УДК 621.315.592

АНАЛИЗ МОДЕЛИ РЕАЛЬНОГО КОНТАКТА С БАРЬЕРОМ ШОТТКИ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР И СМЕЩЕНИЙ

В. Г. Божков[1], *С. Е. Зайцев*[2]

Численно исследована модель реального контакта металл—полупроводник с барьером Шоттки с промежуточным слоем на границе металл—полупроводник и поверхностными состояниями (модель Бардина). Исследование опирается на развитое ранее представление о том, что аномалии характеристик такого контакта являются следствием нелинейной зависимости высоты барьера от смещения. Показано, что на этой основе естественным образом объясняется так называемая низкотемпературная аномалия в реальных контактах металл—полупроводник с барьером Шоттки (рост показателя идеальности вольт-амперной характеристики и уменьшение измеряемой высоты барьера с понижением температуры), а также связь между различными высотами барьера, характеризующими контакт: истинной, измеряемой по току насыщения, высотой барьера при плоских зонах и высотой барьера, определяемой из вольт-фарадных характеристик.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что вольт-амперные характеристики (ВАХ) реальных контактов металл—полупроводник (КМП) с барьером Шоттки, как правило, значительно отличаются от идеальных [1, 2]. Существенное отклонение в поведении ВАХ, получившее название низкотемпературной аномалии, было обнаружено в одной из наиболее ранних работ [3] и в дальнейшем подтвердилось в целом ряде работ для самых различных металлов и полупроводников (см. ссылки в работе [4]). Суть её заключается в том, что с понижением температуры в контакте металл—полупроводник с барьером Шоттки наблюдается рост показателя идеальности ВАХ n и падение измеряемой (по току насыщения) высоты барьера φ_{bm}. Температурная зависимость показателя идеальности в целом близка к виду $n = 1 + T_0/T$ (T_0-эффект), где T_0 — постоянная или слабо меняющаяся с температурой величина. Величина φ_{bn}, равная произведению показателя идеальности на измеряемую высоту барьера ($\varphi_{bn} \equiv n\varphi_{bm}$), слабо меняется с температурой и близка к реальной высоте барьера в контакте металл—полупроводник, определённой другими методами, например из вольт-фарадных ($C(V)$) характеристик.

Существует значительное количество работ, посвящённых объяснению эффектов, обнаруженных в контакте металл—полупроводник с барьером Шоттки (см. ссылки в работе [4]), но наиболее общее объяснение природы низкотемпературной аномалии в реальных диодах с барьером Шоттки и связанных с ней вопросов об истинной и измеряемой высоте барьера и высоте барьера при плоских зонах впервые дано в работах [4, 5]. Оно основывается на представлении о нелинейной зависимости высоты барьера Шоттки от смещения, приводящей к росту со смещением показателя идеальности ВАХ, и учёте практически соблюдаемого (в эксперименте) условия постоянства тока при определении высоты барьера и показателя идеальности ВАХ в диапазоне температур.

В связи с вышесказанным цель настоящей работы — показать с помощью численного анализа модели реального контакта (модели Бардина [2]), опирающегося на конкретные параметры промежуточного слоя и поверхностных электронных состояний, что такое объяснение свойств реальных КМП с барьером Шоттки действительно возможно при определённых предположениях и вполне реальных значениях указанных параметров. Одновременно указаны проблемные вопросы этой модели. Приведённое объяснение не требует привлечения представления о неоднородности контакта [6], хотя и не исключает важной роли неоднородности при определённых условиях.

Необходимо отметить следующее важное обстоятельство. Модель Бардина является, по существу, единственной общепринятой моделью реального КМП с барьером Шоттки. Несмотря на относительное обилие «новых» моделей (см., например, [1, 7–9]), все они опираются на основные положения модели Бардина: 1) высокая плотность поверхностных электронных состояний на поверхности полупроводника, приводящая к закреплению уровня Ферми, 2) наличие уровня зарядовой нейтральности поверхности и 3) наличие промежуточного (дипольного) слоя на контакте. Особенности «новых» моделей связаны только с выяснением природы поверхностных состояний, новых механизмов закрепления уровня Ферми и путей влияния на его положение фундаментальных свойств полупроводника и металла, их поверхностей и процессов, протекающих в контакте.

1. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Прямая ВАХ реальных КМП с барьером Шоттки в общем случае может быть представлена в виде

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_b(V)}{kT}\right) \exp\left(\frac{qV}{kT}\right). \tag{1}$$

Здесь A — площадь контакта, R^* — эффективная константа Ричардсона, k — постоянная Больцмана, q — заряд электрона, T — температура, $\varphi_b(V)$ — зависящая от смещения высота барьера (при определённых условиях — эффективная), которую в дальнейшем будем называть реальной или истинной высотой барьера (а вольт-амперную характеристику в форме (1) — реальной ВАХ). Принципиальным является предположение о том, что $\varphi_b(V)$ нелинейно растёт с ростом смещения [4]. В этом случае показатель идеальности ВАХ, определяемый соотношением [1]

$$n(V) = \left[1 - \frac{d\varphi_b(V)}{dV}\right]^{-1}, \tag{2}$$

становится функцией смещения и увеличивается с ростом смещения.

Как известно, параметры экспериментальной (реальной) ВАХ n и φ_{bm} (измеряемую высоту барьера) определяют с помощью касательной в некоторой точке $(\tilde{V}, \tilde{I})$: φ_{bm} находят по точке пересечения касательной с осью ординат (по току насыщения I_s), n — по её наклону:

$$\varphi_{bm}(\tilde{V}, \tilde{I}) = \frac{kT}{q} \ln\left[\frac{AR^*T^2}{I_s(\tilde{V}, \tilde{I})}\right], \qquad n(\tilde{V}, \tilde{I}) = \left(\frac{q}{kT}\, \frac{dV}{d\ln I}\right)_{V=\tilde{V},\, I=\tilde{I}} \tag{3}$$

Выражение для касательной к ВАХ может быть представлено в виде

$$I = AR^*T^2 \exp\left[-\frac{q\varphi_{bm}(\tilde{V})}{kT}\right] \exp\left[\frac{qV}{n(\tilde{V})kT}\right]. \tag{4}$$

Её параметры $\varphi_{bm}(\tilde{V})$ и $n(\tilde{V})$ являются измеряемыми параметрами реальной ВАХ. Выбор точки касания в случае, если $n = n(V)$, может быть принципиальным с точки зрения сравнения с теорией. Поэтому, как указано в [4], значения n и φ_{bm} следует определять при заранее оговоренных условиях, а именно при одном и том же токе во всём диапазоне исследуемых температур, что на практике выполняется, как правило, автоматически.

Сравнение характеристик (1) и (4) в точке касания $(\tilde{V}, \tilde{I})$ позволяет установить связь между истинной высотой барьера $\varphi_b(V)$ (или $\varphi_b(I)$), соответствующей заданному смещению (току), и измеряемыми при этом смещении значениями n и φ_{bm} [4]. При произвольном выборе точки касания получим

$$\varphi_b(V) = \varphi_{bm}(V) + \frac{n(V) - 1}{n(V)}\, V, \tag{5}$$

или, преобразуя это уравнение с помощью (1),

$$\varphi_b(I) \equiv \varphi_{bI} = n(I)\varphi_{bm}(I) - [n(I) - 1]\frac{kT}{q}\ln\left(\frac{AR^*T^2}{I}\right). \qquad (6)$$

Представление реальной высоты барьера как явной функции тока в (6) позволяет просто учесть условие постоянства тока (о котором говорилось выше) при измерениях и при расчётах φ_{bm} в диапазоне температур. Величина φ_{bI} введена, чтобы подчеркнуть там, где это необходимо, что речь идёт об истинной высоте барьера при заданном токе.

