

PACS numbers: 73.23.Nk, 73.30.+y, 73.40.Qv, 73.63.Rt, 81.07.Lk, 85.30.-z, 85.35.-p

## О формировании выпрямляющего контакта в системе полупроводник–вакуум–металл

Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко\*, В. В. Лобанов

*Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины,  
ул. Генерала Наумова, 17,  
03164 Киев, Украина*

*\*Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,  
ул. Владимирская, 64,  
02033 Киев, Украина*

В рамках метода диэлектрического формализма для системы трёх сред с пространственной дисперсией рассчитан суммарный электростатический потенциал  $V_i(x)$  в системе полупроводник–вакуум–металл (ПВМ), учитывающий зарядовое состояние поверхностей полупроводника и металла до контакта. Показано, что непрерывность потенциала  $V_i(x, \Delta\Phi)$  при переходе системы ПВМ в контакт может быть сохранена при условии образования двойного электрического слоя (ДЭС) и перераспределения плотностей заряда на границах раздела в соответствии с контактной разницей потенциалов  $\Delta\Phi$  и толщиной ДЭС  $L$ . Независимость распределения зарядового потенциала в полупроводнике  $\Delta V_1^\sigma(x, \Delta\Phi)$  от  $L$  при формировании выпрямляющего контакта обуславливает стабильность высоты  $h(\Delta\Phi) = \Delta V_1^\sigma(x=0, \Delta\Phi)$  запирающего слоя во всей плоскости контакта, тогда как высота потенциального барьера  $V_2(x, \Delta\Phi)$  внутри вакуумной щели увеличивается с увеличением  $L$  в соответствии с распределением потенциала сил изображения  $V_2^0(x)$  в ней.

У рамках методи діелектричного формалізму для системи трьох середовищ з просторовою дисперсією розраховано сумарний електростатичний потенціал  $V_i(x)$  у системі напівпровідник–вакуум–метал (НВМ), що враховує зарядовий стан поверхонь напівпровідника і металу до контакту. Показано, що неперервність потенціалу  $V_i(x, \Delta\Phi)$  при переході системи НВМ у контакт може бути збереженою за умови створення подвійного електричного шару (ПЕШ) і перерозподілу густин заряду на роздільчій межі відповідно до контактної різниці потенціалів  $\Delta\Phi$  і товщини ПЕШ  $L$ . Незалежність розподілу зарядового потенціалу в напівпровіднику від  $L$  при формуванні випростувального контакту обумовлює стабільність висоти  $h(\Delta\Phi) = \Delta V_1^\sigma(x=0, \Delta\Phi)$  запираючого шару у всій площині контакту, тоді як висота потенціального бар'єру всередині

вакуумної щілини збільшується зі збільшенням  $L$  відповідно до розподілу потенціалу сил зображення  $V_2^0(x)$  у ній.

Within the scope of the dielectric formalism for three media with spatial dispersion, the total electrostatic potential,  $V_i(x)$ , in the semiconductor–vacuum–metal (SVM) system is calculated and takes into account the charge state of the semiconductor and metal surfaces before contact. As shown, the continuity of the potential  $\Delta V_1^\sigma(x, \Delta\Phi)$  when joining the SVM system can be maintained under the condition of formation of the electrical double layer (EDL) and redistribution of charge densities on interfaces in accordance with the contact potential difference,  $\Delta\Phi$ , and DES thickness,  $L$ . Independence of the distribution of charge potential within the semiconductor on  $L$  during formation of the rectifying contact determines the stability of the height of a barrier layer over the whole plane of the contact, while the potential barrier within the vacuum slot increases with  $L$  according to the distribution of the image forces potential,  $V_2^0(x)$ , within the slot.

**Ключевые слова:** выпрямляющий контакт, электростатический потенциал, потенциальный барьер, двойной электрический слой.

*(Получено 25 ноября 2010 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задача об определении потенциального барьера, который возникает между близко разделёнными вакуумным промежутком полупроводником и металлом, как и его изменение при переходе системы полупроводник–вакуум–металл (ПВМ) в контакт, является одной из наиболее традиционно актуальных задач в физике полупроводников и вакуумной электронике [1, 2].

