

PACS numbers: 73.30.+y, 77.22.Ch, 79.70.+q, 85.30.De, 85.30.Hi, 85.30.Tv

## Влияние атомной структуры поверхности металла на потенциальный рельеф близкорасположенной поверхности полупроводника

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,  
радиофизический факультет,  
ул. Владимирская, 64,  
02033 Киев, Украина*

В рамках метода диэлектрического формализма для системы трёх сред с пространственной дисперсией рассчитан структурный потенциал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  в системе полупроводник–вакуум–металл, который обусловлен атомной (микроскопической) структурой каждой из поверхностей. Взаимосвязь между полупроводником и металлом, которая обусловлена экранированием поверхностного заряда полупроводника свободными электронами близко расположенного металла и усилена образованием потенциального барьера в вакуумном промежутке при  $L < 10$  нм, существенно возрастает с уменьшением его толщины  $L < 0,1$  нм. Показано, что рассчитанный структурный потенциал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , который является суперпозицией вкладов микроскопической структуры каждой из двух поверхностей, является несимметричным и обуславливает не только локальное изменение высоты потенциального барьера в вакуумной щели, но и латеральное изменение суммарного потенциала  $V_j(\mathbf{r})$  на поверхности полупроводника и в его приповерхностной области.

В межах методи діелектричного формалізму для систем з трьох середовищ з просторовою дисперсією розраховано структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  в системі напівпровідник–вакуум–метал, який обумовлений атомарною (мікроскопічною) структурою кожної з поверхонь. Взаємозв'язок між напівпровідником та металом, який обумовлений екрануванням поверхневого заряду напівпровідника вільними електронами близько розташованого металу та підсилений утворенням потенціального бар'єру у вакуумному проміжку при  $L < 10$  нм, істотно зростає зі зменшенням його товщини  $L < 0,1$  нм. Показано, що розрахований структурний потенціал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , який є суперпозицією внесків мікроскопічної структури кожної з двох по-

верхонь, є несиметричним та обумовлює не тільки локальну зміну висоти потенціального бар'єру у вакуумній щілині, але й латеральну зміну сумарного потенціалу  $V_j(\mathbf{r})$  на поверхні напівпровідника та в його приповерхневій області.

Within the scope of the dielectric formalism for three media with spatial dispersion, structural potential in a semiconductor–vacuum–metal system,  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , is calculated. This potential is caused by atomic (microscopic) structure of each surface. Interconnection between semiconductor and metal, which is caused by shielding of surface-bound charge of semiconductor by free electrons of closely located metal and enhanced by formation of potential barrier in a vacuum gap at  $L < 10$  nm, increases substantially with the decrease of its thickness,  $L < 0.1$  nm. As shown, the calculated structural potential,  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , which is a superposition of contributions of microscopic structures of each of two surfaces, is asymmetric and causes not only local change of the height of potential barrier in the vacuum gap, but also a lateral change of total potential,  $V_j(\mathbf{r})$ , on the surface of semiconductor and in its near-surface area.

**Ключевые слова:** нелокальная электростатика, структурный потенциал, потенциальный барьер.

*(Получено 18 ноября 2010 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что возникновение области пространственного заряда (ОПЗ) в полупроводнике связано с присутствием на его поверхности заряда с плотностью  $\sigma_1$ . Параметры ОПЗ для свободной поверхности полупроводника (толщина ОПЗ  $L_{\text{опз}}$  и значение потенциала  $\Delta V_j^\sigma(0)$  на его поверхности — изгиб зоны) определяются величиной и знаком заряда на поверхности полупроводника и его объёмными характеристиками [1–4].

В [5, 6] в отсутствие контакта металл–полупроводник и внешнего напряжения  $U = 0$  определено влияние близкорасположенного металла и зарядового состояния его поверхности на параметры ОПЗ полупроводника. Было показано, что рассчитанный в рамках метода диэлектрического формализма [5–10] электростатический потенциал  $V_j(x)$  точечного заряда  $e$  в системе полупроводник–вакуум–металл (ПВМ) [10] непрерывен на границах раздела при корректном учёте эффектов пространственной дисперсии в функциях диэлектрической проницаемости полупроводника  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  и металла  $\epsilon_3(\mathbf{k})$ .

