

## 3. Siliziumoberfläche

### 3.1 Passivierung

Durch den Abbruch der Periodizität des Kristallgitters an der Oberfläche entstehen erlaubte Zustände innerhalb der Bandlücke (intrinsische Zustände). Des weiteren lagern sich stets Fremdatome an, die ebenfalls Zustände induzieren können (extrinsische Zustände). Um die unerwünschte Rekombination freier Ladungsträger an der Oberfläche zu verringern, muß diese passiviert werden. Dies kann auf zwei Arten geschehen, entweder durch eine Reduzierung der Grenzflächenzustandsdichte oder eine Feldeffektpassivierung, d.h. durch fest eingebaute Ladungen entsteht ein Feld, welches die beiden Ladungsträgerarten trennt, so daß ein Partner für die Rekombination fehlt.

Zur Herstellung von Halbleiterbauelementen ist eine hohe Reinheit des Ausgangsmaterials erforderlich. Nach dem Sägen der Siliziumscheiben aus dem einkristallinen Stab weisen die Scheiben eine raue Oberfläche auf. Durch Läppen, Ätzen und Polieren kann die Rauigkeit auf weniger als 3 nm reduziert werden [Hilleringmann 96]. Nun sind die Oberflächen der Wafer durch chemische Reinigungsschritte von Verunreinigungen, die verschiedener Natur sein können, zu befreien. Das gängigste Verfahren zur Oberflächenreinigung, es wird als „RCA Clean“ bezeichnet, wurde von Kern und Puotinen Anfang der sechziger Jahre bei der Firma RCA entwickelt und im Jahr 1970 erstmals veröffentlicht [Kern 70, Kern 90]. Um nach einer solchen Vorbehandlung den Wafer zu passivieren, bieten sich die thermische Oxidation oder die Abscheidung von Siliziumnitrid an.

Bei der thermischen Oxidation strömt Sauerstoff als oxidierendes Gas über die heiße Waferoberfläche und reagiert dort mit dem Siliziumkristall zu Siliziumdioxid  $\text{SiO}_2$ . Es entsteht eine amorphe Schicht an der Oberfläche der Siliziumscheibe. Die Prozeßtemperatur beträgt etwa 1000 °C. Das Oxidwachstum ist durch die Sauerstoffdiffusion durch das bereits vorhandene Oxid zum Reaktionspartner Silizium des Substrats begrenzt. Da die Sauerstoffmenge an der Grenzfläche Siliziumdioxid/Silizium von der Oxiddicke abhängt, verringert sich die Wachstumsgeschwindigkeit mit zunehmender Zeit.

Das Siliziumnitrid  $\text{Si}_3\text{N}_4$  ist wie das Siliziumdioxid ein Isolator und eignet sich ebenfalls zur Passivierung von Silizium. Beim Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) -Verfahren reagieren die Gase Silan  $\text{SiH}_4$  und Methan  $\text{NH}_3$  bei einer Temperatur von etwa 350 °C und bilden die Siliziumnitridschicht [Aberle 95].

Oxid- und Nitridschichten erfüllen das Ziel der Passivierung sowohl durch Reduzierung der Zustandsdichte an der Grenzfläche zum Silizium als auch durch einen Feldeffekt, welcher durch Ladungen am Übergang bedingt ist.

Der Vorteil der Nitridpassivierung ist die im Vergleich zur thermischen Oxidation geringere Herstellungstemperatur, da bei der thermischen Oxidation Fremdatome in das Volumen diffundieren und die Volumenlebensdauer verringern können [Shimura 89]; des weiteren eignet sich das Nitrid besser als Antireflexionsschicht für Solarzellen und führt zu einer besseren Passivierung [Lauinger 96]. Der Nachteil, im Hinblick auf Feldeffekttransistoren, ist die im allgemeinen größere Zahl positiver Ladungen, welche die Wirkung der Gatespannung reduzieren.

### 3.2 Modell der Grenzfläche

An den Grenzflächen Siliziumdioxid/Silizium und Siliziumnitrid/Silizium weisen die Zustandsdichten in der Energielücke eine typische U-Verteilung auf (Bild 4.2), bestehend aus exponentiell abfallenden Bandausläufern und energetisch im mittleren Bereich der Bandlücke liegenden tiefen Zuständen. Solche Zustandsdichten werden mit Kapazitäts-Spannungs (CV) -Messungen bestimmt [Nicollean 82]. Nach einer thermischen Oxidation findet gewöhnlich bei etwa 450 °C eine Temperung in Formiergas, einem Wasserstoff-Stickstoff-Gemisch, statt, um durch das Absättigen freier Bindungen die Zustandsdichte weiter zu reduzieren.