Выражение (6) является ключевым для анализа низкотемпературной аномалии. При известной для каждой модели КМП зависимости $\varphi_b(V)$ (см. ниже), а следовательно, и $n(V)$ (см. (2)), оно позволяет рассчитать величины $\varphi_{bn} \equiv n\varphi_{bm}$ и φ_{bm}, исследовать их зависимости от температуры при заданном токе и сравнить измеряемую высоту барьера φ_{bm} и величину φ_{bn} с реальной (истинной) высотой барьера φ_{bI} в диапазоне температур. Уравнение (5) даёт подобные возможности для сравнения значений $\varphi_b(V)$, φ_{bn} и φ_{bm} в диапазоне смещений при заданной температуре. Наконец, уравнение (6) позволяет представить выражение для показателя идеальности ВАХ в виде

$$n = 1 + \frac{1}{T}\left[\frac{q(\varphi_{bn} - \varphi_{bI})}{k\ln(AR^*T^2/I)}\right] = 1 + \frac{T_0}{T}, \qquad (7)$$

позволяющем непосредственно оценить его соответствие T_0-эффекту.

Известно, что в целом ряде работ в качестве важной характеристики контакта металл—полупроводник с барьером Шоттки принята высота барьера при плоских зонах φ_{bf}, поскольку она не зависит от смещения [1]. По определению $\varphi_{bf} = V_{bf} - \varphi_s$, где V_{bf} — постоянное смещение, соответствующее условию плоских зон, $\varphi_s = (kT/q)\ln(N_C/N_D)$ — потенциал уровня Ферми, отсчитанный от дна зоны проводимости, N_C — эффективная плотность состояний в зоне проводимости, N_D — концентрация донорной примеси в полупроводнике. Согласно [10] высота барьера при плоских зонах, полученная при условии n = const, т. е. для линейной зависимости $\varphi_b(V)$, выражается в виде

$$\varphi_{bf} = n\varphi_{b0} - (n - 1)\varphi_s. \qquad (8)$$

Здесь $\varphi_{b0} \equiv \varphi_b(0)$ — высота барьера при нулевом смещении на контакте (определяемая также с помощью касательной к ВАХ в полулогарифмическом масштабе).

Однако при учёте зависимости $n = n(V)$ для высоты барьера при плоских зонах получено другое выражение [4]:

$$\varphi_{bf} = n\varphi_{bm} - (n - 1)\varphi_s + \frac{nkT}{q}\ln\left(\frac{I_{bfa}}{I_{bf}}\right), \qquad (9)$$

где $I_{bf} = AR^*T^2\exp[-q\varphi_s/(kT)]$ — ток плоских зон, соответствующий, как следует из (1), смещению плоских зон $V = V_{bf}$, I_{bfa} — эффективный (кажущийся) ток плоских зон, введённый в [1] (см. также [3]), который, как показано там же, является функцией выбора точки касания и, в принципе, может быть определён экспериментально. Очевидно, что выражение (9) при $I_{bfa} = I_{bf}$ (что возможно только при n = const [4]) переходит в выражение (8), поскольку при этом измеряемая высота барьера φ_{bm} оказывается равной высоте барьера φ_{b0} при нулевом смещении.

Строго говоря, во всех работах, где используется выражение (8) (см., например, [10–13]), практически мы имеем дело с выражением [4]

$$\varphi_{bfI} = n\varphi_{bm} - (n - 1)\varphi_s = \varphi_{bn} - (n - 1)\varphi_s, \qquad (10)$$

поскольку измеряется именно значение φ_{bm} при некотором заданном токе, а не φ_{b0} (особенно это касается низких температур). Как следует из сравнения (9) и (10), $\varphi_{bf} > \varphi_{bfI}$.

Используя (6), нетрудно установить связь между истинной высотой барьера φ_{bf} и φ_{bfI}.

$$\varphi_{bf} = n\varphi_{bm} - (n-1)\varphi_s - (n-1)\frac{kT}{q}\ln\left(\frac{I_{bf}}{I}\right) = \varphi_{bfI} - (n-1)\frac{kT}{q}\ln\left(\frac{I_{bf}}{I}\right) \qquad (11)$$

В результате получаем соотношение $\varphi_{bm} > \varphi_{bfI} > \varphi_{bf}$. Первые две величины рассчитываются из результатов измерений n и φ_{bm}. Очевидно, что φ_{bfI} является лучшим приближением для истинной высоты барьера φ_{bf}, чем величина φ_{bm}, причём тем более лучшим, чем ближе ток, при котором проводятся измерения, к току I_{bf}. С другой стороны, поскольку φ_{bf} и φ_{bm} больше φ_{bfI}, можно ожидать, что φ_{bm} может быть лучшим приближением для высоты барьера при плоских зонах φ_{bf}, чем φ_{bfI}.