Когда толщина вакуумного зазора  $L$  между полупроводником и металлом уменьшается до расстояний  $L < L_{\text{опз}}$ , усиливается экранирование поверхностного заряда полупроводника (с плотностью  $\sigma_1$ ) свободными электронами металла. При последующем уменьшении вакуумного интервала  $L < 10$  нм между полупроводником и металлом образуется потенциальный барьер, который обусловлен от-

личием в объёмных свойствах каждой из трёх сред ( $j = 1, 2, 3$ ) и определяется распределением потенциала сил изображения  $V_j^0(x)$  [10]. Дальнейшее уменьшение толщины вакуумной щели  $L < 1$  нм приводит к увеличению вклада микроскопической структуры поверхностей в распределение потенциала  $V_j(\mathbf{r})$ , который определяется структурным потенциалом  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  [11–15].

В данной работе для легированных полупроводников  $n$ -типа рассчитан суммарный потенциал  $V_j(\mathbf{r})$  в ПВМ-системе с учётом зарядового состояния и атомной (микроскопической) структуры каждой из поверхностей. Определено влияние микроскопической структуры металлической поверхности на потенциальный рельеф поверхности полупроводника. Показано, что структурный потенциал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , который является суперпозицией вкладов микроскопической структуры каждой из двух поверхностей, является несимметричным и обуславливает латеральное (вдоль границ раздела) изменение суммарного потенциала  $V_j(\mathbf{r})$  во всей ПВМ-системе.

Присутствие металла на расстояниях  $L < L_{\text{опз}}$  от поверхности полупроводника изменяет не только величину поверхностного изгиба зон полупроводника, но и при уменьшении толщины вакуумной щели до расстояний  $L < 1$  нм может стимулировать латеральное перераспределение плотности заряда не только на поверхности полупроводника, но и в его приповерхностной области.

## 2. ТЕОРИЯ

Рассмотрим несимметричную трехслойную структуру, которая состоит из полуограниченного полупроводника с диэлектрической функцией  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  в области  $x \leq 0$  и с плотностью заряда  $\sigma_1(y, z)$  на его поверхности и из полуограниченного металла с диэлектрической функцией  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  в области  $x \geq L$  и плотностью заряда  $\sigma_2(y, z)$  на поверхности, которые разделены вакуумным промежутком  $0 \leq x \leq L$  ( $\epsilon_2(\mathbf{k}) = 1$ ) [7–10, 12–15].

Диэлектрическую функцию  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  легированного полупроводника зададим в следующем виде [5, 6, 10]:

$$\epsilon_1(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\epsilon_1 - 1}{1 + \left( \frac{k^2}{\lambda_1^2} \right)} + \frac{\kappa_1^2}{k^2}, \quad k^2 = k_{\perp}^2 + q^2, \quad (1)$$

где  $\epsilon_1$  — диэлектрическая постоянная кристаллической решётки (при  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ ),  $\lambda_1^{-1}$  — эффективный радиус экранирования связанными (валентными) электронами ионных остовов кристаллической решетки, который по порядку величины равен размеру атома (иона) и который рассчитывается с учетом зонной структуры полупроводника [5, 6, 10],  $\kappa_1^2 = 4\pi e^2 n_1 / \epsilon_1 k_B T$  в приближении Дебая–

Хюккеля (ПДХ) в случае невырожденного электронного газа,  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $n_1$  — концентрация невырожденного газа свободных электронов (дырок) (рассматриваем случай полупроводников  $n$ -типа).

Для определения диэлектрической функции металла  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  воспользуемся общеизвестным длинноволновым приближением Томаса–Ферми (ПТФ), в котором  $\epsilon_3(\mathbf{k})$  имеет следующий вид:

$$\epsilon_3(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\kappa_3^2}{k^2}, \quad k = \{k_\perp, q\}; \quad (2)$$