Den Zuständen wird in der unteren bzw. oberen Hälfte der Energielücke ein donatorischer bzw. ein akzeptorischer Charakter zugeordnet [Füssel 96, Elmiger 97b]. Ein donatorischer Zustand ist positiv geladen, wenn er unbesetzt ist, und neutral, wenn er mit einem Elektron besetzt ist. Ein akzeptorischer Zustand ist neutral, wenn er unbesetzt ist, und negativ geladen, wenn er mit einem Elektron besetzt ist. Die exponentiell abfallenden Bandausläufer resultieren aus verspannten Si-Si-Bindungen, die anderen Zustände aus nicht abgesättigten Bindungen.

Die thermische Oxidation führt zu einer festen Ladung, die sich in einer etwa 2-3 nm dicken Schicht am metallurgischen Übergang befindet; weitere Ladungen, z.B. ionische, können in der restlichen Oxidschicht vorhanden sein [Balk 88]. Die Nitridladungen sind hauptsächlich in den ersten 12 nm konzentriert; daraus resultiert eine Passivierung, die von der Dicke des Nitrids abhängig ist [Elmiger 97a]. Die Ladungen an den Grenzflächen werden später im Simulationsprogramm als Summe der festen Ladungen im Oxid bzw. Nitrid

und der Ladungen der unbesetzten donatorischen und der besetzten akzeptorischen Zustände beschrieben. Dabei ist die feste Ladung als eine effektive Ladung an der infinitesimal dünnen Grenzfläche zu betrachten, die im kristallinen Silizium das gleiche elektrische Feld erzeugt wie die echte, räumlich verteilte Oxid- bzw. Nitridladung.

Diese Gesamtladung ist im allgemeinen positiv; sie führt bei n-dotiertem Silizium zu einer Akkumulationsrandschicht und bei p-dotiertem Silizium, je nach Größe der Ladung, zu einer Verarmungs- oder einer Inversionsrandschicht [Paul 76].

Aus der positiven Gesamtladung an der Grenzfläche resultiert ein Bandverlauf, wie in dem Bild 3.1 skizziert. Wenn Überschußladungsträger erzeugt werden, findet im Feld der Raumladungszone eine Trennung der Ladungsträger statt, und die Elektronen werden, im Gegensatz zu den Löchern, zur Oberfläche gezogen. Dies ist für n-dotiertes Silizium von Vorteil, da die Rekombination an der Oberfläche durch die geringe Zahl der Löcher begrenzt wird. Für p-dotiertes Silizium in Verarmung geschieht die Ladungsträgertrennung genauso, aber den überschüssigen Elektronen an der Oberfläche stehen mehr Löcher zur Rekombination zur Verfügung. Dies ist der Grund, warum sich n-Silizium im allgemeinen besser passivieren läßt als p-Silizium.

### 3.3 Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit

Der Begriff der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit wird im folgenden ausführlich erläutert. Dies geschieht im Hinblick auf Silizium, das mit einer Oxid- oder einer Nitridschicht passiviert ist; grundsätzlich sind die angestellten Betrachtungen aber auch auf andere Grenzflächen übertragbar. In den Ausführungen findet anfänglich eine Beschränkung auf eine Ladungsträgerspezies, die Elektronen, statt; für Löcher ergeben sich stets analoge Relationen.

In diesem Unterkapitel wird für eine beliebige physikalische Größe  $u$  die Abkürzung

$$u(x, t)|_{x=b} = u(b, t) \quad (3-1)$$

verwendet, wobei  $x$  bzw.  $t$  einen Ort bzw. einen Zeitpunkt bezeichnen.  $R_n^S(t)$  ist stets die zeitabhängige Oberflächenrekombinationsrate der Elektronen am Ort  $x = 0$ . In einem zeitabhängigen Fall ist diese Rate für Elektronen und Löcher gleich; dann entfällt der Index  $n$ .

