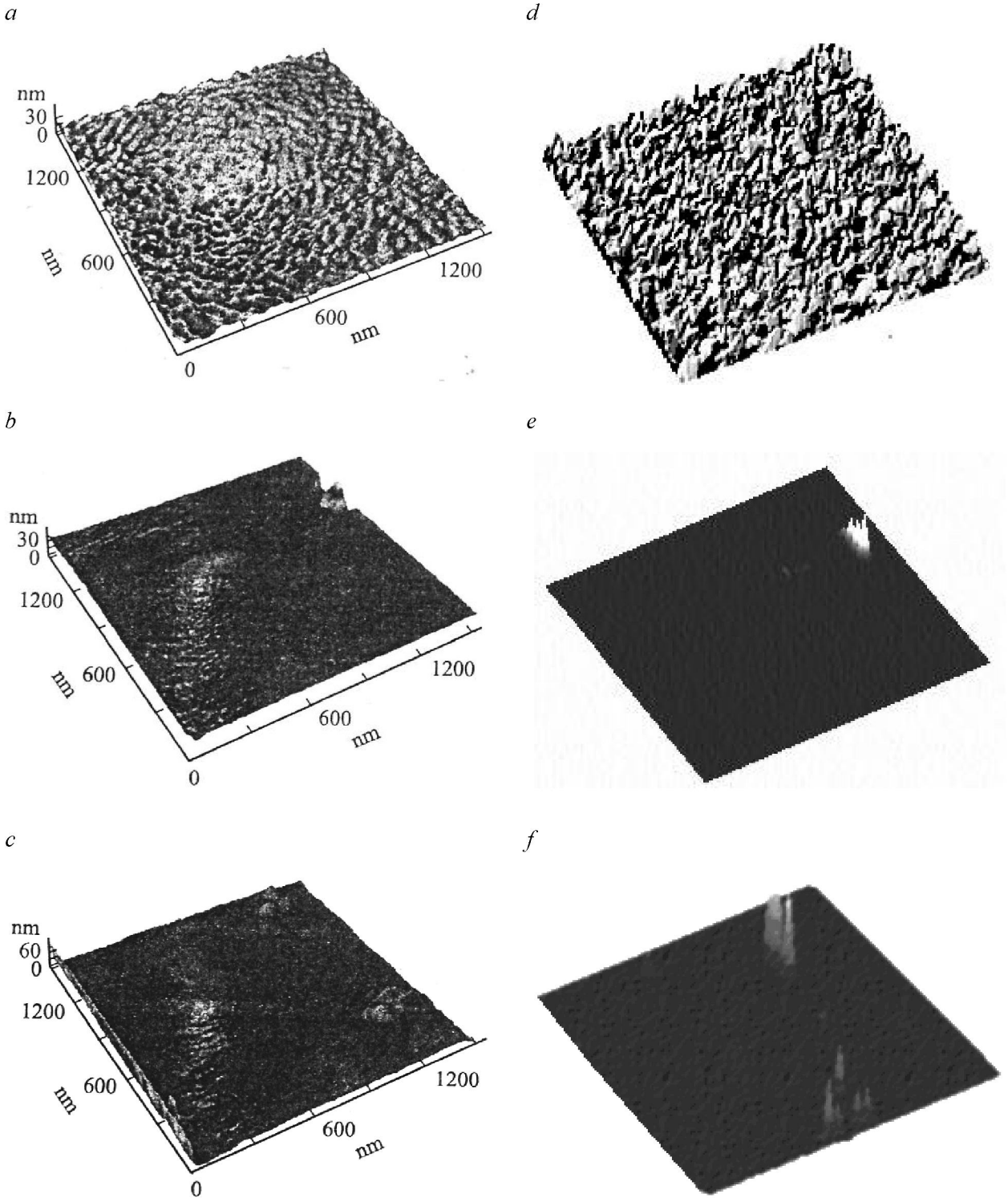


Рис. 3. Поверхность GaAs (100): Эксп. [7]:

(а) – исходная поверхность, (б) – поверхность, обработанная в парах Se в течение 3 мин., (с) – в течение 5 мин.