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

Учтём зарядовое состояние и микроскопическую структуру полупроводниковой и металлической поверхностей при  $L > L_{\text{ОПЗ}}$ , считая, что латеральное распределение плотностей заряда на поверхностях  $\sigma_1(y, z)$  полупроводника ( $x \leq L$ ) и  $\sigma_2(y, z)$  металла ( $x \geq L$ ) сформировано упорядоченными решётками поверхностных атомов или адсорбируемых ионов с двумерной концентрацией  $N_{i,n} = b_{i,n}^{-2}$ , стороной решетки  $b_{i,n}$  и эффективным зарядом  $e_{i,n}^*$  на поверхностных зарядах  $i, n$ -го типов. Для упрощения расчётов в данной работе мы рассматриваем квадратные решётки, так что Фурье-компонента плотности заряда  $\sigma_1(y, z)$  на упорядоченных решётках может быть представлена в следующем виде [11–16]:

$$\sigma_1(q) = \sum_{i=1}^{v_1} \sigma_i(q) = (2\pi)^2 \sum_{i=1}^{v_1} e_i^* N_i \left[ \delta(q_y) \delta(q_z) + \delta\left(q_y - 2\pi/a_i\right) \delta\left(q_z - 2\pi/a_i\right) \right], \quad (3)$$

$$\sigma_2(q) = \sum_{n=1}^{v_2} \sigma_n(q) = (2\pi)^2 \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n \left[ \delta(q_y) \delta(q_z) + \delta\left(q_y - 2\pi/b_n\right) \delta\left(q_z - 2\pi/b_n\right) \right], \quad (4)$$

где  $v_{1,2}$  — количество типов атомных решёток. Первые члены в (3), (4) соответствуют однородной (немодулированной) плотности заряда на полупроводниковой и металлической поверхностях соответственно.

Суммарный потенциал  $V_j(\mathbf{r})$  в ПВМ-системе с учётом микроскопической структуры границ раздела (3), (4) имеет следующий вид

$$V_j(\mathbf{r}) = V_j^0(x) + \Delta V_j(\mathbf{r}), \quad \Delta V_j(\mathbf{r}) = \Delta V_j^\sigma(x) + \Delta V_j^{st}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где  $V_j^0(x)$  — потенциал сил изображения, который обусловлен отличием в объёмных свойствах каждой из трёх сред ( $j = 1, 2, 3$ ) [5–10],  $\Delta V_j^\sigma(x)$  — зарядовый потенциал, связанный с наличием однородных плотностей заряда  $\sigma_{1,2}$  на поверхностях полупроводника и металла [5,

6, 11–15], и  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  — структурный потенциал, обусловленный атомной (микроскопической) структурой их поверхностей [11–15].

Используя результаты работ [5, 6], для расчёта зарядового потенциала  $\Delta V_j^\sigma(x)$  в ПВМ-системе получаем:

$$\Delta V_1^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e a_1(0; |x|)}{1 + \kappa_3 [L + a_1(0; 0)]} \left[ \sum_{i=1}^{v_1} e_i^* N_i (1 + \kappa_3 L) + \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n \right] (x \leq 0), \quad (6)$$

$$\Delta V_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e}{1 + \kappa_3 [L + a_1(0; 0)]} \times \left\{ \sum_{i=1}^{v_1} e_i^* N_i a_1(0; 0) [1 + \kappa_3 (L - x)] + \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n [a_1(0; 0) + x] \right\} (0 \leq x \leq L), \quad (7)$$

$$\Delta V_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e e^{-\kappa_3(x-L)}}{1 + \kappa_3 [L + a_1(0; 0)]} \times \left\{ \sum_{i=1}^{v_1} e_i^* N_i a_1(0; 0) + \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n [a_1(0; 0) + L] \right\} (x \geq L). \quad (8)$$

Здесь

$$a_1(0; |x|) = \frac{1}{\beta_+^2 - \beta_-^2} \left[ \frac{e^{-|x|\beta_+}}{\beta_+} \left( \beta_+^2 - \frac{\kappa_1^2 \Lambda^2}{\epsilon_1} \right) - \frac{e^{-|x|\beta_-}}{\beta_-} \left( \beta_-^2 - \frac{\kappa_1^2 \Lambda^2}{\epsilon_1} \right) \right], \quad (9)$$

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

Для расчёта структурного потенциала  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  в каждой из трёх сред получаем следующие уравнения:

$$\Delta V_j^{st}(\mathbf{r}) = -4\pi e \left\{ \sum_{i=1}^{v_1} e_i^* N_i [H_i^\alpha(x)]_j \cos\left(\frac{2\pi y}{a_i}\right) \cos\left(\frac{2\pi z}{a_i}\right) + \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n [H_n^\beta(x)]_j \cos\left(\frac{2\pi y}{b_n}\right) \cos\left(\frac{2\pi z}{b_n}\right) \right\}, \quad (10)$$