Известно, что возникновение области пространственного заряда (ОПЗ) в полупроводнике связано с присутствием на его поверхности ( $x=0$ ) заряда с плотностью  $\sigma_1^0$ . Параметры ОПЗ (толщина ОПЗ  $L_{\text{ОПЗ}}$  и значение потенциала  $\Delta V_j^\sigma(0)$  на его поверхности — изгиб зоны) определяются как величиной и знаком заряда на поверхности полупроводника, так и его объёмными характеристиками: диэлектрической постоянной  $\epsilon_1$ , типом и концентрацией  $n_1$  свободных носителей (степенью объёмного легирования), температурой  $T$  и т.п., и являются характеристикой свободной поверхности полупроводника [1, 2].

В данной работе в рамках нелокальной электростатики [3, 4] теоретически рассчитан зарядовый потенциал  $\Delta V_j^\sigma(x)$ , связанный с наличием на поверхностях полупроводника и металла заряда с плотностью  $\sigma_1^0$  и  $\sigma_2^0$ .

Показано, что при уменьшении разделяющего расстояния  $L <$

$< L_{\text{ОПЗ}} \cong 100$  нм существенно усиливается экранирование поверхностного заряда полупроводника  $\sigma_1^0$  свободными электронами металла и влияние заряда с плотностью  $\sigma_2^0$  на его поверхности, что приводит к изменению основных параметров ОПЗ.

При дальнейшем уменьшении вакуумного интервала  $L < 10$  нм образуется потенциальный барьер, который обусловлен разницей в объёмных свойствах каждой из трёх сред ( $j = 1, 2, 3$ ) и определяется распределением потенциала сил изображения  $V_j^0(x)$  [3, 4].

Непрерывность  $V_j^0(x)$  и суммарного потенциала  $V_j(x)$  на границах раздела обусловлена корректным учётом эффектов пространственной дисперсии в функциях диэлектрической проницаемости полупроводника  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  и металла  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  [3, 4].

За счёт разницы в работах выхода металла  $\phi_3$  и полупроводника  $\phi_1$  переход ПВМ-системы в контакт (общий уровень Ферми) приводит к конечному скачку потенциала, который равен контактной разнице потенциалов  $\Delta\Phi = \phi_3 - \phi_1$ .

Непрерывность суммарного потенциала  $V_j(x)$  ПВМ-системы при её переходе в контакт может быть сохранена за счёт изменения зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  благодаря возникновению двойного электрического слоя (ДЭС) при перераспределении суммарных плотностей зарядов на поверхности полупроводника  $\sigma_1^0 \rightarrow \sigma_1(\Delta\Phi)$  и металла  $\sigma_2^0 \rightarrow \sigma_2(\Delta\Phi)$ .

Основываясь на полученном в работах [5] распределении зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  и условия  $L < L_{\text{ОПЗ}}$  возникновения взаимосвязи между разделёнными вакуумным промежутком  $L$  полупроводником и металлом, что и предопределяет возникновение ДЭС, в данной работе в рамках нелокальной электростатики [3–5] теоретически рассчитан суммарный электростатический потенциал  $V_j(x, \Delta\Phi)$  в ПВМ-системе в контакте.

Распределение электростатического потенциала до контакта  $V_j(x)$  и его изменение при переходе в контакт  $V_j(x, \Delta\Phi)$  анализируется на примере системы  $n\text{-Si}$ –вакуум–Au.

Показано, что при переходе ПВМ-структуры в выпрямляющий контакт стабильность высоты запирающего слоя  $h(\Delta\Phi) = \Delta V_1^\sigma(x, \Delta\Phi)|_{x=0}$  в плоскости контакта металл–полупроводник обусловлена его независимостью от толщины  $L$  ДЭС, то есть независимостью от микронеоднородностей как поверхности полупроводника, так и металла.

Наличие таких неоднородностей в поверхностной атомной структуре (ступенек, примесей и др.), что предопределяет локальное изменение толщины ДЭС, приводит к локальному изменению высоты суммарного потенциального барьера  $V_2(x, \Delta\Phi)$  внутри вакуумной щели ДЭС (за счёт потенциала сил изображения  $V_2^0(x)$  [3, 4]), но не влияет на стабильность высоты  $h(\Delta\Phi)$  запирающего слоя на границе раздела полупроводник–вакуум.

