

## ВПЛИВ МЕТАЛУ НА ПОВЕРХНЕВІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПІВПРОВІДНИКА

Л.Г. Ільченко<sup>1</sup>, В.В. Ільченко<sup>2</sup>, В.В. Лобанов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України  
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна

<sup>2</sup>Київський університет імені Тараса Шевченка  
вул. Володимирська, 64, Київ, 02033, Україна

*В наближенні діелектричного формалізму при відсутності безпосереднього контакту напівпровідник–метал та зовнішньої напруги для несиметричної за об'ємними та поверхневими характеристиками «напівпровідник–вакуум–метал» (НВМ) системи розраховано потенціал їх взаємодії, який враховує відмінності в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ, зарядовий стан поверхонь напівпровідника і металу та їх мікроскопічну структуру. Неперервність потенціалу сил зображення і, відповідно, сумарного потенціалу та єдиний (вакуумний) рівень відліку енергії в НВМ системі забезпечується коректним урахуванням просторової дисперсії функцій діелектричної проникності напівпровідника та металу.*

*Зі зменшенням товщини вакуумної щільності  $L < 1$  нм внесок структурного потенціалу в сумарний потенціал суттєво зростає, оскільки збільшується взаємний вплив мікроскопічної (атомної) структури кожної з двох поверхонь. Показано, що структурний потенціал, який є суперпозицією вкладів мікроскопічної структури кожної з двох поверхонь, несиметричний і обумовлює локальну зміну висоти потенціального бар'єру у вакуумній щільності, а також латеральну (уздовж меж поділу) зміну сумарного потенціалу у всій НВМ системі.*

*Присутність металу на відстанях менших області поверхневого заряду поверхні напівпровідника змінює величину поверхневого вигину зон напівпровідника, а при подальшому зменшенні вакуумного проміжку до відстаней  $L < 1$  нм мікроскопічна структура металевієї поверхні може стимулювати латеральний перерозподіл густини заряду (поверхневих станів) не тільки на поверхні напівпровідника, але і в його приповерхневій області.*

### Вступ

Дослідження атомної структури поверхонь напівпровідників і металів та їх меж поділу методами скануючої тунельної мікроскопії (СТМ), балістичної електронної емісійної мікроскопії (БЕЕМ) тощо оснований на тунелюванні електронів крізь надмалі проміжки ( $L \sim 0,3-1$  нм) між металевим вістрям та підкладкою [1–4]. Тому визначення форми та висоти потенціального бар'єру, який виникає між близько розташованими напівпровідниковим та металевими матеріалами, є ключовою задачею в фізиці поверхні твердих тіл [5–8], вирішення якої дозволяє прямий розрахунок величини переносу заряду при прикладеній зовнішній напрузі  $U$ .

Наявність заряду з густиною  $\sigma_1 \neq 0$  на поверхні напівпровідника приводить до утворення області просторового заряду (ОПЗ), параметри якої – товщина ОПЗ ( $L_{ОПЗ}$ ), величина поверхневого вигину зони, рельєф потенціальної поверхні та інші визначаються як сумарною густиною  $\sigma_1$  поверхневого заряду та його латеральним розподілом, так і характеристиками об'ємної фази напівпровідника – діелектричною сталою  $\varepsilon_1$ , типом вільних носіїв, рівнем об'ємного легування тощо [1, 5–8]. Сумарний потенціал для вільної поверхні напівпровідника ( $\sigma_1 = 0$ ), неперервність якого на межі поділу напівпровідник – вакуум ( $x = 0$ ) зумовлена коректним врахуванням просторової

дисперсії функції діелектричної проникності  $\varepsilon_1(\vec{k})$  напівпровідника, був розрахований в рамках нелокальної електростатики в роботах [9–13].

Наявність металу на відстані  $L < L_{ОПЗ}$  від поверхні напівпровідника зумовлює частковий перерозподіл поверхневого заряду напівпровідника під впливом вільних електронів металу і його поверхневого заряду з густиною  $\sigma_2$  [14, 15].

При подальшому зменшенні вакуумного інтервалу  $L < 10$  нм між напівпровідником та металом формується потенціальний бар'єр, виникнення якого зумовлено відмінністю в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ, а величина і форма визначаються розподілом потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  ( $j = 1, 2, 3$ ) [16–20].

Неперервність  $V_j^0(x)$  на межах поділу та єдиний (вакуумний) рівень відліку енергії досягаються коректним врахуванням просторової дисперсії функцій діелектричної проникності напівпровідника  $\varepsilon_1(\vec{k})$  і металу  $\varepsilon_3(\vec{k})$  [9–20]. Неperервність  $V_j^0(x)$  обумовлює і неперервність сумарного потенціалу  $V_j(x)$ , бо наявність металу та некомпенсованого заряду на його поверхні на відстані  $L < L_{ОПЗ}$  призводить до перерозподілу  $V_j(x)$  у всій системі «напівпровідник–вакуум–метал» та до зміни розподілу приповерхневого потенціалу ОПЗ в напівпровіднику [14, 15].

Зменшення товщини вакуумної щілини  $L < 1$  нм приводить до збільшення внеску від структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ , який визначається структурою металевої та напівпровідникової поверхонь, в сумарний потенціал  $V_j(\vec{r})$  як всередині вакуумної щілини, так і в приповерхневій області напівпровідника [12, 13, 21–25].

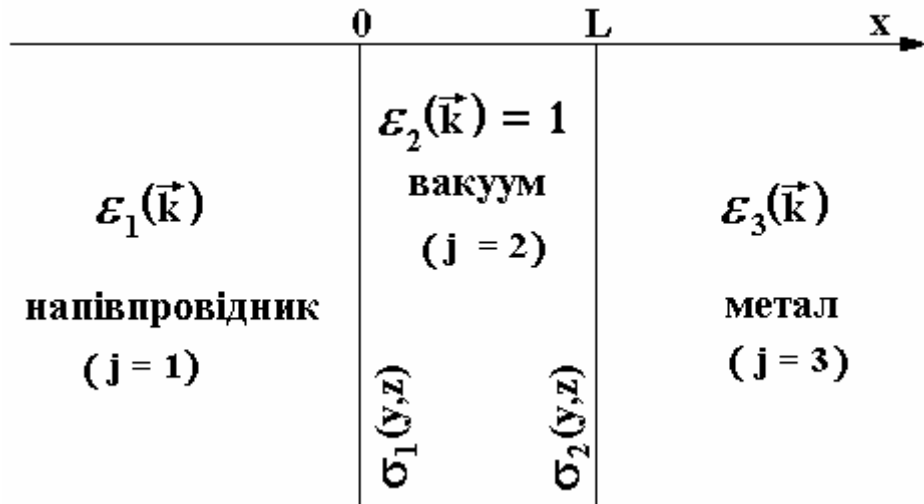
В роботі в наближенні методу діелектричного формалізму для системи трьох середовищ з просторовою дисперсією діелектричних функцій [16–20] проведено теоретичний розрахунок розподілу сумарного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  в НВМ системі в залежності від товщини  $L$  вакуумного проміжку між напівпровідником та металом. При цьому враховані відмінності в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ, зарядові стани металевої і напівпровідникової поверхонь та їх мікроскопічна структура [14, 15, 19, 22].

Для легованих напівпровідників  $n$ -типу проаналізовано вплив металу та мікроскопічної (атомної) структури його поверхні на поверхневі характеристики напівпровідника. Показано, що при наближенні металу на відстань  $L < 1$  нм рельєф потенціалу на поверхні та в приповерхневій області невиродженого напівпровідника суттєво змінюється відповідно до атомної структури поверхні металу [22–25].

Аналіз впливу металу та зарядового стану його поверхні на формування ОПЗ невиродженого напівпровідника та на рельєф його потенціалу в залежності від товщини  $L$  вакуумного зазору проведено на прикладі системи  $n$ -Si–вакуум–Au.

## Теорія

На рис. 1 наведена несиметрична тришарова структура, яка складається з напівпровідника з діелектричною функцією  $\varepsilon_1(\vec{k})$  в області  $x \leq 0$  і густиною заряду  $\sigma_1(y, z)$  на його поверхні ( $x = 0$ ) та металу з діелектричною функцією  $\varepsilon_3(\vec{k})$  в області  $x \geq L$  з густиною заряду  $\sigma_2(y, z)$  на поверхні ( $x = L$ ), які розділені вакуумним проміжком  $0 \leq x \leq L$ , в якому  $\varepsilon_2(\vec{k}) = 1$ .



**Рис. 1.** Схематичне зображення несиметричної НВМ структури.

Вирішення задачі про розрахунок потенціалу, що діє на точковий заряд  $e$  відносно спільного (вакуумного) рівня відліку енергії, для тришарової системи ( $j = 1, 2, 3$ ) без врахування зарядового стану меж поділу було знайдено в роботах [16–20] в рамках наближення діелектричного формалізму, яке ґрунтується на розв’язку нелокального рівняння Пуассона для функцій Гріна  $D_j(q; x, x')$  при умові їх неперервності ( $j = 1, 2, 3$ ) та їх перших похідних на поверхнях напівпровідника та металу

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - q^2 \right) \cdot D(q; x, x') - 4\pi e^2 \int dx' \Pi(q; x, x') D(q; x', x) = \delta(x - x'), \quad (1)$$

де  $\delta(z)$  – дельта-функція;  $\Pi(q; x, x')$  – поляризаційний оператор неоднорідної системи,  $q = \{q_y, q_z\}$  – двовимірна компонента хвильового вектора. Було також показано, що отриманий розподіл потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  є неперервним на межах поділу при коректному врахуванні просторової дисперсії діелектричних функцій в кожному з трьох середовищ.