Наиболее просто было бы определить величину φ_{bf} непосредственно в условиях плоских зон, когда даже при $n = n(V)$ выполняется равенство $I_{bfn} = I_{bf}$. Однако уравнение (9) в этом случае некорректно, поскольку ВАХ барьера Шоттки, на которую оно опирается, не определена в условиях, близких к плоским зонам (когда изгиб зон не превышает kT/q) [2]. Расчёт не позволяет также оценить третий член в правой части (9), характеризующий погрешность определения высоты барьера при плоских зонах согласно (10), поскольку φ_{bf} и I_{bfn} определены друг через друга [4]. В то же время расчёт позволяет найти значение φ_{bf} при известной зависимости $\varphi_b(V)$ для каждой рассматриваемой модели, поскольку $\varphi_{bf} = \varphi_b(V_{bf})$, и сравнить его с рассчитываемой аппроксимацией φ_{bfI} и величиной φ_{bm}. Таким образом, задача нахождения φ_{bf} сводится к задаче нахождения V_{bf}, которая решается индивидуально для конкретной модели контакта металл—полупроводник.

Необходимо указать на ещё одно важное обстоятельство. Обычно экспериментальным критерием соответствия величины φ_{bf}, вычисленной согласно (8), реальной высоте барьера при плоских зонах принимается (согласно [11, 13] и другим работам) близкое соответствие между φ_{bf} и φ_{bc}, высотой барьера, определённой из вольт-фарадной ($C(V)$) характеристики. Однако внимательный анализ показывает, что приписывание φ_{bc} свойств высоты барьера при плоских зонах неправомерно. Действительно, для определения φ_{bc} используется вольт-фарадная характеристика в виде

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{A^2 q\varepsilon_s N_D}\left[\varphi_b(V) - \varphi_s - V - kT/q\right], \qquad (12)$$

где ε_s — диэлектрическая проницаемость полупроводника. Как известно, для определения высоты барьера по напряжению отсечки строится касательная к реальной характеристике $1/C^2 = f(V)$ при некотором смещении V. С учётом зависимости высоты барьера от смещения она может быть представлена в виде

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{A^2 q\varepsilon_s N_D n|_V}\left[\varphi_{bc}|_V - \varphi_s - V - kT/q\right]. \qquad (13)$$

Здесь множитель перед скобкой представляет собой производную $\mathrm{d}(1/C^2)/\mathrm{d}V$ при смещении V. Величина $n|_V$ — показатель идеальности в точке касания, определённый согласно (2), $\varphi_{bc}|_V$ — высота барьера, определяемая с помощью касательной, проведённой в точке V. Касательная, построенная вблизи $V = 0$, может быть представлена в виде

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{A^2 q\varepsilon_s N_D n}\left[\varphi_{bcm} - \varphi_s - V - kT/q\right], \qquad (14)$$

где $\varphi_{bcm} = V_{отс} + \varphi_s + kT/q$ — измеряемая по напряжению отсечки $V_{отс}$ высота барьера, n — показатель идеальности, соответствующий нулевому смещению. Приравнивая выражения (12) и (14) при $V = 0$ получим связь между измеряемой (с помощью касательной) высотой барьера φ_{bcm} и истинной высотой барьера $\varphi_b(V = 0) \equiv \varphi_{b0}$ в виде

$$\varphi_{bcm} = n\varphi_{b0} - (n-1)(\varphi_s + kT/q). \tag{15}$$

В эксперименте совпадение измеряемой высоты барьера φ_{bcm} с величиной φ_{bf}, вычисляемой по (8) из измерений вольт-амперной характеристики, воспринимается (на наш взгляд, ошибочно) как доказательство особого статуса величины φ_{bc} как высоты барьера при плоских зонах (см. выше). Между тем причина совпадения, как видим, кроется в том, что измеряемая из вольт-фарадных характеристик высота барьера φ_{bcm} определяется выражением (15), практически совпадающим с выражением (8), и при этом отнюдь не является высотой барьера при плоских зонах, а соответствует нулевому смещению.