Der Begriff der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $s$  wurde von Shockley eingeführt [Shockley 50]. Er benötigte zum Lösen der Kontinuitätsgleichungen für die Minoritäten (z.B. Elektronen) geeignete Randbedingungen. Die eindimensionale Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x, t) = \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial x} j_n(x, t) + G(x, t) - R_n(x, t) \quad (3-2)$$

Dabei sind

$G$	optische Generationsrate (sie beinhaltet nur Band-Band-Übergänge)
$R_n$	effektive (Volumen-) Rekombinationsrate der Elektronen
$j_n$	Elektronenstrom

Die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $s$  ist definiert als

$$s = \frac{R^S}{\Delta n(0)} = \frac{R^S(\Delta n)}{\Delta n} \Big|_{\Delta n = \Delta n(0)} \quad (3-3)$$

mit der stationären Oberflächenrekombinationsrate  $R^S$  und der Überschusskonzentration  $\Delta n$  der Elektronen am Ort  $x=0$ , die ebenso groß ist wie die der Löcher. In dieser ursprünglichen Definition ist  $s$  ein fester Wert, der nicht von  $\Delta n(0)$  abhängt. Mathematisch bedeutet dies, daß  $R^S$  proportional zu einer Störung  $\Delta n$  ist; anschaulich gesehen strömen die Überschussladungsträger mit der Geschwindigkeit  $s$  zur Oberfläche; dabei kann die thermische Geschwindigkeit nicht überschritten werden. Wenn nun für den Elektronenstrom, der zur Oberfläche fließt, gefordert wird, daß seine Ladungsträger dort rekombinieren, so ergibt sich die Randbedingung

$$j_n(0, t) = q \cdot s \cdot \Delta n(0, t) \quad (3-4)$$

Ein Halbleiter ist in der Realität gewöhnlich nicht feldfrei; die Oberfläche weist eine Bandverbiegung  $\Psi_S$  auf (Bild 3.1), welche durch eine geladene Grenzfläche bei  $x=0$  und Ladungen in der Raumladungszone bedingt ist.  $\Psi_S$  ändert sich bei Belichtung, was Brattain und Bardeen erstmals an Germaniumoberflächen experimentell zeigen konnten [Brattain 53]. Die Differenz zwischen den Werten von  $\Psi_S$  in Dunkelheit und bei Belichtung wird als Photospannung bezeichnet.

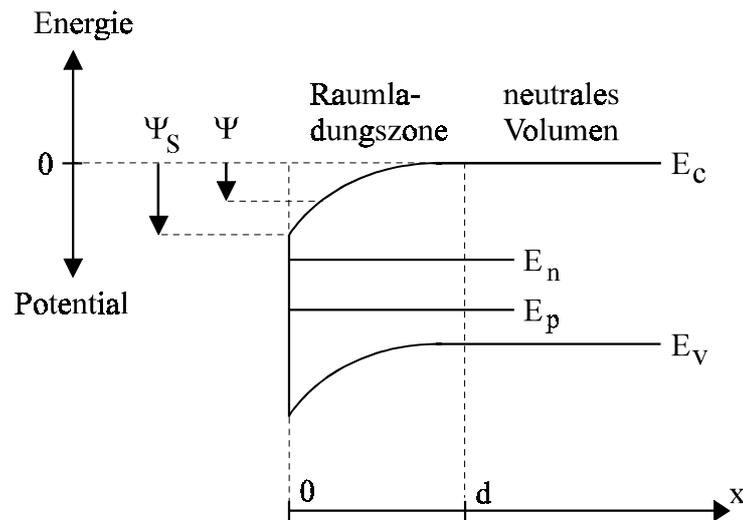


Bild 3.1: Bandverlauf an der Oberfläche eines Halbleiters

Mit der Oberfläche wird entweder die Grenzfläche bei  $x = 0$  oder der gesamte Bereich  $x \in [0, d]$  bezeichnet. Der doppeldeutige Begriff der Oberfläche wird in dieser Arbeit stets gewählt, wenn sich aus dem Kontext heraus ergibt, welche Bedeutung gemeint ist. Um im weiteren Verlauf dieses Unterkapitels eine präzise Ausdrucksweise zu gewährleisten, wird die Fläche bei  $x = 0$  als echte Oberfläche, der Bereich  $x \in ]0, d]$  als Raumladungszone und der Bereich  $x \in [0, d]$  als virtuelle Oberfläche definiert. Der Rand der Raumladungszone befindet sich bei  $x = d$ . Mit diesen Definitionen ergibt sich

$$\text{virtuelle Oberfläche} = \text{echte Oberfläche} \cup \text{Raumladungszone} \quad (3-5)$$