Функція Гріна  $\Delta D_j(q; x)$ , яка пов’язана з зарядовим станом меж поділу і визначає зарядову компоненту  $\Delta V_j(\vec{r})$  повного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  в кожному з трьох середовищ, є розв’язком однорідного рівняння Пуассона (1) з граничними умовами, які враховують скінчений стрибок нормальної компоненти вектора електростатичної індукції на межах поділу ( $x = 0$  та  $x = L$ ), що дає

$$\left. \begin{aligned} D_j(q; 0, x') - D_{j-1}(q; 0, x') &= 0 \\ \partial D_j(q; 0, x') - \partial D_{j-1}(q; 0, x') &= 4\pi \sigma_k(q) \end{aligned} \right\}, \quad (2)$$

де  $\sigma_k(q)$  – фур’є-компонента густини заряду на поверхнях напівпровідника ( $k = 1$ ) та металу ( $k = 2$ ).

Згідно з результатами робіт [14, 15, 21–25] після розв’язку рівняння (1) з урахуванням граничних умов (2), тобто зарядового стану поверхонь напівпровідника та металу (рис. 1), повний потенціал  $V_j(\vec{r})$  в тришаровій системі визначається рівняннями

$$V_j(\vec{r}) = V_j^0(x) + \Delta V_j(\vec{r}), \quad \Delta V_j(\vec{r}) = \Delta V_j^\sigma(x) + \Delta V_j^{st}(\vec{r}), \quad (3)$$

де  $V_j^0(x)$  – потенціал сил зображення [16–20];  $\Delta V_j(\vec{r})$  – потенціал, зумовлений наявністю заряду з однорідними густинами  $\sigma_1$  ( $x=0$ ) на поверхнях напівпровідника та  $\sigma_2$  ( $x=L$ ) металу;  $\Delta V_j^\sigma(x)$  – зарядовий потенціал;  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  – структурний потенціал [21–25].

Для НВМ структури діелектрична функція  $\varepsilon_1(\vec{k})$  легованого напівпровідника задається у вигляді [12–15]

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = 1 + \frac{\varepsilon_1 - 1}{1 + \left( \frac{\vec{k}^2}{\lambda_1^2} \right) (\varepsilon_1 - 1)} + \frac{\kappa_1^2}{\vec{k}^2}, \quad \vec{k}^2 = k_\perp^2 + q^2, \quad (4)$$

де  $\varepsilon_1$  – діелектрична стала кристалічної ґратки (при  $\vec{k} \rightarrow 0$ );  $\lambda_1^{-1}$  – ефективний радіус екранування зв'язаними (валентними) електронами іонних остовів кристалічної ґратки, який по порядку величини дорівнює розміру атома (іона) і який розраховується, приймаючи до уваги зонну структуру напівпровідника [5–8, 16–18];  $k_\perp$  – компонента хвильового вектора, нормальна до меж поділу;  $\kappa_1^2 = 4\pi e^2 n_1 / \varepsilon_1 k_B T$  в наближенні Дебая-Хюккеля (НДХ) для невиродженого електронного газу,  $k_B$  – постійна Больцмана;  $n_1$  – концентрація невиродженого газу вільних електронів (дірок) (в роботі розглядається напівпровідник  $n$ -типу). Перші два члени в (4) відповідають інтерполяційній моделі Інсона [26, 27]. Як показано в [9, 10, 13], така комбінація наближення Інсона з НДХ приводить до асимптотики  $\varepsilon_1(\vec{k}) \approx 1 + (\lambda_1^2 + \kappa_1^2) / \vec{k}^2$  при умові  $k \gg \lambda_1$  та до неперервності електростатичного потенціалу на межах поділу.

Для врахування просторової дисперсії в діелектричній функції  $\varepsilon_3(\vec{k})$  металу зручно скористатися загальновідомим довгохвильовим наближенням Томаса–Фермі (НТФ) [9–11, 28], в якому  $\varepsilon_3(\vec{k})$  має вигляд

$$\varepsilon_3(\vec{k}) = 1 + \frac{\kappa_3^2}{k^2}, \quad k = \{k_\perp, q\}, \quad (5)$$

де  $\kappa_3^2 = 6\pi e^2 n_3 / E_F^3$ ;  $E_F^3 = \hbar^2 (3\pi^2 n_3)^{2/3} / 2m_3$  – енергія Фермі;  $n_3$ ,  $m_3$  – концентрація та ефективна маса вільних електронів в металі відповідно.

При врахуванні зарядового стану і мікроскопічної структури напівпровідникової і металевої поверхонь при  $L \rightarrow \infty$  будемо вважати, що латеральний розподіл густин заряду на поверхнях напівпровідника  $\sigma_1(y, z)$  ( $x \leq L$ ) та металу  $\sigma_2(y, z)$  ( $x \geq L$ ) сформовано впорядкованими ґратками поверхневих атомів або адсорбованих іонів з двовимірною концентрацією  $N_{i,n} = b_{i,n}^{-2}$ , ( $b_{i,n}$  – сторона ґратки) і ефективним зарядом  $e_{i,n}^*$  на поверхневих атомах чи адсорбованих іонах  $i, n$ -го типу. Для спрощення розрахунків розглянемо тільки квадратні ґратки, так що фур'є-компонента густин заряду  $\sigma_1(y, z)$  та  $\sigma_2(y, z)$  на впорядкованих ґратках може бути представлена у вигляді [21–25]

$$\begin{aligned}\sigma_1(q) &= \sum_{i=1}^{\nu_1} \sigma_i(q) = \\ &= (2\pi)^2 \sum_{i=1}^{\nu_1} e_i^* N_i \left[ \delta(q_y) \cdot \delta(q_z) + \delta\left(q_y - 2\pi/a_i\right) \cdot \delta\left(q_z - 2\pi/a_i\right) \right],\end{aligned}\quad (6)$$

$$\begin{aligned}\sigma_2(q) &= \sum_{n=1}^{\nu_2} \sigma_n(q) = \\ &= (2\pi)^2 \sum_{n=1}^{\nu_2} e_n^* N_n \left[ \delta(q_y) \cdot \delta(q_z) + \delta\left(q_y - 2\pi/b_n\right) \cdot \delta\left(q_z - 2\pi/b_n\right) \right],\end{aligned}\quad (7)$$

де  $\nu_1$  та  $\nu_2$  – кількість типів атомних ґраток на поверхнях металу та напівпровідника відповідно.

Використовуючи результати робіт [14, 15, 23] для однорідної (не модульованої) густини заряду  $\sigma_1 = \sum_{i=1}^{\nu_1} e_i^* N_i$  на напівпровідниковій та  $\sigma_2 = \sum_{n=1}^{\nu_2} e_n^* N_n$  на металевій поверхнях, коли фур'є-компонента сумарної густини заряду визначається першими членами рівнянь (6) та (7), зарядова складова  $\Delta V_j^\sigma(x)$  повного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  у НВМ системі задається рівняннями

$$\Delta V_1^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \cdot a_1(0;|x|)}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot [\sigma_1 \cdot (1 + \kappa_3 L) + \sigma_2], \quad (x \leq 0), \quad (8)$$

$$\Delta V_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot \{\sigma_1 \cdot a_1(0;0) \cdot [1 + \kappa_3(L-x)] + \sigma_2 \cdot [a_1(0;0) + x]\}, \quad (0 \leq x \leq L), \quad (9)$$

$$\Delta V_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \cdot e^{-\kappa_3 \cdot (x-L)}}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot \{\sigma_1 \cdot a_1(0;0) + \sigma_2 \cdot [a_1(0;0) + L]\}, \quad (x \geq L). \quad (10)$$

Тут

$$a_1(0;|x|) = \frac{1}{\beta_+^2 - \beta_-^2} \left[ \frac{e^{-|x|\beta_+} \left( \beta_+^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right) - e^{-|x|\beta_-} \left( \beta_-^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right)}{\beta_+} \right], \quad (11)$$

де

$$\beta_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[ \kappa_1^2 (1 + \Lambda^2) \right] \pm \frac{\kappa_1^2}{2} \sqrt{(1 + \Lambda^2)^2 - \frac{4\Lambda^2}{\varepsilon_1}}, \quad \Lambda = \frac{\lambda_1}{\kappa_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - 1}}. \quad (12)$$

Структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  в кожному з трьох середовищ для НВМ системи задається рівностями [29]

$$\Delta V_j^{st}(\vec{r}) = -4\pi e \sum_{i=1}^{\nu_1} e_i^* N_i \cdot [H_i^\alpha(x)]_j \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{b_i} y\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{b_i} z\right) -$$

$$-4\pi e \sum_{n=1}^{\nu_2} e_n^* N_n \cdot [H_n^\beta(x)]_j \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{b_n} y\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{b_n} z\right), \quad (13)$$