Заметим, что сравнение выражений (15) и (8), где используются значения n, рассчитанные из ВАХ, допустимо только для температур, при которых действительно возможно определение высоты барьера при нулевом смещении (т.е. для достаточно высоких температур, поскольку при низких температурах определение φ_{bf} из ВАХ становится невозможным).

2. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ

Процедура численного анализа достаточно проста. Выбор модели контакта металл—полупроводник определяет характер зависимости истинной высоты барьера от смещения $\varphi_b(V)$ и высоту барьера при плоских зонах в соответствии с определением $\varphi_{bf} = \varphi_b(V = V_{bf})$. Из зависимости $\varphi_b(V)$ согласно (2) рассчитывается показатель идеальности n. Затем из уравнений (5) и (6) определяются величины $\varphi_{bn} \equiv n\varphi_{b\infty}$ и φ_{bm} в зависимости от смещения и температуры. Аналогичные зависимости для величины φ_{bf} находятся из уравнения (10).

Численные значения параметров, выбранные для расчёта, соответствуют арсенидогаллиевым диодам с барьером Шоттки: $R^* = 8.7$ А/(см^2 К^2), $\varphi_{b0} = 0.9$ В, $m^* = 0.068m_0$ — эффективная масса электрона в GaAs, m_0 — масса свободного электрона, $\varepsilon_0 = 12.4$ — диэлектрическая постоянная GaAs; площадь контакта $A = 3{,}5 \cdot 10^{-4}$ см^2. Концентрация примеси $N_D = 4 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$ выбиралась из условия отсутствия туннельной составляющей тока при низких температурах. Токи, при которых определялись величины n и φ_{bm}, соответствуют обычно используемым на практике ($10^{-6} \div 10^{-4}$ А).

В модели Бардина (рис. 1а) [2] смещение, подаваемое на КМП с барьером Шоттки распределяется между промежуточным слоем в контакте (V_i) и областью барьера (V_b) [14]:

$$V = V_i + V_b. \tag{16}$$

При этом зависимость высоты барьера от смещения определяется выражением

$$\varphi_b(V) = \varphi_b(0) + V_i(V) \equiv \varphi_{b0} + V_i(V), \tag{17}$$

а ВАХ представляется в виде [15, 16]

$$I = AR^*T^2\tau(V)\exp\left[-\frac{q\varphi_b(V)}{kT}\right]\exp\left[\frac{qV}{kT}\right]. \tag{18}$$

Мы пренебрегли здесь относительно малым влиянием сил изображения. Прозрачность промежуточного слоя $\tau(V)$ для наиболее простого случая, когда $qV_i \ll \chi$, имеет вид [16]

$$\tau(V) = \tau_0 \exp(\alpha_i V_i[\text{В}]), \tag{19}$$

где
$$\tau_0 \approx \exp[-(\chi[эВ])^{1/2}\,\delta_i[\text{Å}]\,(m_i/m_0)^{1/2}], \qquad \alpha_i = \delta_i[\text{Å}]/(4\,(\chi[эВ])^{1/2})\,(m_i/m_0)^{1/2}, \tag{20}$$
δ_i — толщина промежуточного слоя, χ — усреднённая высота связанного с ним барьера (см. рис. 1a), m_i — эффективная масса электрона в промежуточном слое.

Используя понятие эффективной высоты барьера
$$\varphi_b^*(V) = \varphi_b(V) - \frac{kT}{q}\ln[\tau(V)], \tag{21}$$
ВАХ (18) удобно представить в общем виде (1) с эффективной высотой барьера $\varphi_b^*(V)$ вместо истинной высоты барьера $\varphi_b(V)$. Приравнивая полученную таким образом ВАХ с касательной к ней в форме (4) в произвольной точке, получим уравнения, связывающие эффективную высоту барьера φ_b^* с измеряемой величиной φ_{bm} в виде, аналогичном (5) и (6) с единственной разницей: величина n заменена здесь на n_τ, определённую подобно (2):
$$n_\tau = \left(1 - \frac{d\varphi_b^*}{dV}\right)^{-1} = n\left[1 - \alpha_i\,(n-1)\,\frac{kT}{q}\right]^{-1}, \tag{22}$$
где n определяется выражением (2) с учётом (17). Заметим, что $n_\tau < n$, поскольку прозрачность барьера согласно (19) увеличивается с ростом смещения. Полученные таким образом аналоги уравнений (5) и (6) позволяют определить значения φ_{bm} в диапазоне температур и смещений при известных $V_i(V)$ и $n_\tau(V)$. При этом связь между током и напряжением определяется вольт-амперной характеристикой (18).