где

$$\left. \begin{aligned} [H_i^\alpha(x)]_1 &= \frac{1}{\chi_\alpha} A_1^\alpha(x) \left[ \alpha_1^i A_3^\alpha(L) \operatorname{ch}(L\alpha_1^i) + \operatorname{sh}(L\alpha_1^i) \right] \\ [H_n^\beta(x)]_1 &= \frac{1}{\chi_\beta} A_1^\beta(x) \left[ \beta_1^n A_3^\beta(L) \operatorname{ch}(L\beta_1^n) + \operatorname{sh}(L\beta_1^n) \right] \end{aligned} \right\} (j = 1); \quad (11)$$

$$\left. \begin{aligned} [H_i^\alpha(x)]_2 &= \frac{1}{\chi_\alpha} A_1^\alpha(0) \left\{ \text{sh}[(L-x)\alpha_1^i] + \alpha_1^i A_3^\alpha(L) \text{ch}[(L-x)\alpha_1^i] \right\} \\ [H_n^\beta(x)]_2 &= \frac{1}{\chi_\beta} A_1^\beta(0) \left\{ \text{sh}[(L-x)\beta_1^n] + \beta_1^n A_3^\beta(L) \text{ch}[(L-x)\beta_1^n] \right\} \end{aligned} \right\} (j=2); \quad (12)$$

$$[H_i^\alpha(x)]_3 = \frac{1}{\chi_\alpha} A_3^\alpha(x) \alpha_1^i A_1^\alpha(0), \quad [H_n^\beta(x)]_3 = \frac{1}{\chi_\beta} A_3^\beta(x) \beta_1^n A_1^\beta(0) \quad (j=3); \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_\alpha &= (\alpha_1^i)^2 A_1^\alpha(0) A_3^\alpha(L) \text{sh}(L\alpha_1^i) + \alpha_1^i [A_1^\alpha(0) + A_3^\alpha(L)] \text{ch}(L\alpha_1^i) + \text{sh}(L\alpha_1^i) \\ \chi_\beta &= (\beta_1^n)^2 A_1^\beta(0) A_3^\beta(L) \text{sh}(L\beta_1^n) + \beta_1^n [A_1^\beta(0) + A_3^\beta(L)] \text{ch}(L\beta_1^n) + \text{sh}(L\beta_1^n) \end{aligned} \right\}; \quad (14)$$

$$A_1^{\alpha,\beta}(x) = \frac{1}{\left[ (B_1^+)_{\alpha,\beta} \right]^2 - \left[ (B_1^-)_{\alpha,\beta} \right]^2} \left\{ \frac{\exp\left\{ - (B_1^+)_{\alpha,\beta} |x| \right\}}{(B_1^+)_{\alpha,\beta}} \left[ (B_1^+)_{\alpha,\beta} - \frac{\Lambda_1^2}{\varepsilon_1} \right] - \frac{\exp\left\{ - (B_1^-)_{\alpha,\beta} |x| \right\}}{(B_1^-)_{\alpha,\beta}} \left[ (B_1^-)_{\alpha,\beta} - \frac{\Lambda_1^2}{\varepsilon_1} \right] \right\}; \quad (15)$$

$$\left. \begin{aligned} (B_1^\pm)_\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_1^2 + \Lambda_1^2 \pm \sqrt{(\kappa_1^2 + \Lambda_1^2)^2 - \frac{4\Lambda_1^2 \kappa_1^2}{\varepsilon_1}}} \\ (B_1^\pm)_\beta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_1^2 + \Lambda_1^2 \pm \sqrt{(\kappa_1^2 + \Lambda_1^2)^2 - \frac{4\Lambda_1^2 \kappa_1^2}{\varepsilon_1}}} \end{aligned} \right\}; \quad (16)$$

$$A_3^\alpha(x) = \frac{\exp\left\{ -(x-L)\sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_3^2} \right\}}{\sqrt{(\alpha_1^i)^2 + \kappa_3^2}}, \quad A_3^\beta(x) = \frac{\exp\left\{ -(x-L)\sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_3^2} \right\}}{\sqrt{(\beta_1^n)^2 + \kappa_3^2}}; \quad (17)$$

$$\alpha_1^i = 2\pi/a_i \sqrt{2}; \quad \beta_1^n = 2\pi/b_n \sqrt{2}; \quad \Lambda_1 = \lambda_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - 1}}. \quad (18)$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Влияние микроскопической структуры близкорасположенной ме-