де

$$\left. \begin{aligned} [H_i^\alpha(x)]_1 &= \frac{1}{\chi_\alpha} \cdot A_1^\alpha(x) \cdot \left[ \alpha_1^i \cdot A_3^\alpha(L) \cdot \operatorname{ch}(L \cdot \alpha_1^i) + \operatorname{sh}(L \cdot \alpha_1^i) \right] \\ [H_n^\beta(x)]_1 &= \frac{1}{\chi_\beta} \cdot A_1^\beta(x) \cdot \left[ \beta_1^n \cdot A_3^\beta(L) \cdot \operatorname{ch}(L \cdot \beta_1^n) + \operatorname{sh}(L \cdot \beta_1^n) \right] \end{aligned} \right\}; \quad (j=1), \quad (14)$$

$$\left. \begin{aligned} [H_i^\alpha(x)]_2 &= \frac{1}{\chi_\alpha} \cdot A_1^\alpha(0) \cdot \left\{ \operatorname{sh}[(L-x) \cdot \alpha_1^i] + \alpha_1^i \cdot A_3^\alpha(L) \cdot \operatorname{ch}[(L-x) \cdot \alpha_1^i] \right\} \\ [H_n^\beta(x)]_2 &= \frac{1}{\chi_\beta} \cdot A_1^\beta(0) \cdot \left\{ \operatorname{sh}[(L-x) \cdot \beta_1^n] + \beta_1^n \cdot A_3^\beta(L) \cdot \operatorname{ch}[(L-x) \cdot \beta_1^n] \right\} \end{aligned} \right\}; \quad (j=2), \quad (15)$$

$$\left. \begin{aligned} [H_i^\alpha(x)]_3 &= \frac{1}{\chi_\alpha} \cdot A_3^\alpha(x) \cdot \alpha_1^i \cdot A_1^\alpha(0); \\ [H_n^\beta(x)]_3 &= \frac{1}{\chi_\beta} \cdot A_3^\beta(x) \cdot \beta_1^n \cdot A_1^\beta(0) \end{aligned} \right\}; \quad (j=3), \quad (16)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_\alpha &= (\alpha_1^i)^2 \cdot A_1^\alpha(0) \cdot A_3^\alpha(L) \cdot \operatorname{sh}(L \cdot \alpha_1^i) \\ &+ \alpha_1^i \cdot [A_1^\alpha(0) + A_3^\alpha(L)] \cdot \operatorname{ch}(L \cdot \alpha_1^i) + \operatorname{sh}(L \cdot \alpha_1^i) \\ \chi_\beta &= (\beta_1^n)^2 \cdot A_1^\beta(0) \cdot A_3^\beta(L) \cdot \operatorname{sh}(L \cdot \beta_1^n) \\ &+ \beta_1^n \cdot [A_1^\beta(0) + A_3^\beta(L)] \cdot \operatorname{ch}(L \cdot \beta_1^n) + \operatorname{sh}(L \cdot \beta_1^n) \end{aligned} \right\}; \quad (17)$$

$$A_1^{\alpha,\beta}(x) = \frac{1}{[(B_1^+)_{\alpha,\beta}]^2 - [(B_1^-)_{\alpha,\beta}]^2} \left\{ \frac{\exp\left\{-\left(B_1^+\right)_{\alpha,\beta} \cdot |x|\right\}}{(B_1^+)_{\alpha,\beta}} \cdot \left[ (B_1^+)_{\alpha,\beta} - \frac{\Lambda_1^2}{\varepsilon_1} \right] - \frac{\exp\left\{-\left(B_1^-\right)_{\alpha,\beta} \cdot |x|\right\}}{(B_1^-)_{\alpha,\beta}} \cdot \left[ (B_1^-)_{\alpha,\beta} - \frac{\Lambda_1^2}{\varepsilon_1} \right] \right\}; \quad (18)$$

$$\left. \begin{aligned} (B_1^\pm)_\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_1^2 + \Lambda_1^2 \pm \sqrt{(\kappa_1^2 + \Lambda_1^2)^2 - \frac{4 \cdot \Lambda_1^2 \cdot \kappa_1^2}{\varepsilon_1}}} \\ (B_1^\pm)_\beta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_1^2 + \Lambda_1^2 \pm \sqrt{(\kappa_1^2 + \Lambda_1^2)^2 - \frac{4 \cdot \Lambda_1^2 \cdot \kappa_1^2}{\varepsilon_1}}} \end{aligned} \right\}; \quad (19)$$

$$A_3^\alpha(x) = \frac{\exp\left\{-(x-L) \cdot \sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_3^2}\right\}}{\sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_3^2}},$$

$$A_3^\beta(x) = \frac{\exp\left\{-(x-L) \cdot \sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_3^2}\right\}}{\sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_3^2}};$$

$$\alpha_1^i = 2\pi/b_i \sqrt{2}; \quad \beta_1^n = 2\pi/b_n \sqrt{2}; \quad \Lambda_1 = \lambda_1 \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - 1}}. \quad (21)$$

## Результати

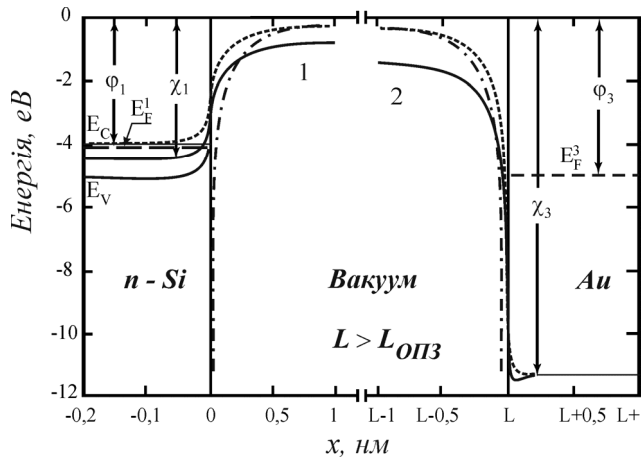
Розглянемо систему  $n$ -Si-вакуум-Au, яка широко використовується в напівпровідниковій мікроелектроніці і об'ємні параметри якої добре відомі [30, 31]. Для невідродженого напівпровідника  $n$ -типу ( $n$ -Si): діелектрична константа –  $\varepsilon_1 = 11,9$ , концентрація  $n_1 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , ефективна маса електронів  $m_\perp = 0,98$  (поперечна) і  $m_l = 0,19$  (повздожня),  $\lambda_1 = 5,917 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$  і  $\chi_1 = -E_c = 4,05 \text{ eV}$  – положення дна зони провідності в об'ємі напівпровідника. Для металу (Au)  $\varphi_3 = 5,1 \text{ eV}$ ,  $n_3 = 5,9 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  і  $m_3 = 0,87325 m_0$ , де  $m_0$  – маса вільного електрона. Значення параметрів наведені для  $T = 293 \text{ K}$ .

Виходячи з основних положень методу діелектричного формалізму для неоднорідної системи трьох середовищ [16–20], визначимо розподіл електростатичного потенціалу  $V_j(x)$  в НВМ системі за умови  $L > L_{OPZ}$  ( $L \rightarrow \infty$ ) $_\alpha$  та при врахуванні зарядового стану кожної з двох поверхонь [12–15, 21–25].

Результати розрахунків потенціалу сил зображення, отримані згідно робіт [16–20] та сумарного потенціалу  $V_j(x)$  (3) (з однорідними густинами заряду  $\sigma_1$  та  $\sigma_2$  на межах поділу), наведені на рис. 2. Вони отримані для  $n$ -Si-вакуум-Au системи згідно рівнянь (8) – (12) [14, 15], коли відстань між поверхнями перевищує товщину ОПЗ напівпровідника:  $L > L_{OPZ}$ . Результати приведені на рис. 2 штриховими та суцільними кривими відповідно. Там же штрих-пунктирною лінією показаний розподіл потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$ , розрахований в межах локальної електростатики для НВМ системи [20], коли  $\varepsilon_1(\vec{k}) \rightarrow \varepsilon_1 = const$  і  $\varepsilon_3(\vec{k}) \rightarrow \varepsilon_3 \rightarrow \infty$  для тих же відстаней  $L$  між поверхнями.

З рис. 2 видно, що розрахунки потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$ , проведені в рамках методу діелектричного формалізму для системи трьох середовищ [16–20] в наближенні локальної електростатики для  $\varepsilon_1(\vec{k})$  та  $\varepsilon_3(\vec{k})$ , приводять до нескінчених розривів потенціалу на поверхнях напівпровідника ( $x=0$ ) та металу ( $x=L$ ), тоді як врахування просторової дисперсії функцій діелектричної проникності  $\varepsilon_1(\vec{k})$  та  $\varepsilon_3(\vec{k})$  зумовлює неперервність  $V_j^0(x)$ . Наведені на цьому рисунку криві свідчать також, що в наближенні діелектричного формалізму для системи двох середовищ, розвинутого в

роботах [9–11], при умові  $L > L_{OPZ}$  поверхні напівпровідника і металу можна розглядати як дві незалежні системи напівпровідник–вакуум та метал–напівпровідник. Неперервність  $V_j^0(x)$  на межах поділу дозволяє коректний розгляд зарядового стану поверхонь (та їх мікроскопічної структури) в рамках моделі різких меж поділу, що і продемонстровано на рис. 2 наведеними результатами розрахунків сумарного потенціалу  $V_j(x)$  (3) для  $n$ -Si–вакуум–Au системи.



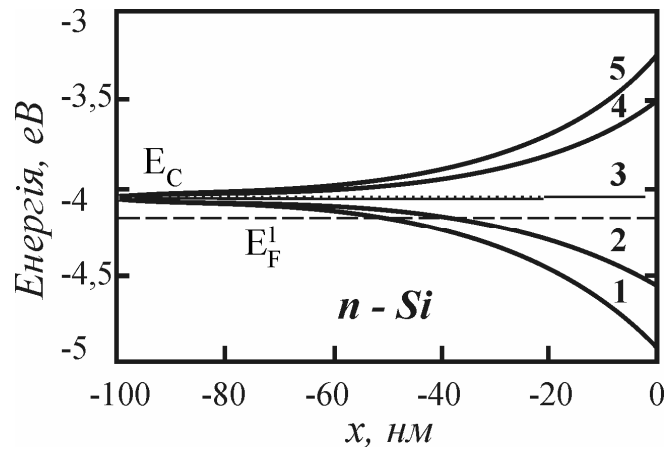
**Рис. 2.** Зонна енергетична діаграма  $n$ -Si–вакуум–Au системи та розподіли  $V_j(x)$  (суцільні криві 1 і 2) та  $V_j^0(x)$  (штрихові криві) в ній при  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12}$  і  $\sigma_2 = 1,00 \cdot 10^{14}$  е/см<sup>2</sup>, коли  $L > L_{OPZ}$ . Штрих-пунктирні криві – розподіл  $V_j^0(x)$ , отриманий в межах локальної електростатики.  $\phi_1$  і  $\chi_1$  та  $\phi_3$  і  $\chi_3$  – робота виходу та енергія споріднення до електрона напівпровідника ( $j = 1$ ) та металу ( $j = 3$ ).