## 2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим несимметричную трёхслойную структуру, которая состоит из полуограниченного полупроводника с диэлектрической функцией  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  в области  $x \leq 0$  и с плотностью заряда  $\sigma_1^0(y, z)$  на его поверхности и из полуограниченного металла с диэлектрической функцией  $\varepsilon_3(\mathbf{k})$  в области  $x \geq L$  и плотностью заряда  $\sigma_2^0(y, z)$  на поверхности, которые разделены вакуумным промежутком  $0 \leq x \leq L$  ( $\varepsilon_2(\mathbf{k}) = 1$ ) [3–5].

Диэлектрическую функцию  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  легированного полупроводника зададим в следующем виде [3–5]:

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\varepsilon_1 - 1}{1 + \frac{|\mathbf{k}|^2}{\lambda_1^2}(\varepsilon_1 - 1)} + \frac{\kappa_1^2}{|\mathbf{k}|^2} (|\mathbf{k}|^2 = k_\perp^2 + q^2), \quad (1)$$

где  $\varepsilon_1$  — диэлектрическая постоянная кристаллической решётки (при  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ );  $\lambda_1^{-1}$  — эффективный радиус экранирования связанными (валентными) электронами ионных остовов кристаллической решётки, который по порядку величины равен размеру атома (иона) и который рассчитывается с учётом зонной структуры полупроводника [3–5];  $\kappa_1^2 = 4\pi e^2 n_1 / \varepsilon_1 k_B T$  в приближении Дебая–Хюккеля (ПДХ) в случае невырожденного электронного газа,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $n_1$  — концентрация невырожденного газа свободных электронов (дырок) (в работе рассмотрен случай  $n$ -типа полупроводников).

Для определения диэлектрической функции металла  $\varepsilon_3(\mathbf{k})$  воспользуемся общеизвестным длинноволновым приближением Томаса–Ферми (ПТФ), в котором  $\varepsilon_3(\mathbf{k})$  имеет следующий вид:

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

где  $\kappa_3^2 = 6\pi e^2 n_3 / E_F^3$ ,  $n_3$  — концентрация,  $E_F^3 = \hbar^2 (3\pi^2 n_3)^{2/3} / 2m_3$  — энергия Ферми и  $m_3$  — эффективная масса свободных электронов в металле.

В случае однородной плотности заряда  $\sigma_1^0$  на полупроводниковой и  $\sigma_2^0$  на металлической поверхностях, когда фурье-компоненты суммарных плотностей заряда имеют вид  $\sigma_1^0(q) = (2\pi)^2 \sigma_1^0 \delta(q_y) \delta(q_z)$  и  $\sigma_2^0(q) = (2\pi)^2 \sigma_2^0 \delta(q_y) \delta(q_z)$ , полный потенциал  $V_j(x)$ , согласно работам [5, 6], определяется следующим выражением:

$$V_j(x) = V_j^0(x) + \Delta V_j^\sigma(x). \quad (3)$$

Здесь  $V_j^0(x)$  — потенциал сил изображения,  $\Delta V_j^\sigma(x)$  — зарядо-

вый потенциал [5, 6], связанный с наличием заряда на поверхностях полупроводника  $\sigma_1^0(x=0)$  и металла  $\sigma_2^0(x=L)$ , который в рамках метода диэлектрического формализма для системы трёх сред с пространственной дисперсией [3] при условии непрерывности потенциала  $V_j(x)$  и конечного скачка  $4\pi\sigma_{1,2}$  его первой производной на границах раздела сред для рассматриваемой ПВМ-системы с учётом (1) и (2) имеет следующий вид:

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

$$\Delta V_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \{ \sigma_1^0 a_1(0, 0) [1 + \kappa_3(L - x)] + \sigma_2^0 [a_1(0, 0) + x] \}}{1 + \kappa_3 [L + a_1(0, 0)]} \quad (0 \leq x \leq L), \quad (5)$$

$$\Delta V_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e e^{-\kappa_3(x-L)} \{ \sigma_1^0 a_1(0, 0) + \sigma_2^0 [a_1(0, 0) + L] \}}{1 + \kappa_3 [L + a_1(0, 0)]} \quad (x \geq L). \quad (6)$$