таллической поверхности на потенциальный рельеф поверхности полупроводника определим на примере широко используемой в полупроводниковой микроэлектронике системы  $n$ -Si–вакуум–Au, объёмные параметры которой хорошо известны [5, 6, 10]. Для невырожденного полупроводника  $n$ -типа ( $n$ -Si): диэлектрическая константа —  $\epsilon_1 = 11,9$ , температура —  $T = 293$  К, концентрация —  $n_1 = 3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, эффективная масса электронов  $m_{\perp} = 0,98$  (поперечная),  $m_{\parallel} = 0,19$  (продольная),  $\lambda_1 = 5,917 \cdot 10$  см<sup>-1</sup> и  $\chi_1 = -E_c = 4,05$  эВ — положение дна зоны проводимости в объёме полупроводника. Для металла (Au):  $\phi_3 = 5,1$  эВ — работа выхода,  $n_3 = 5,9 \cdot 10^{22}$  — концентрация и  $m_3 = 0,87325m_0$  — эффективная масса электронов, где  $m_0$  — масса свободного электрона.

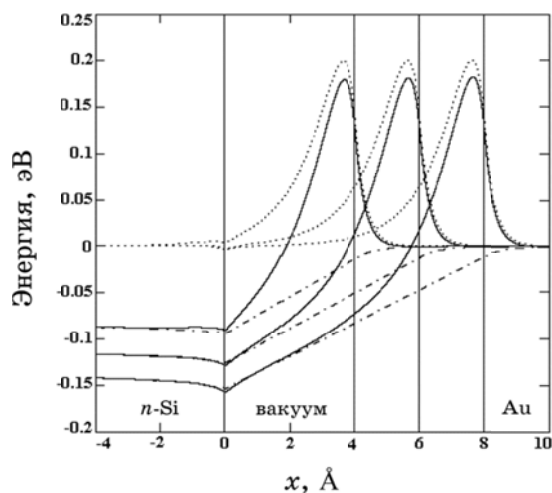
Распределение зарядового потенциала  $\Delta V_j^{\sigma}(x)$  для системы  $n$ -Si–вакуум–Au, рассчитанное согласно уравнениям (6)–(9) для кремния с однородной плотностью заряда  $\sigma_1 = 1,36 \cdot 10^{12}$  е/см<sup>2</sup> и для золота с квазинейтральной поверхностью, когда  $\sigma_2 = \sum_{n=1}^{v_2} e_n^* N_n = 0$ , при изменении толщины  $L$  вакуумного промежутка между ними, приведено на рис. 1 пунктирными кривыми.

Учтём микроскопическую структуру поверхности кремния, считая, что распределение плотности заряда  $\sigma_1(y, z)$  вдоль свободной поверхности ( $L > L_{\text{опз}}$ ) сформировано одним типом поверхностных атомов (ионов)  $v_1 = 1$ , образующих квадратную решетку с эффективным зарядом  $e_1^* = 0,002$  и двумерной концентрацией  $N_1 = 6,8 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>.

Оценим влияние микроскопической структуры поверхности металла (Au) на распределение электростатического потенциала в системе  $n$ -Si–вакуум–Au, считая, что квазинейтральность металлической поверхности обеспечена двумя типами  $v_2 = 2$  поверхностных решёток с параметрами  $e_1^* = 0,1$ ,  $N_1 = 10^{15}$  см<sup>-2</sup> на поверхностных атомах металла и  $e_2^* = -0,9$ ,  $N_2 = 1,11 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> в субмонослойном покрытии адсорбированных атомов, образующих структуру (3×3).

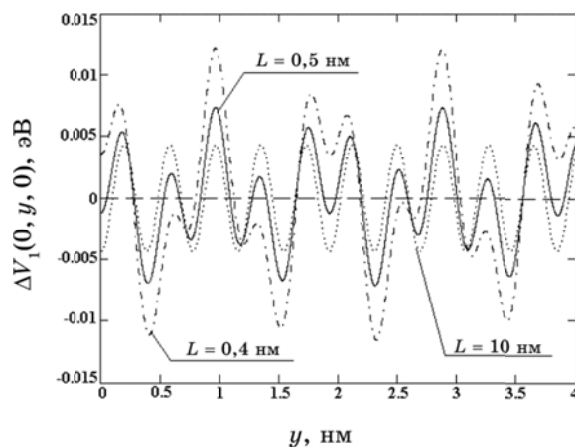
Распределение структурного потенциала  $\Delta V_j^{st}(x, 0, 0)$  (пунктирные кривые), рассчитанного согласно уравнений (10)–(18), и потенциала  $\Delta V_j(x, 0, 0)$  (5) (сплошные кривые), обусловленного зарядовым состоянием границ раздела и их атомной структурой, при изменении вакуумного промежутка  $L$  между поверхностями кремния и золота приведено на рис. 1.