Формування ОПЗ напівпровідника пов'язане з присутністю на його поверхні ( $x = 0$ ) заряду з густиною  $\sigma_1$  (поверхневих станів). Величина  $\sigma_1$  може змінюватися при реконструкції поверхні, адсорбції тощо [1–4, 7, 8, 12, 13, 21, 32]. Параметри ОПЗ – вигин зони (значення потенціалу на поверхні напівпровідника) і  $L_{OPZ}$  (товщина ОПЗ) – визначаються як величиною і знаком поверхневого заряду з густиною  $\sigma_1$ , так і параметрами об'ємної фази напівпровідника – діелектричною сталою  $\epsilon_1$ , ступенем об'ємного легування  $n_1$ , температурою  $T$  тощо – і є характеристикою вільної поверхні при  $L \rightarrow \infty$ . На рис. 3 показано розподіл  $V_j(x)$  (3), який визначає формування ОПЗ на поверхні  $n$ -Si, розрахований при  $L > L_{OPZ}$  згідно з результатами робіт [9–13] та рівнянням (8) з урахуванням (11) і (12), для різних густин  $\sigma_1$  поверхневого заряду.

Із розподілу потенціалу  $V_1(|x|)$  в приповерхневій зоні вільної поверхні напівпровідника видно, що вона може бути областю як збагачення (криві 1 та 2), так і областю збіднення (криві 4 та 5) вільними носіями (для  $n$ -Si – електронами). За відсутності зовнішньої напруги ( $U = 0$ ) величина та напрямок вигину зони провідності (як і валентної зони) визначаються величиною та знаком заряду поверхневих зарядів з густиною  $\sigma_1$  [32]. З рис. 2 і 3 видно, що для неоднорідних (шаруватих) структур коректність розгляду зарядового стану та мікроскопічної структури меж поділу прямо пов'язана з неперервністю потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  в системі трьох (двох)



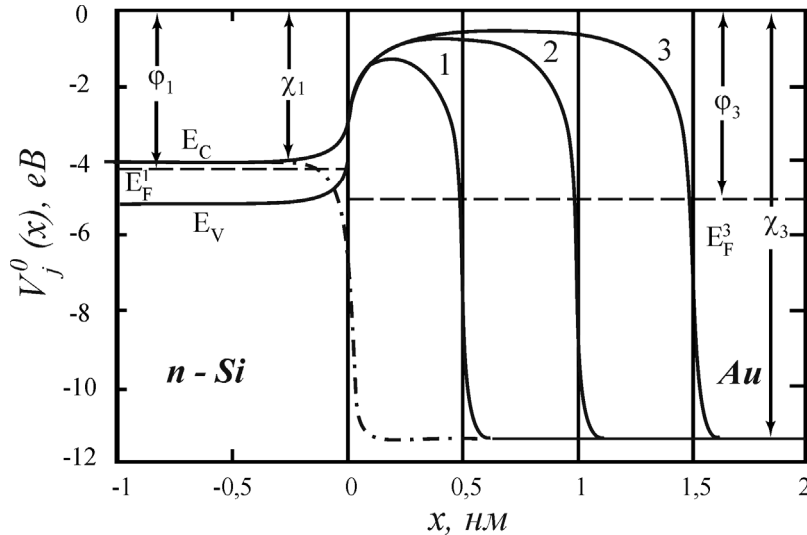
середовищ, що і забезпечується врахуванням просторової дисперсії в діелектричних функціях  $\varepsilon_j(\vec{k})$  кожного з них [9–10, 16–20].



**Рис. 3.** Розподіл  $V_1(|x|)$  для вільної поверхні  $n$ -Si при  $\sigma_1 = 2,58 \cdot 10^{12}$  (1),  $1,36 \cdot 10^{12}$  (2), 0 (3),  $-1,36 \cdot 10^{12}$  (4)  $-2,04 \cdot 10^{12}$   $\text{e}/\text{cm}^2$  (5). Точковою кривою показано положення дна зони провідності  $E_C$  в об'ємній фазі напівпровідника.

На рис. 4 наведено розподіл  $V_j^0(x)$  для різних роздільних відстаней  $L$  між напівпровідником та металом в системі  $n$ -Si–вакуум–Au, отриманий в наближенні діелектричного формалізму [16–20] з функціями діелектричної проникності  $\varepsilon_1(\vec{k})$  в вигляді (4) для легованого напівпровідника та  $\varepsilon_3(\vec{k})$  (5) в НТФ для металу. Як бачимо, коректне врахування просторової дисперсії в  $\varepsilon_1(\vec{k})$  (4) та  $\varepsilon_3(\vec{k})$  (5) в наближенні діелектричного формалізму приводить до неперервності потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  НВМ системі. Потенціальний бар'єр, сформований в вакуумній щілині за рахунок відмінностей в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ, знижується зі зменшенням роздільної відстані  $L$  (криві 1–3). При  $L \rightarrow 0$  розподіл  $V_j^0(x)$  (штрихпунктирна крива) має вигляд характерний для структури напівпровідник–метал, а при  $L \rightarrow \infty$  розподіл  $V_2^0(x)$  (точкова крива) типовий для потенціалу сил зображення поблизу вільної поверхні напівпровідника (рис. 2) [9–13].

Відзначимо, що розрахунок  $V_j^0(x)$  для власних або невідроджених напівпровідників з урахуванням екранування вільними носіями (електронами, дірками) не приводить до суттєвої зміни розподілу потенціалу зображення в порівнянні з розрахунками для  $\varepsilon_1(\vec{k})$  в моделі Інксона. Як показують прямі розрахунки  $V_j^0(x)$  в НВМ системі для невідродженого напівпровідника, температура та рівень об'ємного легування напівпровідника  $n_1$  (тобто параметр, що визначає радіус екранування вільними електронами  $\kappa_1^{-1}$  в НДХ) слабо впливають на розподіл потенціалу сил зображення, а в основному визначають тільки положення рівня Фермі  $E_F^1$  в напівпровіднику. Розподіл  $V_j^0(x)$  в НВМ з хорошою точністю може описуватись наближенням Інксона для діелектричної функції  $\varepsilon_1(\vec{k})$  (4) [26, 27].

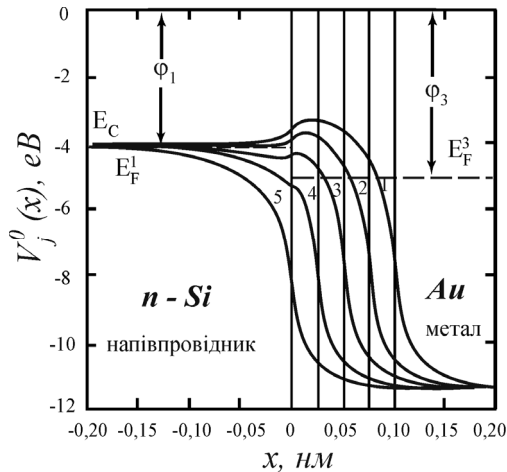


**Рис. 4.** Зонна енергетична діаграма  $n$ -Si–вакуум–Au системи та розподіл  $V_j^0(x)$  в ній в залежності від товщини вакуумної щілини  $L = : 0$  (штрих-пунктирна крива); 0,5 (крива 1); 1,0 (крива 2); 1,5 нм (крива 3). Розподіл  $V_j^0(x)$  при  $L \rightarrow \infty$  поданий точковою кривою.

З рис. 4 (штрих-пунктирна крива) видно, що при зменшенні ширини вакуумної щілини ( $L < 0,1$  нм) висота потенціального бар'єру між напівпровідником та металом суттєво знижується, а при надмалих розділяючих відстанях  $L$ , коли  $L \rightarrow 0$ ,  $n$ -Si–вакуум–Au структура поступово переходить в структуру напівпровідник – метал ( $n$ -Si – Au), що і продемонстровано на рис. 5 відповідними розрахунками  $V_j^0(x)$  згідно з результатами робіт [16–19].

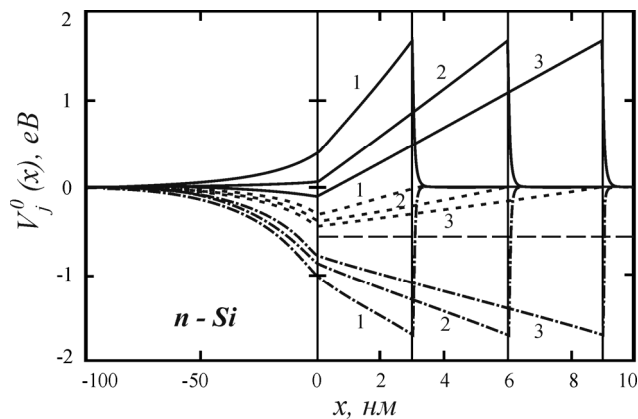
Для квазінейтральних поверхонь напівпровідника ( $\sigma_1 = \sum_{i=1}^{v1} e_i^* N_i = 0$ ) та металу ( $\sigma_2 = \sum_{n=1}^{v2} e_n^* N_n = 0$ ) розподіл  $V_j^0(x)$ , неперервний на межах поділу для всіх роздільних відстаней  $L$ , визначає розподіл повного потенціалу  $V_j(x)$  (3) в НВМ системі (без урахування структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ , обумовленого мікроструктурою кожної з поверхонь).

У випадку однорідно заряджених поверхонь напівпровідника ( $\sigma_1 = \sum_{i=1}^{v1} e_i^* N_i \neq 0$ ) та металу ( $\sigma_2 = \sum_{n=1}^{v2} e_n^* N_n \neq 0$ ) розподіл повного потенціалу  $V_j(x)$  (3) в НВМ системі змінюється за рахунок виникнення зарядового потенціалу  $\Delta V_j^\sigma(x)$ . Розподіл останнього в  $n$ -Si–вакуум–Au системі, одержаний згідно з рівняннями (8)–(10) з урахуванням (11) та (12) [21–25], наведено на рис. 6 для різної густини заряду  $\sigma_2$  на поверхні золота при зміні товщини  $L$  вакуумної щілини.