Здесь

$$a_1(0; |x|) = \frac{1}{\beta_+^2 - \beta_-^2} \left[ \frac{e^{-|x|\beta_+}}{\beta_+} \left( \beta_+^2 - \frac{\kappa_1^2 \Lambda^2}{\epsilon_1} \right) - \frac{e^{-|x|\beta_-}}{\beta_-} \left( \beta_-^2 - \frac{\kappa_1^2 \Lambda^2}{\epsilon_1} \right) \right], \quad (7)$$

$$\beta_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[ \kappa_1^2 (1 + \Lambda^2) \right] \pm \frac{\kappa_1^2}{2} \sqrt{(1 + \Lambda^2)^2 - \frac{4\Lambda^2}{\epsilon_1}}, \quad \Lambda = \frac{\lambda_1}{\kappa_1} \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_1 - 1}}. \quad (8)$$

Переход ПВМ-системы в контакт является переходом системы с разными работами выхода  $\phi_1$  и  $\phi_3$  от общего (вакуумного) уровня отсчёта энергии к общему уровню Ферми, что вызывает конечный скачок потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  на границах раздела, который равен контактной разнице потенциалов  $\Delta\Phi = \phi_3 - \phi_1$ , так что

$$\Delta V_2^\sigma(L) - \Delta V_2^\sigma(0) = \Delta V_3^\sigma(L) - \Delta V_1^\sigma(0) = \Delta\Phi. \quad (9)$$

Как было показано в [3, 4], непрерывность потенциала сил изображения  $V_j^0(x)$  (и суммарного потенциала  $V_j(x)$ ) [5, 6] в ПВМ-системе до контакта обеспечивается корректным учётом эффектов пространственной дисперсии в функциях диэлектрической проницаемости полупроводника  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  (1) и металла  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  (2). Непрерывность суммарного потенциала  $V_j(x)$  при переходе ПВМ-системы в контакт при условии  $L < L_{\text{опз}}$  может быть сохранена за счёт изменения зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$ , благодаря возникновению ДЭС при перераспределении суммарных плотностей

заряда на поверхностях полупроводника и металла:

$$\sigma_1^0 \rightarrow \sigma_1(\Delta\Phi) = \sum_{i=1}^{v_1} \sigma_i, \quad \sigma_2^0 \rightarrow \sigma_2(\Delta\Phi) = \sum_{k=1}^{v_2} \sigma_k, \quad (10)$$

где  $v_1$  и  $v_2$  — количество типов поверхностных состояний на полупроводниковой и металлической поверхностях.

Из уравнений (4)–(6), учитывая (9) и (7), (8), для определения плотности заряда на поверхностях полупроводника  $\sigma_1(\Delta\Phi)$  и металла  $\sigma_2(\Delta\Phi)$  после контакта имеем:

$$\sigma_1(\Delta\Phi) = \frac{-\Delta\Phi}{4\pi eL} \left( 1 + \frac{\kappa_3 L}{1 + \kappa_3 a_1(0,0)} \right), \quad \sigma_2(\Delta\Phi) = -\sigma_1(\Delta\Phi). \quad (11)$$

Подставляя (11) в (4)–(7) с учётом (3), суммарный потенциал  $V_i(x, \Delta\Phi)$  в системе ПВМ после контакта (для отрицательных зарядов  $-e$  (электронов)) определим следующими уравнениями:

$$V_1(x, \Delta\Phi) = V_1^0(x) - \Delta\Phi \left( 1 - \frac{\kappa_3 a_1(0, |x|)}{1 + \kappa_3 a_1(0,0)} \right) \quad (x \leq 0), \quad (12)$$

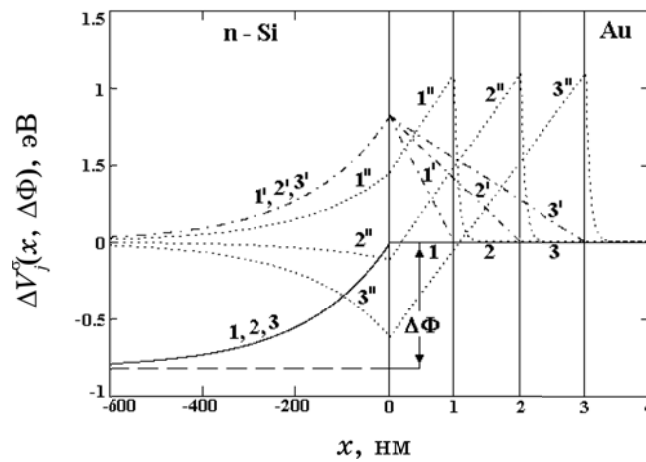
$$V_2(x, \Delta\Phi) = V_2^0(x) - \Delta\Phi \left[ \frac{1}{1 + \kappa_3 a_1(0,0)} \right] \quad (0 \leq x \leq L), \quad (13)$$

$$V_3(x, \Delta\Phi) = V_3^0(x) - \Delta\Phi \frac{e^{-\kappa_3(x-L)}}{1 + \kappa_3 a_1(0,0)} \quad (x \geq L). \quad (14)$$

