ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/119

ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДА И ФТОРА НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ InAlAs

^{1,2}Бакулин А.В., ²Фукс А.А., ³Аксенов М.С., ³Валишева Н.А., ^{1,2}Кулькова С.Е.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

³*Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск*

Полупроводниковые соединения $A^{III}B^V$ такие как InAs и GaAs, а также их тройные (квазибинарные) соединения, например $In_xAl_{1-x}As$, являются перспективными материалами для создания приборных транзисторов с высокой подвижностью электронов, СВЧ-фотодетекторов и ряда других приборов [1,2]. В частности, на основе гетероэпитаксиальных меза-структур $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ изготавливаются СВЧ-фотодиоды с барьером Шоттки, используемые в качестве быстрых детекторов в аналоговых волоконно-оптических линиях в спектральном диапазоне 1.55 мкм. Параметры этих приборов определяются характеристиками границ раздела металл/InAlAs и диэлектрик/InAlAs(InGaAs). В последнем случае важной задачей является формирование границы раздела диэлектрик/полупроводник с низкой плотностью интерфейсных состояний. Кроме приборов на основе структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП), последнее актуально для тех случаев, когда требуется качественная пассивация поверхности меза-структуры, например, для СВЧ-фотодиода. Сложность создания стабильных границ раздела с низкой плотностью интерфейсных состояний обусловлена негативным влиянием собственных оксидов. Кроме того, различные дефекты состава и структуры интерфейсной области также способствуют повышению плотности интерфейсных состояний ($>5 \cdot 10^{11} \text{ эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$) и закреплению уровня Ферми [3,4]. В настоящее время для улучшения свойств границ раздела полупроводников с собственными оксидами активно развивается направление, называемое «пассивацией». В рамках этого направления разрабатываются новые технологии химической обработки поверхности полупроводников $A^{III}B^V$ и нанесения на нее пассивирующих покрытий [4] с целью уменьшения скорости поверхностной рекомбинации и открепления уровня Ферми путем создания переходных слоев определенного состава.

Одним из способов модификации поверхности полупроводников при создании МДП структур является контролируемый рост фторсодержащих анодных оксидных слоев (ФАОС) в различных жидких и газовых средах. Для InAs это обеспечивает низкую плотность состояний ($<5 \cdot 10^{10} \text{ эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$) в случае границы раздела ФАОС/InAs(111)А. Исследования данного интерфейса показали, что переходная область имеет кристаллическую структуру и состоит из фторидов и оксифторидов элементов полупроводника. Для понимания микроскопических механизмов появления/устранения интерфейсных состояний в последние десятилетия активно используется моделирование в рамках теории функционала плотности, которое позволяет детально исследовать электронное строение и химическую связь на границах раздела.

В настоящей работе методом проекционных присоединенных волн с использованием обобщенного градиентного приближения для обменно-корреляционного функционала и метода DFT-1/2 изучена адсорбция кислорода и фтора в ряде симметричных позиций на нереконструированной поверхности InAlAs(111)А. Расчеты показали, что, как и на поверхности бинарных полупроводников $A^{III}B^V$ [5], кислород предпочитает адсорбироваться в мостиковой В-позиции между двумя поверхностными анионами (рис. 1а). При этом энергия связи (E_b) в Al-B позиции на 1.81 эВ выше, чем в In-B (таблица 1), тогда как в позиции смешанного моста InAl-B энергия связи принимает промежуточное значение. В случае фтора предпочтительной является вершинная Al-T позиция над атомом алюминия поверхностного слоя. Из таблицы 1 видно, что в наиболее предпочтительной позиции энергия адсорбции кислорода выше, чем фтора на 1.63 эВ.

Таблица 1. Энергии связи кислорода и фтора на поверхности InAlAs(111)А-(2×2).