**Рис. 5.** Розподіл  $V_j^0(x)$  для системи  $n$ - $\text{Si}$ -вакуум- $\text{Au}$  у випадку зменшення розділюючої вакуумної відстані  $L = : 0,1$  (1);  $0,075$  (2);  $0,05$  (3);  $0,025$  нм (4). Крива 5 – розподіл  $V_j^0(x)$  в системі напівпровідник – метал, коли  $L = 0$ .

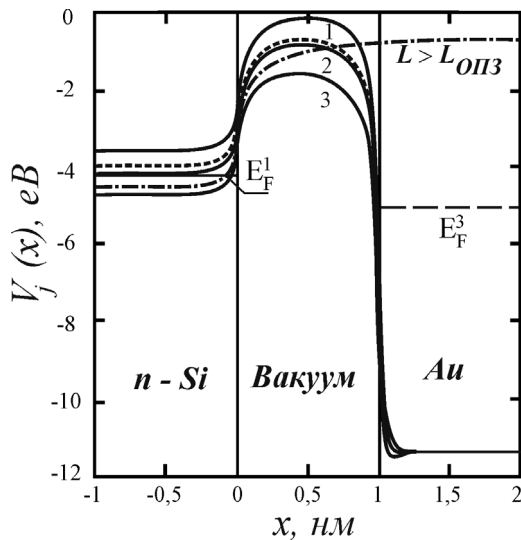
Як видно з рис. 6, зі зменшенням  $L$ , коли  $L < L_{\text{ОПЗ}}$ , внесок екранування поверхневого заряду напівпровідника  $\sigma_1$  вільними електронами та поверхневим зарядом  $\sigma_2$  металу суттєво збільшується. Такий вплив металу можна інтерпретувати як виникнення метал-індукованих поверхневих станів (МІПС) з густиною  $\sigma_{\text{МІПС}}$ , яка суттєво відрізняється від  $\sigma_1$  (штрихова крива) і залежить від об'ємних властивостей металу, густини заряду  $\sigma_2$  на його поверхні та товщини  $L$  вакуумної щілини. Для від'ємного заряду  $e$  (електрона) при фіксованій відстані  $L = 3$  нм і  $L = 6$  нм між однорідно зарядженими поверхнями напівпровідника та металу зміна поверхневого заряду  $\sigma_2$  металу з позитивного (штрих-пунктирні криві 1 та 2) або квазінейтрального (точкові криві 1 та 2) на від'ємний (суцільні криві 1 та 2) зумовлює виникнення потенціального бар'єру на поверхні напівпровідника – області збіднення. В даному наближенні виникнення бар'єру в приповерхневій області напівпровідника не обумовлено контактною різницею потенціалів  $\Delta\Phi$  [5–8].



**Рис. 6.** Розподіл  $\Delta V_j^\sigma(x)$  в  $n$ - $\text{Si}$ -вакуум- $\text{Au}$  системі при  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12}$   $\text{e}/\text{cm}^2$  та  $\sigma_2 = -1,5 \cdot 10^{14}$  (суцільні криві 1–3),  $0$  (точкові криві 1–3),  $1,5 \cdot 10^{14}$   $\text{e}/\text{cm}^2$  (штрих-пунктирні криві 1–3). Розрахунки проведені для різних відстаней  $L = 3$  (криві 1),  $6$  (криві 2),  $9$  нм (криві 3). Штрихова крива – розподіл  $\Delta V_j^\sigma(x)$  при  $L > L_{\text{ОПЗ}}$  (вільна поверхня  $n$ - $\text{Si}$ ).

Розрахований згідно рівнянь (8)–(12) та роботи [19] сумарний потенціал  $V_j(x)$  в  $n$ -Si–вакуум–Au системі для фіксованого вакуумного проміжку  $L$  в залежності від густини заряду  $\sigma_2$  на поверхні металу, показано на рис. 7.

На рис. 8 (криві 1–3) показано розподіл повного потенціалу біля поверхні напівпровідника при зміні густини заряду  $\sigma_2$  на металевій поверхні при  $L = 1$  нм. У випадку вільної поверхні, коли  $L > L_{OPZ}$ , цей розподіл показано штрих-пунктирною кривою, а розподіл потенціалу зображення – точковою кривою. Видно, що присутність металу на відстанях  $L < L_{OPZ}$  від поверхні напівпровідника приводить до зміни розподілу потенціалу  $V_1(|x|)$  в його ОПЗ, а величина вигину зони  $V_1(0)$  на поверхні і його характер залежать від електронної структури, знаку і величини заряду  $\sigma_2$  на поверхні металу та товщини  $L$  вакуумної щілини (див. рис.3, на якому наведено розподіл ОПЗ  $V_1(|x|)$  біля поверхні  $n$ -Si, розрахований для ізольованого напівпровідника з різними густинами  $\sigma_1$  поверхневих зарядів).

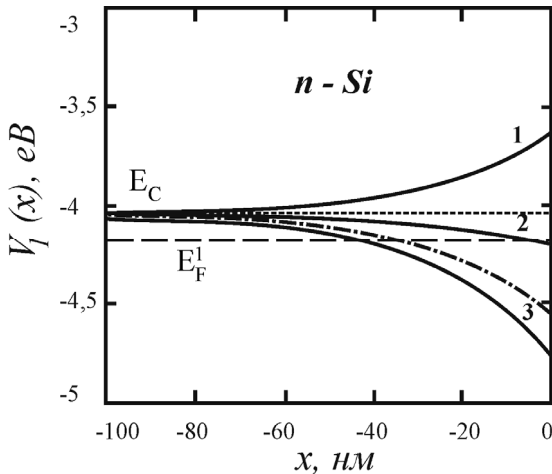


**Рис. 7.** Розподіл  $V_j(x)$  в  $n$ -Si–вакуум–Au системі при  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12}$   $\text{e}/\text{cm}^2$ , для  $L = 1$  нм і  $\sigma_2 = -8,00 \cdot 10^{13}$  (крива 1), 0 (крива 2),  $8,00 \text{ e}/\text{cm}^2$  (крива 3). Для  $L > L_{OPZ}$  розподіл  $V_j(x)$  поданий штрих-пунктирною кривою. Точкова крива – розподіл  $V_j^0(x)$ .

Для легованих напівпровідників  $n$ -типу у випадку позитивно зарядженої поверхні металу ( $\sigma_2 > 0$ ) при зменшенні роздільної відстані  $L$  може відбуватися зміна напрямку вигину зон – виникнення запірного шару. Максимальний вплив металу досягається для тісної НВМ структури, коли  $L \rightarrow 0$ . Однак для відстаней  $L < 1$  нм внесок структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ , обумовленого мікроскопічною (атомною) структурою поверхонь напівпровідника та металу, в сумарний потенціал  $V_j(\vec{r})$  (3) суттєво зростає зі зменшенням  $L$ , а для тісної НВМ структури, коли  $L \rightarrow 0$  (рис. 5), цей внесок  $\Delta V_j^{st}(0, y, z)$  може стати визначальним.

Визначимо вплив мікроскопічної структури близько розташованої металевій поверхні на рельєф потенціалу  $V_1(0, y, z) = V_2(0, y, z)$  (3) поверхні напівпровідника. При врахуванні мікроскопічної структури поверхні кремнію, будемо вважати, що розподіл густини заряду  $\sigma_1(y, z)$  уздовж вільної поверхні ( $L > L_{OPZ}$ ) сформовано одним типом поверхневих атомів (іонів)  $\nu_1 = 1$  з ефективним зарядом  $e_1^* = 0,002$  і двовимірною концентрацією  $N_1 = 6,8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ .

При аналогічній оцінці впливу мікроскопічної структури поверхні металу на розподіл електростатичного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  в  $n$ -Si–вакуум–Au системі квазінейтральність металевої поверхні забезпечується двома типами  $\nu_2 = 2$  ґраток з параметрами  $e_1^* = 0,1$ ,  $N_1 = 10^{15} \text{ см}^{-2}$  на поверхневих атомах металу та  $e_2^* = -0,9$ ,  $N_2 = 1,11 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  в субмоношаровому покритті адсорбованих атомів, які утворюють структуру  $(3 \times 3)$ .

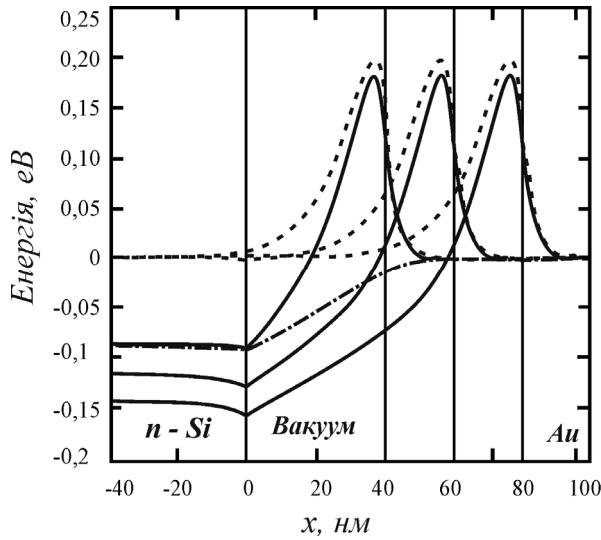


**Рис. 8.** Розподіл  $V_1(|x|)$  біля поверхні  $n$ -Si при  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12} \text{ е/см}^2$  при  $L = 1 \text{ нм}$  і  $\sigma_2 = -8 \cdot 10^{13}$  (крива 1); 0 (крива 2);  $8 \cdot 10^{13} \text{ е/см}^2$  (крива 3). Для  $L > L_{OPZ}$  розподіл  $V_j(x)$  поданий штрих-пунктирною кривою. Точкова крива – розподіл  $V_j^0(x)$ .