Теор.: (d) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = 1 + I_2$, $n_1 = p_1 = a_1 = 1$, $a_1 = 1$, $n_0 = a_0 = p_0 = 20$,

(e) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = I_1$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 20$, $n_0 = p_0 = a_0 = 2$,

(d) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = I_1$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 20$, $n_0 = p_0 = a_0 = 2$

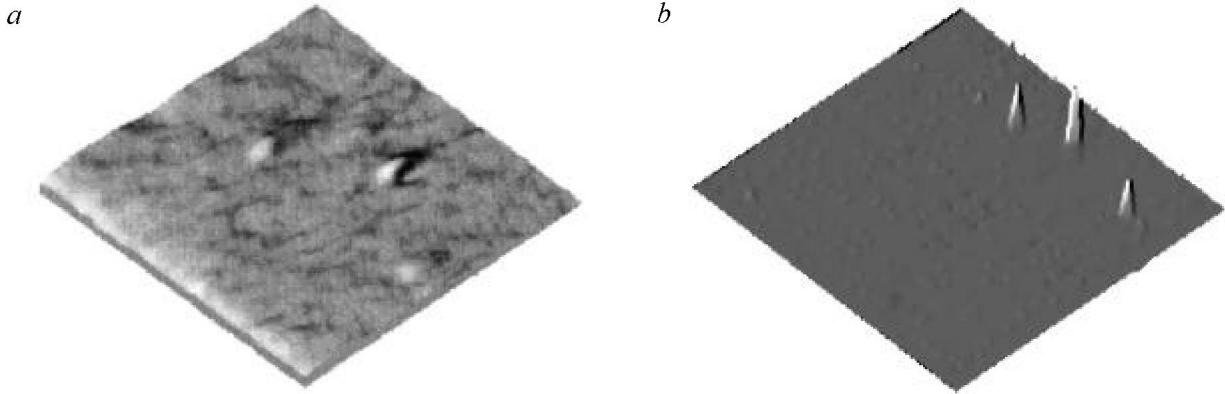


Рис. 4. Морфология поверхности $p^+ - GaAs(100)$.

(a) – эксп. [8]. (b) – теор.: $\gamma_n = I_2$, $\gamma_p = \gamma_a = 1 + I_1$, $n_0 = p_0 = a_0 = 1.5$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 15$

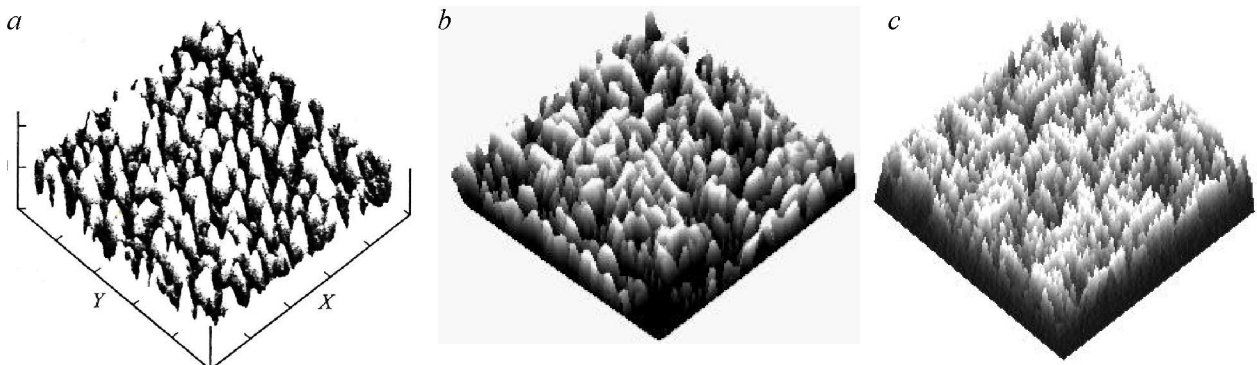


Рис. 5. Поверхность $p - CdTe$.

(a) – эксп. [9]. (b), (c) – теор.: $\gamma_n = 3 + I_2$, $n_1 = p = 1$, $a = 10$, $n_0 = 3$

тверждается сравнением рис. 5(a) с моделями поверхностей, представленными на рисунках 5(b) и 5(c).