Из рисунке 1 видно, что структурный потенциал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , рассчитанный с учётом эффектов пространственной дисперсии в диэлектрических функциях полупроводника (1) и металла (2), является несимметричным и обуславливает изменение высоты потенциального барьера как в разделяющей вакуумной щели, так и в приповерхностной области полупроводника.



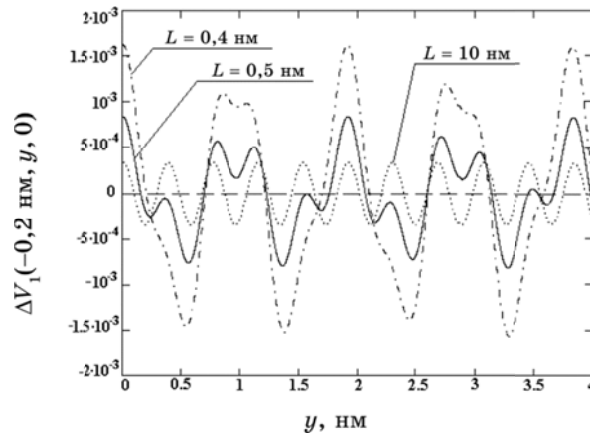
**Рис. 1.** Распределение потенциалов, — структурного  $\Delta V_j^{st}(x, 0, 0)$  (пунктирные кривые), зарядового  $\Delta V_j^\sigma(x)$  (штрихпунктирные кривые) и  $\Delta V_j(x, 0, 0)$  (сплошные кривые), — рассчитанное при  $L = 0,4, 0,6, 0,8$  нм для системы  $n$ -Si–вакуум–Au с приведенными выше объёмными и поверхностными параметрами.

Распределение структурного потенциала  $\Delta V_1^{st}(x, y, 0)$  на поверхности кремния ( $x = 0$ ) и в его приповерхностной области  $x = -0,2$  нм, когда поверхность металла расположена на расстоянии  $L = 10$  нм, показано на рис. 2 и рис. 3 пунктирной кривой. При уменьшении



**Рис. 2.** Распределение структурного потенциала  $\Delta V_1^{st}(0, y, 0)$  на поверхности кремния при  $L = 0,4$  нм (штрихпунктирная кривая),  $L = 0,5$  нм (сплошная кривая) и  $L = 10$  нм (пунктирная кривая) для системы  $n$ -S–вакуум–Au с приведенными выше объёмными и поверхностными параметрами.





**Рис. 3.** Распределение структурного потенциала  $\Delta V_1^{st}(-0,2 \text{ нм}, y, 0)$  в приповерхностной области кремния при  $L = 0,4 \text{ нм}$  (штрихпунктирная кривая),  $L = 0,5 \text{ нм}$  (сплошная кривая) и  $L = 10 \text{ нм}$  (пунктирная кривая) для системы  $n\text{-Si}$ -вакуум-Au с приведенными выше объёмными и поверхностными параметрами.

вакуумного промежутка  $L < 0,1 \text{ нм}$  вклад структурного потенциала  $\Delta V_1^{st}(x, y, 0)$  в потенциальный рельеф полупроводниковой поверхности  $V_1(\mathbf{r})$  (5) увеличивается.

На рисунках 2 и 3 показано влияние атомной структуры близкорасположенной  $L = 0,4 \text{ нм}$  (штрихпунктирная кривая) и  $L = 0,5 \text{ нм}$  (сплошная кривая) металлической поверхности на латеральное распределение структурного потенциала  $\Delta V_1^{st}(x, y, 0)$ , рассчитанное согласно (10), (12) с учётом (14)–(18), на поверхности кремния ( $x = 0$ ; рис. 2) и в его приповерхностной области ( $x = 0,2 \text{ нм}$ ; рис. 3).