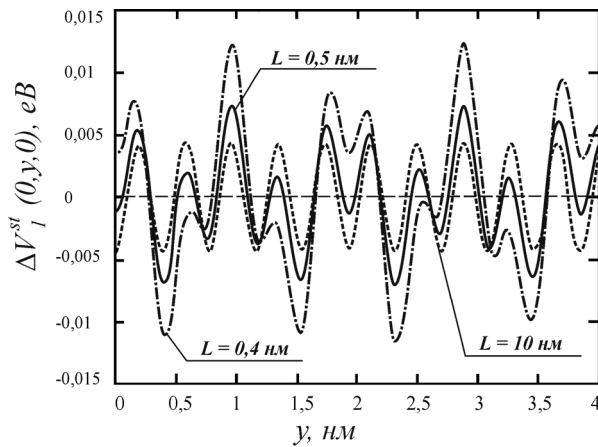
Розподіл структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(x,0,0)$  (пунктирні криві), розрахованого згідно рівнянь (13)–(21), зарядового потенціалу  $\Delta V_j^\sigma(x)$  (штрих-пунктирні криві) (див. пунктирні криві на рис. 6) та потенціалу  $\Delta V_j(x,0,0)$  (3) (суцільні криві), обумовленого зарядовим станом меж розділу і їх атомною структурою, при зміні ширини вакуумного проміжку між поверхнями кремнію та золота приведено на рис. 9, з якого видно, що структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  обумовлює зміну висоти потенціального бар'єру як в розділюючій вакуумній щілині, так і в приповерхневій області напівпровідника.

Розподіл структурного потенціалу  $\Delta V_1^{st}(x,y,0)$  на поверхні кремнію ( $x = 0$ ) і в його приповерхневій області, коли поверхня металу розташована на відстані  $L = 10 \text{ нм}$ , показано на рис. 2 та 3 пунктирною кривою. При зменшенні вакуумного проміжку  $L < 0,1 \text{ нм}$  внесок структурного потенціалу  $\Delta V_1^{st}(x,y,0)$  в рельєф потенціалу  $V_1(\vec{r})$  напівпровідникової поверхні (5) зростає.

Рис. 10 та 11 ілюструють вплив атомної структури близько розташованої  $L = 0,4 \text{ нм}$  (штрих - пунктирна крива) і  $L = 0,5 \text{ нм}$  (суцільна крива) металевої поверхні на латеральний розподіл структурного потенціалу  $\Delta V_1^{st}(x,y,0)$ , розрахований згідно (13)–(21), на поверхні кремнію ( $x = 0$ ) (рис. 10) і в його приповерхневій області  $x = -0,2 \text{ нм}$  (рис. 11). З рис. 10 та 11 видно, що мікроструктура близько розташованої металевої поверхні істотно змінює розподіл структурної компоненти потенціалу як в площині поверхні напівпровідника, так і в його приповерхневій області, що може стимулювати латеральний перерозподіл густини поверхневих станів, причому цей вплив посилюється зі зменшенням  $L$ .

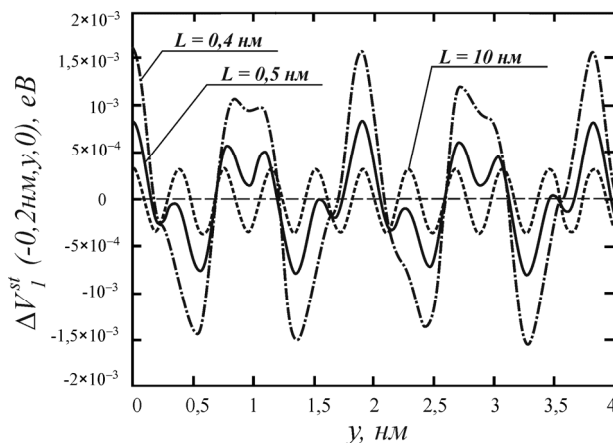


**Рис. 9.** Розподіли  $\Delta V_j^{st}(x,0,0)$  (пунктирні криві),  $\Delta V_j^\sigma(x)$  (штрих - пунктирні криві) та  $\Delta V_j(x,0,0)$  (суцільні криві), розраховані для  $n$ -Si-вакуум-Au системи при  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$ ,  
 $\sigma_2 = \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n = 0$  та  $L = 0,4$  (1);  
 0,6 (2); 0,8 нм (3).

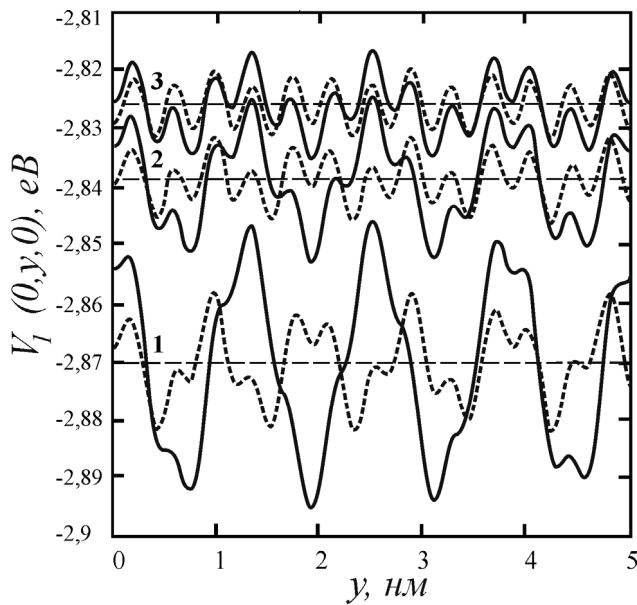


**Рис. 10.** Розподіл структурного потенціалу  $\Delta V_1^{st}(0,y,0)$  на поверхні кремнію для  $n$ -Si-вакуум-Au системи при  $L = 0,4$  (штрих - пунктирна крива); 0,5 (суцільна крива); 10 нм (пунктирна крива).

На рис. 12 показано зміну рельєфу потенціалу поверхні напівпровідника  $V_j(\vec{r})$  (3) (латеральний розподіл сумарного електростатичного потенціалу) при зменшенні товщини вакуумного проміжку  $L$  між поверхнею напівпровідника ( $n$ -Si) і квазінейтральною металевою (Au) поверхнею зі структурою  $(3 \times 3)$  (пунктирні криві) та зі структурою  $(4 \times 4)$  (суцільні криві). Квазінейтральність металевої поверхні забезпечена двома типами  $v_2 = 2$  поверхневих ґраток. Параметри поверхневих атомів металу складають  $e_1^* = 0,1$ ,  $N_1 = 10^{15} \text{ см}^{-2}$ , а адсорбованих атомів в субмоношаровому покритті  $e_2^* = -1,6$ ,  $N_2 = 6,25 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .



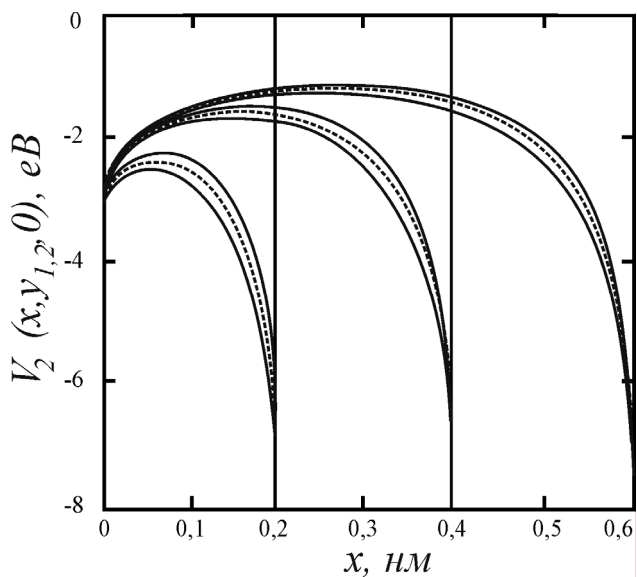
**Рис. 11.** Розподіл структурного потенціалу  $\Delta V_1^{st}(-0,2 \text{ нм}, y, 0)$  у приповерхневій області кремнію для  $n$ -Si-вакуум-Au системи при  $L = 0,4$  (штрих - пунктирна крива); 0,5 (суцільна крива), 10 нм (пунктирна крива).



**Рис. 12.** Розподіл потенціалу  $V_1(0, y, 0)$  на поверхні кремнію ( $x = 0$ )  $n$ -Si-вакуум-Au системи, коли поверхня золота зі структурами  $(3 \times 3)$  (пунктирні криві) та  $(4 \times 4)$  (суцільні криві) знаходиться на відстані  $L = 0,4$  (криві 1);  $0,5$  (криві 2);  $0,6$  нм (криві 3). Горизонтальні штрихові криві – значення сумарного потенціалу  $V_1(0, y, 0)$  без урахування структурної компоненти.

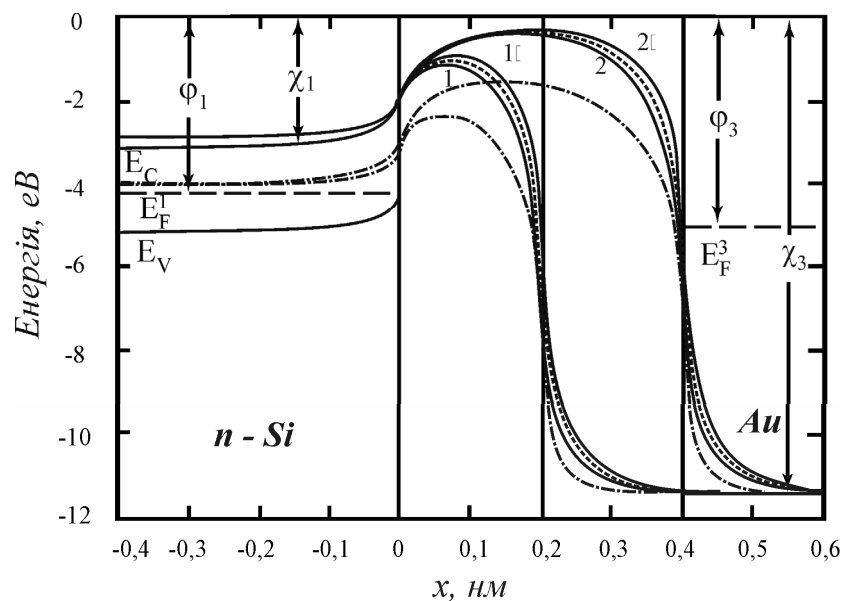
З рис. 10 – 12 видно, що мікроструктура близько розташованої металевої поверхні істотно змінює розподіл структурної компоненти  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  як в площині поверхні напівпровідника, так і в його приповерхневій області, що може стимулювати латеральний перерозподіл густини поверхневих станів, причому цей вплив посилюється зі зменшенням товщини вакуумної щілини між поверхнями.

Структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ , який є суперпозицією вкладів мікроскопічної структури кожної з двох поверхонь (6) та (7), несиметричний і при зменшенні товщини вакуумного проміжку  $L < 0,1$  нм обумовлює не тільки латеральну зміну сумарного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  (3) на поверхні напівпровідника (рельєф потенціалу) і в його приповерхневій області, але і локальну зміну висоти потенціального бар'єру у вакуумній щілині, що продемонстровано на рис. 13.



**Рис. 13.** Розподіл потенціалу  $V_2(x, y_{1,2}, 0)$  у середині вакуумної щілини  $L = 0,2$  та  $0,6$  нм для  $n$ -Si-вакуум-Au системи з поверхнею золота, яка має структуру  $(4 \times 4)$  при  $y_1 = 1,98$  і  $y_2 = 2,50$  нм, що відповідає положенню мінімального і максимального значення амплітуди структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ . Пунктирні криві – розподіл  $V_2(x)$  без урахування структурного потенціалу.

Результати розрахунків сумарного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  (3) для  $n$ -Si–вакуум–Au системи з урахуванням всіх трьох компонент: потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  (штрих-пунктирні криві на рис. 4), зарядового  $\Delta V_j^\sigma(x)$  (пунктирні криві на рис.7) та структурного  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  потенціалів (суцільні криві) для надмалих роздільних відстаней  $L$  між зарядженими поверхнями напівпровідника з густиною заряду  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$  та металу з густиною заряду  $\sigma_2 = -1,5 \cdot 10^{14} \text{ e/cm}^2$  з одним типом ( $\nu_1 = \nu_2 = 1$ ) поверхневих ґраток (6) та (7) приведено на рис.14. Як бачимо з рис. 13 та 14, врахування структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  визначає локальну зміну висоти потенціального бар'єру у вакуумній щілині уздовж площини поверхонь, що стимулюється мікроскопічною (атомною) структурою кожної з них.



**Рис. 14.** Зонна енергетична діаграма  $n$ -Si–вакуум–Au системи та розподіл  $V_j^0(x)$  (штрих-пунктирні криві на рис.4),  $V_j(x)$  (3) без урахування структурного потенціалу (пунктирні криві на рис.7) та  $V_j(x, y_{1,2}, 0)$  (суцільні криві) в ній для значень 0,2 та 0,4 нм товщини вакуумної щілини (суцільні криві) з поверхнею золота зі структурою  $(3 \times 3)$ , коли  $e_1^* = -0,6$  і  $N_1 = 2,5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , при  $y_1 = 0,37 \text{ нм}$  (суцільні криві 1 і 2) та  $y_2 = 0,60 \text{ нм}$  (суцільні криві 1' і 2'), що відповідає положенню мінімального і максимального значення амплітуди структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ .

### Висновки

В даній роботі в наближенні діелектричного формалізму [9–25] у відсутності контакту напівпровідник–метал та зовнішньої напруги  $U = 0$  для несиметричної за об'ємними та поверхневими характеристиками НВМ системи теоретично визначений потенціал  $V_j(\vec{r})$ , який враховує відмінності в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ, зарядовий стан поверхонь напівпровідника і металу та їх мікроскопічну



структуру [14, 15, 19, 29]. Неперервність потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  і, відповідно, сумарного потенціалу  $V_j(x)$  та єдиний (вакуумний) рівень відліку енергії в НВМ системі забезпечується коректним урахуванням просторової дисперсії в функціях діелектричної проникності напівпровідника  $\varepsilon_1(\vec{k})$  (4) та металу  $\varepsilon_3(\vec{k})$ .

У випадку малої вакуумної щілини при умові  $0,1 < L < 10$  нм між поверхнями напівпровідника та металу утворюється потенціальний бар'єр  $V_2^0(x)$ , висота якого зростає при збільшенні розділюючої відстані  $L$  [19]. Коли  $L < 0,1$  нм потенціальний бар'єр  $V_2^0(x)$  в вакуумній щілині не формується, так що при  $L \rightarrow 0$  система НВМ переходить в систему двох середовищ напівпровідник–метал (НМ). Для розрахунку  $V_j^0(x)$  у випадку власних або невироджених напівпровідників урахування екранування вільними носіями (електронами, дірками) не призводить до суттєвої зміни розподілу  $V_j^0(x)$  в порівнянні з результатами для  $\varepsilon_1(\vec{k})$  (4) в моделі Інксона [9–11, 26, 27]. Як показують прямі розрахунки  $V_j^0(x)$  в НВМ системі, у випадку невиродженого напівпровідника зміни температури  $T$  та рівня об'ємного легування напівпровідника  $n_1$  (тобто параметра, що визначає радіус екранування вільними електронами  $\kappa_1^{-1}$  в НДХ) слабо впливають на розподіл потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$  (в основному визначають тільки положення рівня Фермі  $E_F^1$  в напівпровіднику) і з хорошою точністю може описуватись наближенням Інксона для діелектричної функції  $\varepsilon_1(\vec{k})$  [26, 27]. На прикладі структури  $n$ -Si–вакуум–Au проаналізовано вплив товщини  $L$  вакуумної щілини на розподіл потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$ . Коли  $L < 0$  нм потенціальний бар'єр  $V_2^0(x)$  в вакуумній щілині не формується, так що при  $L \rightarrow 0$  система НВМ переходить в систему двох середовищ напівпровідник–метал.

Проаналізовано вплив близько розташованого металу  $L < L_{ОПЗ}$  з квазінейтральною [14] або зарядженою [15] поверхнею на розподіл потенціалу  $V_1(|x|)$  (3), який визначає формування ОПЗ в напівпровіднику.

При зменшенні товщини  $L$  вакуумного проміжку між напівпровідником та металом, коли  $L < L_{ОПЗ}$ , розподіл потенціалу  $V_1(|x|)$  змінюється в залежності від електронної структури металу, знаку і величини заряду на його поверхні та товщини вакуумного проміжку. Зміна величини вигину зон на межі поділу напівпровідник–вакуум  $V_1(0) = V_2(0)$  обумовлена частковим екрануванням поверхневого заряду напівпровідника з густиною  $\sigma_1$  вільними електронами металу, а присутність на його поверхні заряду з густиною  $\sigma_2$  може приводити також і до зміни напрямку вигину зон. Вплив зарядженої поверхні металу при  $L < L_{ОПЗ}$  можна інтерпретувати як виникнення МППС з густиною  $\sigma_{МППС}$ , яка суттєво відрізняється від густини  $\sigma_1$ , що частково подібно до відомого «ефекту поля» [6–8, 32, 33], який може зумовити навіть виникнення внутрішньої металізації поверхні невиродженого напівпровідника – виникнення виродженого приповерхневого шару вільних носіїв (електронів, дірок) [34, 35] – тільки за рахунок близько розміщеного металу з відповідним поверхневим зарядом.

Зі зменшенням товщини вакуумної щілини  $L < 1$  нм внесок структурного потенціалу  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$  в сумарний потенціал  $V_j(\vec{r})$  суттєво зростає, оскільки збільшується взаємний вплив мікроскопічної (атомної) структури кожної з двох поверхонь [12, 13, 21–25, 29].

В роботі також визначено вплив мікроскопічної структури металевої поверхні на рельєф потенціалу поверхні напівпровідника. Показано, що структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ , який є суперпозицією вкладів мікроскопічної структури кожної з двох поверхонь, несиметричний і обумовлює локальну зміну висоти потенціального бар'єру у вакуумній щілині, а також латеральну (уздовж меж розділу) зміну сумарного потенціалу  $V_j(\vec{r})$  у всій НВМ системі.

Присутність металу на відстанях  $L < L_{OPZ}$  від поверхні напівпровідника змінює величину поверхневого вигину зон напівпровідника (за рахунок вкладу в  $V_j(\vec{r})$  зарядової компоненти  $\Delta V_j^\sigma(x)$ ), при  $L < 10$  нм відбувається формування потенціального бар'єру в вакуумній щілині (за рахунок вкладу в  $V_j(\vec{r})$  потенціалу сил зображення  $V_j^0(x)$ ), а при подальшому зменшенні вакуумного проміжку до відстаней  $L < 1$  нм неоднорідність металевої поверхні (її мікроскопічна структура) може стимулювати латеральний перерозподіл густини заряду (поверхневих станів) не тільки на поверхні напівпровідника, але і в його приповерхневій області (за рахунок вкладу в  $V_j(\vec{r})$  (3) структурної компоненти  $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$ ).

## Література

1. Modinos A. Field, thermionic, and secondary electron emission spectroscopy. – New York: Plenum, 1984. – 375 p.
2. Scanning tunneling microscopy and spectroscopy: theory, techniques and applications / Ed. Dawn A. Bonnell. – 1993. – 578 p.
3. Scanning tunneling microscopy I: General principles and applications to clean and adsorbate-covered surfaces / Eds. H.-J. Guntherodt, R. Wiesendanger. – 1992. – 280 p.
4. Magonov S.N., Whangbo M.-H. Surface analysis with STM and AFM : experimental and theoretical aspects of image analysis. – Weinheim; New York, Basel; Cambridge; Tokio: VCH. – 1996. – 320 p.
5. Sze S.M. Physics of semiconductor devices. – New York: J. Wiley. – 1981. – 803 p.
6. Пека Г.П., Стріха В.І. Поверхневі та контактні явища в напівпровідниках. – Київ: Либідь. – 1992. – 237 с.
7. Monch W. Semiconductor surfaces and interfaces. – Berlin, Heidelberg: Springer. – 1995. – 540 p.
8. Находкін М.Г., Шека Д.І. Фізичні основи мікро та наноелектроніки. – Київ: Київський ун-т. – 2005. – 432 с.
9. Габович А.М., Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А. Электростатическое взаимодействие зарядов с поверхностью металлов и полупроводников // Физика твердого тела. – 1979. – Т. 21, № 6. – С. 1683–1689.
10. Габович А.М., Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А. Электростатическая энергия заряда вблизи поверхности металла и полупроводника // Препринт ИФ-78-14, Киев. – 1978. – 27 с.