Ist keine Raumladungszone vorhanden, so stellt sich das Problem der Unterscheidung zweier Oberflächen nicht. An die virtuelle Oberfläche, die insgesamt neutral ist, obwohl die echte Oberfläche und die Raumladungszone geladen sind, schließt sich das neutrale und feldfreie Volumen an, in dem die Überschusskonzentrationen von Elektronen und Löchern gleich groß sind. Eine Bandverbiegung ist nur innerhalb der virtuellen Oberfläche vorhanden. An der echten Oberfläche und dem Rand der Raumladungszone gilt

$$\Psi(0) = \Psi_S \quad (3-6)$$

$$\Psi(d) = 0 \quad (3-7)$$

$$n(d) = n_0 + \Delta n(d) \quad (3-8)$$

$$p(d) = p_0 + \Delta n(d) \quad (3-9)$$

mit den Dunkelladungsträgerkonzentrationen des neutralen Volumens  $n_0$  und  $p_0$ .

Für die Elektronen kann in einem Bereich  $x \in ]0, \xi]$  eine Kontinuitätsgleichung formuliert werden

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{0+}^{\xi} dx \cdot n(x, t) = \frac{1}{q} \cdot j_n(\xi, t) + \int_{0+}^{\xi} dx \cdot [G(x, t) - R_n(x, t)] - R_n^S(t) \quad (3-10)$$

wobei  $R_n^S$  die zeitabhängige Rekombinationsrate der Elektronen an der echten Oberfläche bezeichnet.

Eine vereinfachende Annahme ist die Vernachlässigung der Generation und der Rekombination in der Raumladungszone gegenüber der Rekombination an der echten Oberfläche. Die Vernachlässigung der Generation läßt sich experimentell begründen, indem mit Licht geeigneter Wellenlänge gearbeitet wird, so daß in der Raumladungszone nur eine geringe Lichtabsorption stattfindet, die Vernachlässigung der Rekombination, indem davon ausgegangen wird, daß das Silizium hinreichend defektarm ist. Im zeitabhängigen Fall folgt aus der Gleichung (3-10) für  $\xi = d$

$$j_n(d, t) = q \cdot R_n^S(t) + q \cdot \frac{\partial}{\partial t} \int_{0+}^d dx \cdot n(x, t) \quad (3-11)$$

Gemäß (3-11) wird ein Elektronenstrom, der in die virtuelle Oberfläche fließt, dort in zwei Anteile zerlegt: einen Rekombinationsstrom und einen Ladestrom, der dadurch bedingt ist, daß sich die Anzahl der freien Ladungsträger in der Raumladungszone ändert.

Im stationären Zustand entfällt der Ladestrom, und es wird eine effektive Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $s^*$  definiert:

$$s^* = \frac{R^S}{\Delta n(d)} = \frac{R^S(\Delta n)}{\Delta n} \Big|_{\Delta n = \Delta n(d)} \quad (3-12)$$

$R^S$  ist die Rekombinationsrate an der echten Oberfläche, die von der Überschußkonzentration der Ladungsträger am Rand der Raumladungszone abhängt.

Wenn  $s^*$  von  $\Delta n(d)$  abhängt, so wird dies als Injektionsabhängigkeit bezeichnet. Da die Überschußkonzentrationen am Rand der Raumladungszone gleich groß sind, muß nicht zwischen einem  $s^*$  für Elektronen und Löcher unterschieden werden.

Die Randbedingung für die Kontinuitätsgleichung wird am Rand der Raumladungszone gewählt. Sie lautet im stationären Fall

$$j_n(d) = q \cdot s^* \cdot \Delta n(d) \quad (3-13)$$

Im stationären Fall ist bei Vernachlässigung von Generation und Rekombination der Elektronenstrom nach (3-2) konstant, und Elektronen, die bei  $x = d$  in die Raumladungszone hereinfließen, rekombinieren an der echten Oberfläche. Dies ist die anschauliche Bedeutung von (3-13).