Позиция	Al-B	In-B	InAl-B	Al-T	In-T
$E_b(O)$, эВ	8.11	6.30	7.45	6.70	5.19
$E_b(F)$, эВ	6.39	4.95	–	6.48	6.04

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Рис. 1. Атомная структура поверхности $\text{InAlAs}(111)\text{A}-(2\times 2)$ и рассмотренные позиции адсорбции, показанные крестиками (а); электронные энергетические спектры чистой поверхности (б) и поверхности с адсорбированным атомом кислорода (в) и фтора (г) в наиболее предпочтительных позициях. Поверхностные состояния, локализованные на атомах фтора, кислорода, индия, алюминия и мышьяка показаны синими, красными, черными, зелеными и желтыми шариками соответственно. Размер шарика указывает на степень локализации электронных состояний.

Электронные энергетические спектры чистой поверхности и поверхности с адсорбированными атомами кислорода и фтора приведены на рис. 1б-г. Видно, что на чистой поверхности (рис. 1б) имеет место пиннинг уровня Ферми состояниями поверхностных атомов индия и подповерхностных атомов мышьяка. Интересно, что состояния алюминия при этом являются незанятыми и находятся в зоне проводимости. Последнее может быть обусловлено тем обстоятельством, что электроотрицательность алюминия на 0.17 меньше, чем индия, что способствует большему переносу заряда от атомов алюминия к мышьяку и опустошение их состояний. Это же объясняет большую предпочтительность электроотрицательных адсорбатов образовывать связь с атомами алюминия, чем с индием. На примере кислорода в Al-B позиции (рис. 1в) хорошо видно, что его адсорбция приводит к опустошению состояний именно мышьяка, хотя атомы алюминия являются ближайшими соседями кислорода. При этом происходит перераспределение электронной плотности от мышьяка к кислороду через алюминий. В случае фтора (рис. 1г) описанное выше перераспределение электронного заряда также имеет место, хотя и в меньшей степени. Поскольку фтор образует связь только с одним поверхностным атомом, это приводит к меньшему искажению электронной структуры поверхности. Отметим, что при концентрации кислорода и фтора, равной 0.25 монослоя, не наблюдается открепление уровня Ферми. Мы демонстрируем, что увеличение концентрации адатомов кислорода приводит к повышению плотности состояний в запрещенной щели вследствие смещения поверхностных состояний из валентной зоны. Увеличение концентрации фтора, напротив, вызывает смещение состояний из запрещенной щели в зону проводимости, что и приводит к откреплению уровня Ферми. В целом полученные результаты способствуют лучшему пониманию энергетики связи электроотрицательных адсорбатов с полупроводниковыми полярными поверхностями.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 18-32-00548 мол_а), а также в рамках проекта III.23.2.8. ИФПМ СО РАН. Численные расчеты выполнены на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете.

1. Takahashi T., Kawano Y., Makiyama K. et al. Enhancement of f_{max} to 910 GHz by adopting asymmetric gate recess and double-side-doped structure in 75-nm-gate $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}$ HEMTs // IEEE Transactions on Electron Devices. 2017. V. 64. № 1. P. 89–95.
2. Chizh A., Malyshev S., Mikitchuk K. High-speed high-power $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InP}$ schottky photodiode // 2015 International Topical Meeting on Microwave Photonics (MWP). 2015. P. 223–226.
3. Hinkle C.L., Vogel E.M., Ye P.D. et al. Interfacial chemistry of oxides on $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ and implications for MOSFET applications // Current Opinion in Solid State & Materials Science. 2011. V. 15. P. 188–207.
4. Robertson J., Guo Y., Lin L. Defect state passivation at III-V oxide interfaces for complementary metal-oxide-semiconductor devices // Journal of Applied Physics. 2015. V. 117. P. 112806–1–10.
5. Bakulin A.V., Kulkova S.E., Aksenov M.S. et al. Fluorine and oxygen adsorption and their coadsorption on the (111) surface of InAs and GaAs // The Journal of Physical Chemistry C. 2016. V. 120. P. 17491–17500.