11. Gabovich A.M., Il'chenko L.G., Pashitskii E.A., Romanov Yu.A. Electrostatic energy and screened charge interaction near the surface of metals with different Fermi surface shape // *Surf. Sci.* – 1980. – V. 94. – P. 179–203.
12. Il'chenko L.G. Role of microscopic structure of the surface in field emission from semiconductors. 12th Intern. Vacuum Microelectronics Conf. Darmstadt, Germany, Technical Digest. – 1999. – P. 84–85.
13. Il'chenko L.G., Il'chenko V.V., Goraychuk T.V., Rangelow I.W. Microscopic structure of the semiconductor surface in the external electric field // *Chemistry, physics and technology of surfaces.* – 2001. – N 4–6. – P. 186–195.
14. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Розподіл електростатичного потенціалу в системі напівпровідник-вакуум-метал у відсутності зовнішньої напруги // *Вісн. Київ. ун-ту. Радіофізика та електроніка.* – 2009. – № 3. – С. 237–242.
15. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Вплив близько розташованого металу на формування області просторового заряду в напівпровіднику // *Вісн. Київ. ун-ту. Радіофізика та електроніка.* – 2010. – № 1. – С. 174–179.
16. Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А., Романов Ю.А. Взаимодействие зарядов в слоистых системах с пространственной дисперсией // *Препринт ИФ-80-13, Киев.* – 1980. – 42 с.
17. Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А., Романов Ю.А. Электростатический потенциал зарядов в слоистых системах с пространственной дисперсией // *Физика твердого тела.* – 1980. – Т. 22, Вып. 9. – С. 2700–2710.
18. Il'chenko L.G., Pashitskii E.A., Romanov Yu.A. Charge interaction in layered systems with spatial dispersion // *Surf. Sci.* – 1982. – V. 121. – P. 375–395.
19. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Потенціал сил зображення між близько розділеними вакуумним проміжком напівпровідником і металом (розмірно-квантованою плівкою металу) // *Вісн. Київ. ун-ту. Радіофізика та електроніка* – 2008. – Вип. 11. – С. 29.
20. Il'chenko L.G. Goraychuk T.V. Role of the image forces potential in the formation of the potential barrier between closely spaced metals. // *Surf. Sci.* – 2001. – 478. – P. 169–179.
21. Ильченко Л.Г., Савон А.А. Электростатический потенциальный рельеф поверхности диэлектриков с дискретным распределением зарядов // *Препринт ИТФ-92-27Р, Кев.* – 1992. – 31 с.
22. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Роль атомної структури поверхонь у формуванні потенціалу у вакуумному проміжку між близько розділеними металом та напівпровідником // *Химия, физика и технология поверхности.* – 2008. – Вып. 14. – С. 43–51.
23. Ильченко Л.Г., Лобанов В.В. Теоретический расчёт структурного потенциала в сверхтонкой вакуумной щели между двумя твёрдыми телами. *Физико-химия наноматериалов и супрамолекулярных структур.* / Под ред А.П. Шпака, П.П. Горбика. Киев: Наук. думка. – 2007. – Т. 2. – С. 52–81.
24. Ільченко Л.Г., Лобанов В.В., Чуйко О.О. Роль мікроструктури поверхності в формуванні потенціалу взаємодії між близькорозділеними вакуумним проміжком неідентичними діелектричними (полупровідниковими) наночастицями // *Химия, физика и технология поверхности.* – 2006. – Вып. 11–12. – С. 4–19.
25. Ільченко Л.Г., Лобанов В.В., Чуйко О.О. Формування потенціального бар'єру між двома близько розділеними металами з субмоношаровим адсорбційним покриттям // *Фізика і хімія твердого тіла.* – 2005. – Т. 6, № 3. – С. 471–475.

26. Inkson J.C. The electrostatic image potential in metal semiconductor junctions // J. Phys. C. –1971. – V. 4, N 5. – P. 591–597.
27. Bennet M., Inkson J.C. Exchange and correlation potential in silicon // J. Phys. C. – 1977. – V. 10, N 5. – P. 987–999.
28. Сидякин А.В. Вычисление поляризационного вклада в энергию взаимодействия заряда с поверхностью металла – Журн. exper. и теор. физики. – 1970. – Т. 58, Вып. 2. – С. 573–581.
29. Ильченко Л.Г., Ильченко В.В., Лобанов В.В. Влияние атомной структуры поверхности металла на потенциальный рельеф близко расположенной поверхности полупроводника // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. – 2011. – Т. 9, Вып. 2. – С. 315–319.
30. Jensen K.L. Improved Fowler-Nordheim equation for field emission from semiconductors // J.Vac. Sci. Technol. B. – 1995. – V. 13, N 2. – P. 516–521.
31. Huang Z.-H., Weimer M., Allen R.E. Internal image potential in semiconductors: Effect on scanning tunneling microscopy // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48, N 20. – P. 15068–15076.
32. Фишер Р., Нойман Х. Автоэлектронная эмиссия полупроводников. – Москва: Наука. – 1971. – 215 с.
33. П'ченко Л.Г., Крюченко Ю.В. External field penetration effect on current-field characteristics of metal emitters // J.Vac.Sci.Technol. B. – 1995. – V. 13, N 2. – P. 566–570.
34. П'ченко Л.Г. Electrostatic interaction of charges on a semiconductor surface // Surface Sci. – 1991. – V. 243. – P. 334–336.
35. П'ченко Л.Г., Огенко В.М. Image forces near the surface of semiconductor with a space charge region // Surf. Sci. Lett. – 1992. – V. 262. – P. L147–L150.

## **ВЛИЯНИЕ МЕТАЛЛА НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКА**

**Л.Г.Ильченко<sup>1</sup>, В.В.Ильченко<sup>2</sup>, В.В.Лобанов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйка Национальной академии наук Украины  
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина*

<sup>2</sup>*Киевский университет имени Тараса Шевченко  
ул. Владимирская, 64, Киев, 02033, Украина*

*В приближении диэлектрического формализма, при отсутствии непосредственного контакта полупроводник–металл и внешнего напряжения для несимметричной по объемным и поверхностным характеристикам системы полупроводник–вакуум–металл (ПВМ) рассчитан потенциал их взаимодействия, который учитывает различия в объемных свойствах каждой из трех сред, зарядовое состояние поверхностей полупроводника и металла, а также их микроскопическую структуру. Непрерывность потенциала сил изображения и, соответственно, суммарного потенциала и единый (вакуумный) уровень отсчета энергии в ПВМ системе обеспечивается корректным учетом пространственной дисперсии функций диэлектрического проникновения полупроводника и металла.*

*При уменьшении толщины вакуумной щели  $L < 1$  нм вклад структурного потенциала в суммарный потенциал существенно возрастает, поскольку увеличивается взаимное влияние микроскопической (атомной) структуры каждой из двух поверхностей. Показано, что структурный потенциал, который является суперпозицией вкладов микроскопической структуры каждой из двух поверхностей, несимметричный и обуславливает локальное*

*изменение высоты потенциального барьера в вакуумной щели, а также латеральное (вдоль границ раздела) изменение суммарного потенциала во всей НВМ системе.*

*Присутствие металла на расстояниях, меньших характеристического размера области поверхностного заряда поверхности полупроводника, изменяет величину поверхностного изгиба зон полупроводника, а при дальнейшем изменении ширины вакуумного промежутка до расстояний  $L < 1$  нм микроскопическая структура металлической поверхности может стимулировать латеральное перераспределение плотности заряда (поверхностных состояний) не только на поверхности полупроводника, но и в его приповерхностной области.*

## **EFFECT OF METAL ON THE SURFACE CHARACTERISTICS OF SEMICONDUCTOR**

**L.G. Il'chenko<sup>1</sup>, V.V. Il'chenko<sup>2</sup>, V.V. Lobanov<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine  
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine*

<sup>2</sup>*Taras Shevchenko University of Kyiv  
64 Volodymyrska Str., Kyiv, 02033, Ukraine*

*Within the framework of dielectric formalism in absence of direct semiconductor-metal contact and external tension, the interaction potential has been calculated in the system with asymmetric bulk and surface characteristics of semiconductor-vacuum-metal (SVM) system taking into account distinctions in bulk properties of all three media, the charge status of semiconductor and metal surfaces as well as their microscopic structures. The continuity of image forces and respectively that of total potential as well as an unique (vacuum) level of energy scale in the SVM system are provided by correct counting spatial dispersion in the permittivity functions for both semiconductor and metal.*

*When the thickness of vacuum gap is decreased to  $L < 1$  nm, the contribution of structural potential to total one considerably increases because the mutual effect rises of the microscopic (atomic) structures of both two surfaces. The structural potential (which is a superposition of the microscopic structure contributions of both surfaces) has been shown to be asymmetrical and to cause a local change in the height of potential barrier within the vacuum gap as well as a lateral (at the interfaces) change in the total potential throughout the entire SVM system.*

*The presence of metal at the distances less than the surface charge area of semiconductor changes the value of surface bending of semiconductor bands and due to further diminishing vacuum gap to distance  $L < 1$  nm, microscopic structure of metal surface is capable to stimulate a lateral redistribution of charge density (surface states) not only at semiconductor surface but also within its subsurface region.*