Теория позволяет выделить следующие закономерности фрактальных поверхностей полупроводников. Квазирегулярные линейчатые и плоские структуры описываются малыми значениями фрактальной размерности ($\gamma \leq I_1$). Мелкомасштабные случайные образования соответствуют относительно большим значениям $\gamma \geq I_2 + d$, $d = 0, 1, 2, 3$. Стабилизирующее влияние подложки на образование структур учитывается преобладающей долей равновесной концентрации частиц ($n_0 > 1$). Количество свободных (валентных) электронов в кластере учитывается соответствующим выбором функции Блоха-Ванье или вида радиальной функции, которая используется для аппроксимации этой функции.

Таким образом, построенные стохастические и фрактальные (мультифрактальные) модели достаточно детально описывают различные типы электронно-микроскопических изображений поверхностей тонких пленок. Теория учитывает фрактальные размерности кластеров, множества электронов и дырок, их стохастическое распределение, относительную концентрацию равновесных компонентов, вид волновой функции электрона, взаимодействующего с кластером. Поэтому возможно и количественное описание по предлагаемому методу. Результаты данной работы могут быть использованы для исследования электрических и оптических свойств наноструктурированных полупроводников.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жанабаев З.Ж. Размерности самоаффинных фракталов // Фракталы и прикладная синергетика. М.: Изд-во МГОУ, 2003. С. 198-201.

2. *Жанабаев З.Ж., Байболатов Е.Ж., Бейсебаева А.С., Елдесбай А.Т.* Самоподобие и самоаффинность многомерных фракталов // Изв. НАН РК. Сер. физ.-мат. 2005. №2. С. 48-60.

3. *Жанабаев З.Ж., Гревцева Т.Ю., Данегулова Т.Б.* Фрактальное распределение носителей тока в полупроводниках // Вестн. КазНУ. Сер. физ. 2006. № 1(21). С. 110-116.

4. *Ридли Б.* Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986. 304 с.

5. *Matsuda I., Tanikawa T., Hasegawa Sh., Yeom H.W., Tono K., Ohta T.* Quantum-Well States in Ultra-Thin Metal Films on Semiconductor Surfaces // Journal of Surface Science and Nanotechnology. 2004. V. 2. P. 169-177.

6. *Yamanaka T.* Atomic depth distribution analysis and growth dynamics of metals on metal-covered Si(111) surfaces studied by incident-angle-dependent RHEED-TRAXS (total-reflection-angle x-ray spectroscopy) // Journal of Surface Science and Nanotechnology. 2003. V. 1. P. 91-101.

7. *Безрядин Н.Н., Котов Г.И., Арсентьев И.Н., Стародубцев А.А.* Формирование наноструктур в системе $\text{Ga}_2\text{Se}_3 / \text{GaAs}$ // Физика и техника полупроводников. 2005. Вып. 9. С. 1025-1028.

8. *Панин А.В., Шууров А.Р., Калыгина В.М.* Влияние серы и селена на рельеф поверхности диэлектрических пленок и электрические характеристики структур металл-диэ-

лектрик – p – GaAs // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35, вып. 1. С. 78-83.

9. *Байдуллаева А., Власенко А.И., Кузан Л.Ф., Литвин О.С., Мозоль П.Е.* Образование наноразмерных структур на поверхности кристаллов p -CdTe при однократном воздействии импульсом излучения рубинового лазера // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39, вып. 9. С. 1064-1067.

Резюме

Нанокұрылымды шала өткізгіштік жұқа қабыршақтардағы электрондардың, кемтіктердің және қоспалардың кеңістіктік таралуын модельдеу мүмкіндігі көрсетілген. Сандық әдістер арқылы әртүрлі микроскопиямен алынған бет суреттерін сипаттайтын бөлшектердің алмасулы, әртекті орналасуы алынған.

Summary

A model of spatial distribution of electrons, holes and admixtures (defects of different types) in nanostructured semiconductor thin films is suggested. The intermittent, heterogeneous distributions of concentration typical for images of surfaces obtained by scanning tunneling microscopy, atomic-force microscopy and electron microscopy are described by numerical analyses.