Как видим, распределение зарядового потенциала  $\Delta V_1^\sigma(x, \Delta\Phi)$  (второй член в (12)) в полупроводнике, которое определяет формирование запирающего слоя ПВМ-системы в контакте, не зависит от толщины  $L$  ДЭС, но сохраняет взаимосвязь с металлом.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Расчёт электростатического потенциала в системе ПВМ до и после контакта выполним на примере  $n$ -Si–вакуум–Au системы, которая широко используется в полупроводниковой микроэлектронике и объёмные параметры которой хорошо известны [4, 5] для невырожденного полупроводника  $n$ -типа ( $n$ -Si): диэлектрическая константа —  $\epsilon_1 = 11,9$ , температура —  $T = 293$  К, концентрация —  $n_1 = 6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , эффективная масса электронов  $m_\perp = 0,98$  (поперечная) и  $m_l = 0,19$  (продольная),  $\lambda_1 = 5,908 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$  и  $\chi_1 = -E_c = 4,05$  эВ — положение дна зоны проводимости в объёме полупроводника. Для металла (Au):  $\phi_3 = 5,1$  эВ,  $n_3 = 5,9 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  и  $m_3 = 0,87325 m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона.



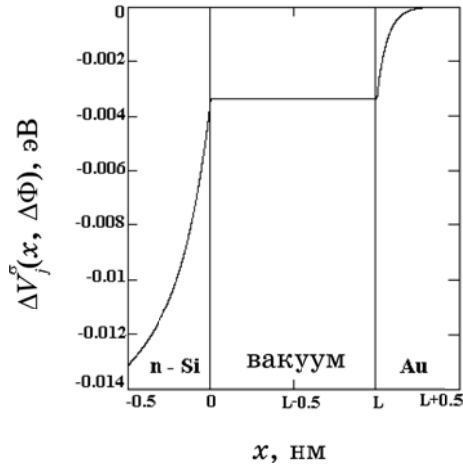
**Рис. 1.** Распределение зарядового потенциала до контакта  $\Delta V_j^\sigma(x)$  (точечные кривые  $1''-3''$ ), после контакта  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  (штрихпунктирные кривые  $1'-3'$ ) и при приведении системы  $n$ -Si–вакуум–Au к единому уровню Ферми (сплошные кривые  $1-3$ ).

Определим распределение зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  в  $n$ -Si–вакуум–Au системе в отсутствие контакта, когда поверхность золота с однородной плотностью заряда  $\sigma_2^0 = -1 \cdot 10^{14} \text{ e/cm}^2$  находится на расстояниях  $L = 1, 2, 3$  нм от поверхности  $n$ -Si с однородной плотностью заряда  $\sigma_1^0 = 3,4 \cdot 10^{14} \text{ e/cm}^2$ . Соответствующие расчёты  $\Delta V_j^\sigma(x)$  согласно уравнениям (4)–(8) приведены на рис. 1 точечными кривыми  $1''-3''$ .

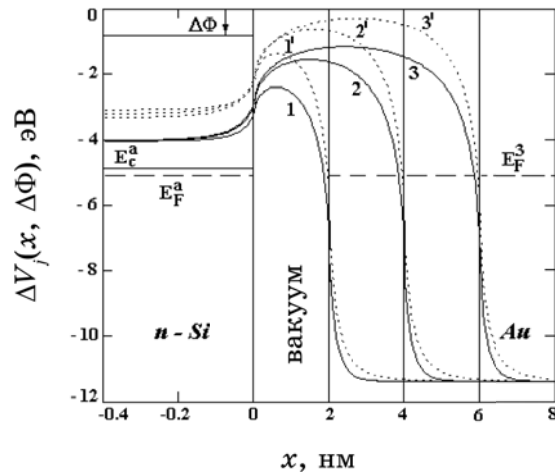
При переходе системы  $n$ -Si–вакуум–Au в контакт распределение зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  определяется также уравнениями (4)–(8), но с плотностью заряда  $\sigma_1(\Delta\Phi)$  и  $\sigma_2(\Delta\Phi)$  на ДЭС (11) в соответствии с контактной разницей потенциалов  $\Delta\Phi$  (при заданных параметрах  $\Delta\Phi = 0,824$  эВ). Расчёты зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  после контакта приведены на рис. 1 штрихпунктирными кривыми  $1'-3'$ . На рисунке 1 сплошной кривой  $1-3$  показано также распределение  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  с учётом выравнивания уровней Ферми полупроводника и металла, рассчитанное согласно вторым слагаемым уравнений (12)–(14).