Из рисунков 2 и 3 видно, что микроструктура близкорасположенной металлической поверхности существенно изменяет распределение структурного компонента потенциала  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , как в плоскости поверхности полупроводника, так и в его приповерхностной области, что может стимулировать латеральное перераспределение плотности поверхностных состояний, а также локальное изменение высоты потенциального барьера в разделяющей вакуумной щели.

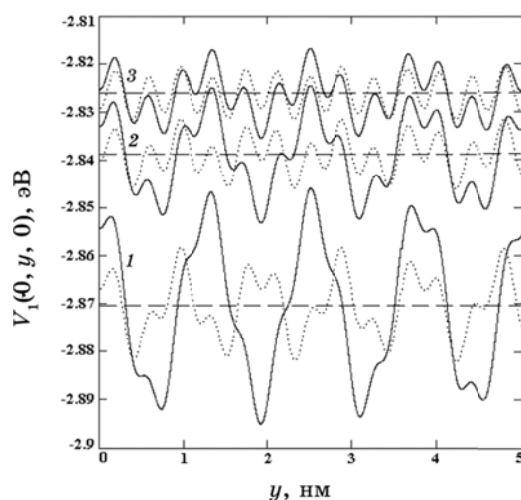
На рисунке 4 показано изменение потенциального рельефа поверхности полупроводника  $V_j(\mathbf{r})$  (5) (латеральное распределение суммарного электростатического потенциала), рассчитанного согласно уравнений (6), (10), (12) с учётом (9), (14)–(18) и результатов работы [9], при уменьшении толщины  $L$  вакуумного промежутка между поверхностью полупроводника ( $n\text{-Si}$ ) и квазинейтральной металлической (Au) поверхностью со структурой  $(3 \times 3)$  (пунктирные кривые) и со структурой  $(4 \times 4)$ , когда квазинейтральность металлической поверхности обеспечена двумя типами  $v_2 = 2$  поверхностных

решёток с параметрами  $e_1^* = 0,1$ ,  $N_1 = 10^{15}$  см<sup>-2</sup> на поверхностных атомах металла и  $e_2^* = -1,6$ ,  $N_2 = 6,25 \cdot 10^{15}$  см<sup>-2</sup> в субмонослойном покрытии адсорбированных атомов (сплошные кривые).

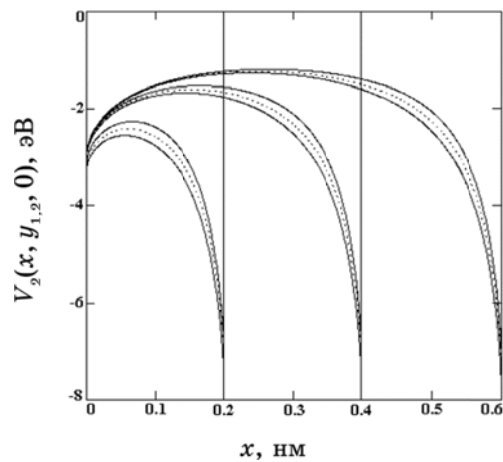
Из рисунков 2–4 видно, что микроскопическая (атомная) структура близкорасположенной поверхности металла оказывает существенное влияние на потенциальный рельеф поверхности полупроводника, причём это влияние усиливается с уменьшением толщины  $L$  вакуумной щели между поверхностями.

Структурный потенциал  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ , который является суперпозицией вкладов микроскопической структуры каждой из двух поверхностей (3), (4), является несимметричным и при уменьшении толщины вакуумного промежутка  $L < 0,1$  нм обуславливает не только латеральное изменение суммарного потенциала  $V_j(\mathbf{r})$  (5) на поверхности полупроводника и в его приповерхностной области, но и локальное изменение высоты потенциального барьера в вакуумной щели, что и продемонстрировано на рис. 5.

Как видим, учёт структурного потенциала  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  определяет локальное изменение высоты потенциального барьера в вакуумной щели вдоль плоскости поверхностей, стимулированное их микроскопической (атомной) структурой.



**Рис. 4.** Распределение потенциала  $V_1(0, y, 0)$  на поверхности кремния ( $x = 0$ ), когда поверхность золота со структурой  $(3 \times 3)$  (пунктирные кривые) и  $(4 \times 4)$  (сплошные кривые) находится на расстоянии  $L = 0,4$  нм (кривые 1),  $L = 0,5$  нм (кривые 2) и  $L = 0,6$  нм (кривые 3) для системы  $n$ -Si-вакуум-Au с приведенными выше объёмными и поверхностными параметрами. Горизонтальные штриховые кривые — значение суммарного потенциала  $V_1(0, y, 0)$  без учёта структурного компонента.