Es gab eine Vielzahl von Veröffentlichungen in den letzten Jahren, die sich mit der experimentellen Bestimmung von  $s^*$  an Silizium befaßten [Gaubas 96, Mostarshed 96, Ogita 96, Schönecker 96, Gaubas 97, Ostendorf 97, Yan 97]. Untersuchungen zum Thema der Injektionsabhängigkeit von  $s^*$  an den Grenzflächen Siliziumdioxid/Silizium bzw. Siliziumnitrid/Silizium zeigten, daß sich, je nach Dotierung des Siliziums, eine unterschiedliche Injektionsabhängigkeit von  $s^*$  ergibt [Glunz 94, Aberle 95].

Mit  $s^*$  läßt sich die Rekombination makroskopisch beschreiben. Eine mikroskopische Trennung der Prozesse, die an der echten Oberfläche und in der Raumladungszone stattfinden, ist mit ihr nicht möglich. Aussagen über die Photospannung sind auch nicht möglich, da sich die Änderung der Bandverbiegung in der virtuellen Oberfläche vollzieht.

Eine Definition, die unter bestimmten Annahmen die Injektionsabhängigkeit von  $s^*$  (welches jetzt nicht mehr die Einheit einer Geschwindigkeit hat) verringert, wurde von Rees gegeben [Rees 85]

$$R^S = s^* \cdot \sqrt{\Delta n(d)} \quad (3-14)$$

und von De Visschere ausführlich kommentiert [De Visschere 86]. Sie hat sich in der Literatur jedoch nicht durchgesetzt.

Wenn auf einen Halbleiter Licht zeitlich konstanter Intensität fällt, und dieser Grundbeleuchtung eine kleine Störung überlagert wird, z.B. in Form einer Intensitätsmodulation (FRMC-Methode), so gilt am Rand der Raumladungszone

$$\Delta n(d, t) = \Delta n_{dc} + \Delta n_{ac}(t) \quad (3-15)$$

$$j_n(d, t) = j_n^{dc} + j_n^{ac}(t) \quad (3-16)$$

mit einem stationären und einem zeitabhängigen Anteil. Es wird eine virtuelle Oberflächenrekombinationsrate  $U^S$  definiert

$$U^S(t) = U^S(\Delta n) \Big|_{\Delta n = \Delta n(d, t)} = R_n^S(t) + \frac{\partial}{\partial t} \int_{0+}^d dx \cdot n(x, t) \quad (3-17)$$

die für Elektronen und Löcher auch im zeitabhängigen Fall gleich ist. Die Rekombinations- und die Ladeströme können unterschiedlich sein; ihre Summe ist jedoch für Elektronen und Löcher gleich groß, da die virtuelle Oberfläche insgesamt neutral bleiben muß. Im stationären Fall sind  $R^S$  und  $U^S$  gleich.

Für den ac-Anteil des Elektronenstroms gilt [Aberle 96]:

$$\begin{aligned}
 j_n^{\text{ac}}(t) &= q \cdot \left[ U^S(\Delta n_{\text{dc}} + \Delta n_{\text{ac}}(t)) - U^S(\Delta n_{\text{dc}}) \right] \\
 &= q \cdot \left. \frac{\partial U^S(\Delta n)}{\partial \Delta n} \right|_{\Delta n = \Delta n_{\text{dc}}} \cdot \Delta n_{\text{ac}}(t) \\
 &= q \cdot \left. \frac{\partial R^S(\Delta n)}{\partial \Delta n} \right|_{\Delta n = \Delta n_{\text{dc}}} \cdot \Delta n_{\text{ac}}(t)
 \end{aligned} \tag{3-18}$$

Nun wird die differentielle Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $\tilde{s}$  [Otaredian 93b, Brendel 95a] definiert als

$$\tilde{s} = \left. \frac{\partial R^S(\Delta n)}{\partial \Delta n} \right|_{\Delta n = \Delta n_{\text{dc}}} \tag{3-19}$$

und die Randbedingung für den ac-Anteil am Rand der Raumladungszone lautet

$$j_n^{\text{ac}}(d, t) = q \cdot \tilde{s} \cdot \Delta n_{\text{ac}}(d, t) \tag{3-20}$$