Как видно из рис. 1, с уменьшением разделяющего расстояния  $L$  между полупроводником и металлом, когда  $L < L_{\text{ОПЗ}}$ , вклад экранирования поверхностного заряда полупроводника  $\sigma_1^0$  свободными электронами и поверхностным зарядом  $\sigma_2^0$  металла существенно увеличивается. Причём, для отрицательной плотности заряда  $\sigma_2^0$  на поверхности металла при уменьшении  $L$  происходит изменение изгиба зоны, то есть в полупроводнике  $n$ -типа с положительно заряженной поверхностью ОПЗ имеет характер потен-

циального барьера, параметры которого не связаны с контактной разницей потенциалов  $\Delta\Phi$  [1, 2], а определяются электронной структурой металла, величиной отрицательного заряда на его поверхности и расстоянием  $L$ .

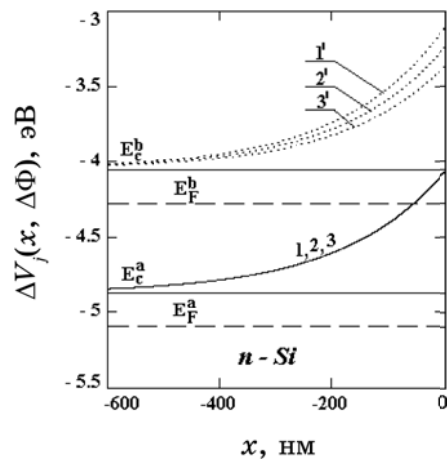


**Рис. 2.** Сплошная кривая — распределение  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  в системе  $n$ -Si-вакуум-Au в контакте.



**Рис. 3.** Распределение  $V_j(x)$  в системе  $n$ -Si-вакуум-Au до контакта при значениях  $\sigma_1^0 = 3,4 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$  и  $\sigma_2^0 = -10^{12} \text{ e/cm}^2$  для  $L = 0,2 \text{ нм}$  (точечная кривая 1'),  $L = 0,4 \text{ нм}$  (точечная кривая 2') и  $L = 0,6 \text{ нм}$  (точечная кривая 3'). Сплошные кривые 1-3 — распределение  $V_j(x, \Delta\Phi)$  в той же системе после контакта.  $E_c^a$  и  $E_F^a$  — положение нижнего края зоны проводимости в  $n$ -Si при  $|x| \rightarrow \infty$  и энергии Ферми после контакта.





**Рис. 4.** Распределение  $V_1(|x|)$  до контакта — точечные кривые  $1'$ ,  $2'$ ,  $3'$  и  $V_1(|x|, \Delta\Phi)$  после контакта — сплошная кривая  $1, 2, 3$  — в  $n$ -Si. Положение нижнего края зоны проводимости в  $n$ -Si при  $|x| \rightarrow \infty$  и энергии Ферми:  $E_c^b$  и  $E_F^b$  до контакта и  $E_c^a$  и  $E_F^a$  после контакта.

Зарядовая составляющая  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  суммарного потенциала  $V_j(x, \Delta\Phi)$  (12)–(14) внутри ( $0 \leq x \leq L$ ) и вблизи ДЭС, соответствующая сплошным кривым  $1$ – $3$  на рис. 1, возникающая при условии  $L < L_{\text{опз}}$  в системе  $n$ -Si–вакуум–Au после выравнивания уровней Ферми для всех толщин  $L$ , показана сплошной кривой на рис. 2.