**Рис. 5.** Распределение  $V_2(x, y_{1,2}, 0)$  внутри вакуумной щели  $L = 0,2$  нм,  $L = 0,4$  нм и  $L = 0,6$  нм для системы  $n$ -Si–вакуум–Au с поверхностью золота со структурой  $(4 \times 4)$  при  $y_1 = 1,98$  нм и  $y_2 = 2,5$  нм, что соответствует положению минимального и максимального значения амплитуды структурного потенциала  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$ . Пунктирные кривые — распределение  $V_2(x)$  без учёта структурного потенциала.

#### 4. ВЫВОДЫ

В рамках метода диэлектрического формализма для системы трёх сред с пространственной дисперсией [3–6] теоретически рассчитан суммарный потенциал  $V_j(\mathbf{r})$  в ПВМ-системе с учётом микроскопической структуры границ раздела.

Присутствие металла на расстояниях  $L < L_{\text{опз}}$  от поверхности полупроводника приводит к изменению распределения  $\Delta V_j^{\sigma}(x)$  как в вакуумной щели, так и в ОПЗ полупроводника [5, 6]. Такая взаимосвязь между полупроводником и металлом, которая обусловлена экранированием поверхностного заряда полупроводника свободными электронами металла, усиливается образованием потенциального барьера в вакуумном промежутке при  $L < 10$  нм [9]. При дальнейшем уменьшении толщины вакуумной щели  $L < 1$  нм существенно возрастает взаимное влияние микроскопической (атомной) структуры каждой из поверхностей [11–15].

В данной работе рассчитано распределение структурного потенциала  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  в ПВМ-системе, и показано, что  $\Delta V_j^{st}(\mathbf{r})$  обуславливает не только локальное изменение высоты потенциального барьера в вакуумной щели, но и изменение суммарного потенциала  $V_j(\mathbf{r})$  в приповерхностной области и на поверхности полупроводника, что может привести к латеральному перераспределению плотности поверхностных состояний, стимулированное микроструктурой близ-

корасположенной металлической поверхности.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. W. Monch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag: 1995).
2. Р. Фишер и Х. Нойман, *Автоэлектронная эмиссия полупроводников* (Москва: Наука: 1971).
3. Г. П. Пека, В. І. Стріха, *Поверхневі та контактні явища в напівпровідниках* (Київ: Либідь: 1992).
4. М. Г. Находкін, Д. І. Шека, *Фізичні основи мікро- та наноелектроніки* (Київ: Київський університет: 2005).
5. Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко, В. В. Лобанов, *Радиофизика та електроніка: Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка*, **33**: 29 (2009).
6. Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко, В. В. Лобанов, *Радиофизика та електроніка: Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка*, **1**: 174 (2010); L. G. P'chenko, E. A. Pashitskii, and Yu. A. Romanov, *Surf. Sci.*, **121**: 375 (1982).
7. L. G. P'chenko and T. V. Gorauchuk, *Surf. Sci.*, **478**: 169 (2001).
8. L. G. P'chenko and T. V. Gorauchuk, *Ultramicroscopy*, **95**: 67 (2003).
9. Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко, В. В. Лобанов, *Радиофизика та електроніка: Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка*, **11**: 29 (2008).
10. L. G. P'chenko, V. V. P'chenko, T. V. Gorauchuk, and I. W. Rangelow, *Chemistry, Physics and Technology of Surfaces*, **4–6**: 186 (2001).
11. 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.
12. Л. Г. Ильченко, В. В. Ильченко, В. В. Лобанов, *Химия, физика и технология поверхности*, **14**: 43 (2008).
13. Л. Г. Ильченко, В. В. Лобанов, О. О. Чуйко, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **2**, вып. 4: 1145 (2004).
14. Л. Г. Ильченко, В. В. Лобанов, О. О. Чуйко, *Химия, физика и технология поверхности*, **11–12**: 4 (2006).
15. Л. Г. Ильченко, В. В. Лобанов, О. О. Чуйко, *Физика і хімія твердого тіла*, **6**, № 3: 471 (2005).