Quasistationäre Experimente, die mit einer Grundbeleuchtung durchgeführt werden, liefern eine differentielle Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $\tilde{s}$ . Um dann  $s^*$  ermitteln zu können, muß  $\tilde{s}$  bis zu so kleinen Intensitäten bekannt sein, unterhalb derer  $\tilde{s} = \tilde{s}_{\text{min}} = \tilde{s}(\Delta n_{\text{min}})$  konstant ist [Brendel 95b].

$$s^*(\Delta n(d)) = \frac{1}{\Delta n(d)} \cdot \left[ \Delta n_{\text{min}} \cdot \tilde{s}_{\text{min}} + \int_{\Delta n_{\text{min}}}^{\Delta n(d)} d\Delta n_{\text{dc}} \cdot \tilde{s}(\Delta n_{\text{dc}}) \right] \tag{3-21}$$

Mit dem Konzept der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten  $s^*$  und  $\tilde{s}$  ist es nicht möglich, den Anteil der Überschußladungsträger in der Raumladungszone zu bestimmen. Bei Mikrowellenreflexionsmessungen werden die Überschußladungsträger im gesamten Silizium detektiert. Um das Konzept der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten trotzdem anwenden zu können, wird argumentiert, daß die Raumladungszone mit einer Ausdehnung von etwa  $1\mu\text{m}$  klein ist gegenüber Waferdicken von etwa  $400\mu\text{m}$ . Dann

kann der Anteil aus der Raumladungszone am reflektierten Mikrowellensignal vernachlässigt werden. Eine solche Argumentation ist, wie in dieser Arbeit gezeigt wird, unter Umständen falsch.

Wie kann  $s^*$  berechnet werden? Hierzu muß  $R^S$  nach (3-12) als Funktion von  $\Delta n(d)$  ermittelt werden. In einem ersten Schritt wird  $R^S$  als Funktion von  $n(0)$  und  $p(0)$  formuliert. Ein naheliegendes Modell für den ersten Schritt ist die Annahme einer Verteilung von Zuständen in der Energielücke der echten Oberfläche. Hierzu bietet sich die SRH-Statistik von Shockley, Read und Hall an (sie wird im vierten Kapitel erläutert). In einem zweiten Schritt sind  $n(0)$  und  $p(0)$  als Funktion von  $\Delta n(d)$  zu beschreiben.

Basierend auf einer Arbeit von Girisch, Mertens und De Keersmaecker [Girisch 88] konnten Aberle, Glunz und Warta  $s^*$  für die  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ -Grenzfläche einer Metall-Oxid-Halbleiterstruktur berechnen [Aberle 92]. Im ersten Schritt wird eine Verteilung von Zuständen, die gemäß der SRH-Statistik besetzt sind, angenommen. Im zweiten Schritt wurde die Annahme gemacht, daß die Quasi-Ferminiveaus in der Raumladungszone flach sind.

Was bedeutet die zweite Annahme? In einem stationären Zustand ist die Zahl der freien Ladungsträger um die Überschußladungsträger  $\Delta n$  und  $\Delta p$  erhöht. Die Besetzung der delokalisierten Zustände im Leitungs- und Valenzband wird dann durch die Quasi-Ferminiveaus beschrieben. Darf die Fermi-Statistik durch eine Boltzmann-Näherung ersetzt werden, was im Silizium mit einem Fehler von weniger als ein Prozent verbunden ist, wenn die Konzentration der freien Ladungsträger nicht größer als  $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  ist, so ergibt sich

$$n(x) = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C(x) - E_n(x)}{kT}\right) \quad (3-22)$$

$$p(x) = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E_p(x) - E_V(x)}{kT}\right) \quad (3-23)$$

Dabei sind	$E_C, E_V$	Leitungs-, Valenzbandkante
	$N_C, N_V$	effektive Zustandsdichte im Leitungs-, Valenzband
	$kT$	Boltzmann-Faktor
	$E_n, E_p$	Quasi-Ferminiveau der Elektronen, der Löcher

(Die Verläufe von  $E_C, E_V, E_n$  und  $E_p$  sind in Bild 3.1 dargestellt.)