На рисунках 1 и 2 видно, что переход системы  $n$ -Si–вакуум–Au в контакт обуславливает возникновение запирающего слоя с высотой  $h(\Delta\Phi) = 0,821$  эВ. Распределение  $\Delta V_1^\sigma(|x|, \Delta\Phi)$  в полупроводнике не зависит от толщины  $L$  вакуумной щели между полупроводником и металлом (сплошные кривые  $1$ – $3$  на рис. 1 и рис. 2), тогда как плотность заряда  $\sigma_1(\Delta\Phi)$  и  $\sigma_2(\Delta\Phi)$  изменяется от  $L$  в соответствии с уравнениями (11).

На рисунках 3 и 4 показан рассчитанный согласно работам [3–6] и уравнениям (4)–(8) потенциал  $V_j(x)$  (3) для  $n$ -Si–вакуум–Au в отсутствие контакта (точечные кривые  $1'$ – $3'$ ) и суммарный потенциал  $V_j(x, \Delta\Phi)$ , рассчитанный согласно уравнениям (12)–(14), в той же системе, которая находится в контакте (сплошные кривые  $1$ – $3$ ).

#### 4. ВЫВОДЫ

В данной работе в рамках метода диэлектрического формализма для системы трёх сред с пространственной дисперсией [3–6] рассмотрена задача о распределении электростатического потенциа-

ла  $V_j(x)$  в ПВМ-системе до контакта и при её переходе в контакт.

Показано, что необходимым условием возникновения ДЭС и, как следствие, выпрямляющего контакта, есть возникновение сильной взаимосвязи между полупроводником и близко расположенным металлом до их контакта. При  $L < L_{\text{опз}}$ , благодаря экранированию свободными электронами металла и влиянию некомпенсированного заряда с плотностью  $\sigma_2^0$  на его поверхности, происходит перераспределение зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  как во всей ПВМ-системе, так и в ОПЗ полупроводника.

Показано, что при переходе ПВМ-системы в выпрямляющий контакт:

— непрерывность суммарного потенциала  $V_j(x, \Delta\Phi)$  сохраняется благодаря корректному учёту эффектов пространственной дисперсии в функциях диэлектрической проницаемости полупроводника  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  и металла  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  и перераспределению суммарного заряда на их поверхностях в соответствии с величиной контактной разницы потенциалов  $\Delta\Phi$  и толщиной вакуумной щели  $L$ ;

— высота потенциального барьера  $V_2(x, \Delta\Phi)$  в вакуумной щели (внутри ДЭС) увеличивается с увеличением толщины  $L$  ДЭС в соответствии с распределением потенциала сил изображения  $V_2^0(x)$  в ней;

— полученное распределение зарядового компонента  $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$  суммарного электростатического потенциала  $V_j(x, \Delta\Phi)$  в полупроводнике ( $j=1$ ), не зависит от толщины  $L$  ДЭС, но сохраняет слабую зависимость от экранирующих свойств близко расположенного металла;

— учёт потенциала сил изображения  $V_j^0(x)$  приводит к увеличению суммарного потенциала  $V_1(0, \Delta\Phi)$  (значения высоты запирающего слоя) на поверхности полупроводника, однако поправки на  $V_1^0(0)$ , зависящие от  $L$ , существенны на расстояниях нескольких ангстрем, т.е. в пределах неоднородности поверхности полупроводника;

— высота барьера  $h(\Delta\Phi)$  на границе раздела полупроводник–вакуум ( $x=0$ ) в контакте (высота запирающего слоя) всегда меньше контактной разницы потенциалов  $h(\Delta\Phi) < \Delta\Phi$  из-за экранирующих свойств полупроводника и металла.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. W. Monch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag: 1995).
2. E. H. Rhoderick and R. H. Williams, *Metal–Semiconductor Contacts* (Oxford: Clarendon Press: 1988).
3. L. G. Il'chenko, E. A. Pashitskii, and Yu. A. Romanov, *Surf. Sci.*, **121**: 375 (1982).
4. Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко, В. В. Лобанов, *Вісник Київського націо-*

- нального університету імені Тараса Шевченка. Радіофізика та електроніка, 11: 29 (2008).*
5. Л. Г. Ільченко, В. В. Ільченко, В. В. Лобанов, *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Радіофізика та електроніка, 3: 29 (2009).*
  6. Л. Г. Ильченко, В. В. Лобанов, *Физико-химия наноматериалов и супрамолекулярных структур* (Ред. А. П. Шпак, П. П. Горбик) (Київ: Наукова думка: 2007), т. 2, с. 52.