Die Partialströme sind proportional zu den Gradienten der Quasi-Ferminiveaus [Sze 81]

$$j_n(x) = \mu_n \cdot n(x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} E_n(x) \quad (3-24)$$

$$j_p(x) = \mu_p \cdot p(x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} E_p(x) \quad (3-25)$$

Die Ladungsträgerkonzentrationen in der Raumladungszone ergeben sich aus den Gleichungen (3-22) und (3-23) zu

$$n(x) = n(0) \cdot \exp\left(-\frac{q}{kT} \cdot [\Psi_S - \Psi(x)]\right) \cdot \exp\left(\frac{E_n(x) - E_n(0)}{kT}\right) \quad (3-26)$$

$$p(x) = p(0) \cdot \exp\left(+\frac{q}{kT} \cdot [\Psi_S - \Psi(x)]\right) \cdot \exp\left(\frac{E_p(0) - E_p(x)}{kT}\right) \quad (3-27)$$

Die Annahme eines „Quasi-Gleichgewichts in der Raumladungszone“ geht auf Garrett und Brattain zurück [Garrett 55] und führt zu einer Vereinfachung der mathematischen Beschreibung der Ladungsträgerverteilung, da die zweiten Exponentialterme in den Gleichungen (3-26) und (3-27) vernachlässigt werden. In diesem Zusammenhang entstand die Formulierung „flache Quasi-Ferminiveaus in der Raumladungszone“. Diese Annahme kann nie exakt sein, wenn eine Rekombination an der echten Oberfläche stattfindet, da sonst, gemäß (3-24) und (3-25), keine Partialströme fließen können, um Ladungsträger zu liefern. Die Ladungsträgerkonzentrationen am Rand der Raumladungszone und an der echten Oberfläche sind nun wie folgt korreliert:

$$n(0) = n(d) \cdot \exp\left(+\frac{q \cdot \Psi_S}{kT}\right) = (n_0 + \Delta n(d)) \cdot \exp\left(+\frac{q \cdot \Psi_S}{kT}\right) \quad (3-28)$$

$$p(0) = p(d) \cdot \exp\left(-\frac{q \cdot \Psi_S}{kT}\right) = (p_0 + \Delta n(d)) \cdot \exp\left(-\frac{q \cdot \Psi_S}{kT}\right) \quad (3-29)$$

Der Frage, wie gut die Annahme der flachen Quasi-Ferminiveaus ist, ging Frankl nach [Frankl 65]. Abschätzungen konnten leider nur unter vereinfachenden Annahmen, die hauptsächlich den Potentialverlauf  $\Psi(x)$  betreffen, gewonnen werden.

Mit den Gleichungen (3-28) und (3-29) liegen  $n(0)$  und  $p(0)$  als Funktion von  $\Delta n(d)$  vor, wenn der Zusammenhang zwischen  $\Psi_S$  und  $\Delta n(d)$  bekannt ist; diesen erhält man, indem die Ladungen der gesamten Metall-Oxid-Halbleiterstruktur bilanziert werden.

Für eine kontaktlose Situation (wie bei den Mikrowellenreflexionsmessungen) formulierte Otaredian ein System von Gleichungen, um den Verlauf des Potentials und der Ladungsträgerkonzentrationen zu ermitteln [Otaredian 93b]. Mit der Annahme eines parabolischen

Verlaufs des Potentials kann  $s^*$  bestimmt werden. Bei niedriger und hoher Injektion ist die Näherung flacher Quasi-Ferminiveaus zulässig, und der parabolische Verlauf des Potentials muß nicht gefordert werden; für den mittleren Injektionsbereich ist diese Vereinfachung nicht möglich.

Die beiden skizzierten Wege zur Berechnung von  $s^*$  sind mit jeweils einer fragwürdigen Annahme verbunden. Entweder müssen die Quasi-Ferminiveaus flach sein, oder das Potential muß einen parabolischen Verlauf haben, um den gesamten Bereich der Injektionsabhängigkeit von  $s^*$  erfassen zu können.

Mit dem Simulationsprogramm, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, lassen sich die eben genannten Annahmen zur Berechnung von  $s^*$  als Funktion von  $\Delta n(d)$  umgehen. Die Randbedingungen für die zu lösenden Gleichungen werden an der echten Oberfläche des Siliziums gewählt, so daß Aussagen über die Photospannung, die Ladungsträgerverteilung und die Rekombinationsprozesse in der virtuellen Oberfläche möglich sind.