Зависимость $V_i(V)$ (а значит, согласно (17) и зависимость $\varphi_b(V)$) может быть рассчитана из условия баланса заряда в КМП при подаче смешения ($\Delta Q = Q(V) - Q(0)$):
$$\Delta Q_m + \Delta Q_{sc} + \Delta Q_{ss} = 0. \tag{23}$$
Здесь
$$Q_m = -\frac{\varepsilon_i\,(\Delta_0 + V_i)}{\delta_i} = -C_{\delta i}\,(\Delta_0 + V_i) \tag{24}$$
— заряд в металле (ε_i — диэлектрическая проницаемость промежуточного слоя, Δ_0 — скачок потенциала в нём в отсутствие смешения (см. рис. 1a), $C_{\delta i} = \varepsilon_i/\delta_i$ — ёмкость промежуточного слоя между металлом и полупроводником);
$$Q_{sc} = \left\{2\varepsilon_s q N_D\left[\frac{kT}{q}\exp\left(-\frac{qV_\rho}{kT}\right) + V_\rho - \frac{kT}{q}\right]\right\}^{1/2} \tag{25}$$
— заряд в барьере (пространственный заряд), при этом изгиб зон равен $V_\rho = (\varphi_{b0} - \varphi_s) - V_b$ (запись Q_{sc} в более точной форме [2] существенна при нахождении потенциала плоских зон, прежде всего, для устранения неопределённости с изгибом зон);
$$Q_{ss} = \frac{qN_s^0E_0^2}{2kT}\,\mathrm{sh}\left(\frac{2kT}{E_0}\right)\exp\left(\frac{q\,(\varphi_{b0} - V_b)}{E_0}\right) - qN_s^0E_0\exp\left(\frac{E_c - E^*}{E_0}\right) \tag{26}$$
— заряд поверхностных электронных состояний, определяемый распределением их плотности, где E^* — уровень нейтральности поверхности, E_c — уровень дна зоны проводимости. Выражение (26) соответствует равновесию поверхностных электронных состояний с полупроводником. Именно в этом случае (в отличие от случая равновесия поверхностных электронных состояний

с металлом) возможно существенное отклонение ВАХ от идеальной, характерное для реальных контактов металл—полупроводник и поэтому интересное для исследования [1].

Вывод выражения (26) основывается на следующих допущениях. Полагается, что распределение плотности поверхностных электронных состояний в реальных КМП можно представить в виде двух ветвей (двух систем состояний), изображённых на рис. 1б (см., например, [17, 18]). Первая из них (изображена штриховой линией), имеющая вид относительно острого максимума (в принципе, это может быть и локальный уровень (локальная зона) высокой плотности), обеспечивает закрепление уровня Ферми вблизи уровня E_{b0} (при этом $\varphi_{b0} = E_c - E_{b0}$) и определяет высоту барьера, которая зависит также и от положения уровня нейтральности поверхности E^* [1, 2]. Мы пренебрегаем влиянием этой ветви поверхностных электронных состояний на величину показателя идеальности и потенциала плоских зон, полагая, что они находятся преимущественно в равновесии с металлом [1]. Вторая ветвь описывает состояния, плотность которых спадает от края зоны проводимости вглубь запрещённой зоны ($E_0 < 0$). E_v — уровень дна валентной зоны (см. рис. 1б):

$$N_s(E) = N_s^0 \exp\left(\frac{E_c - E}{E_0}\right). \tag{27}$$

Такое распределение соответствует известным данным об энергетическом спектре свободной и пассивированной поверхности различных полупроводников [17, 18]. Именно оно при равновесии поверхностных электронных состояний с полупроводником, особенно вероятным при достаточно высоких смещениях и низких температурах, может привести к существенному росту показателя идеальности ВАХ и, как следствие, к низкотемпературной аномалии.

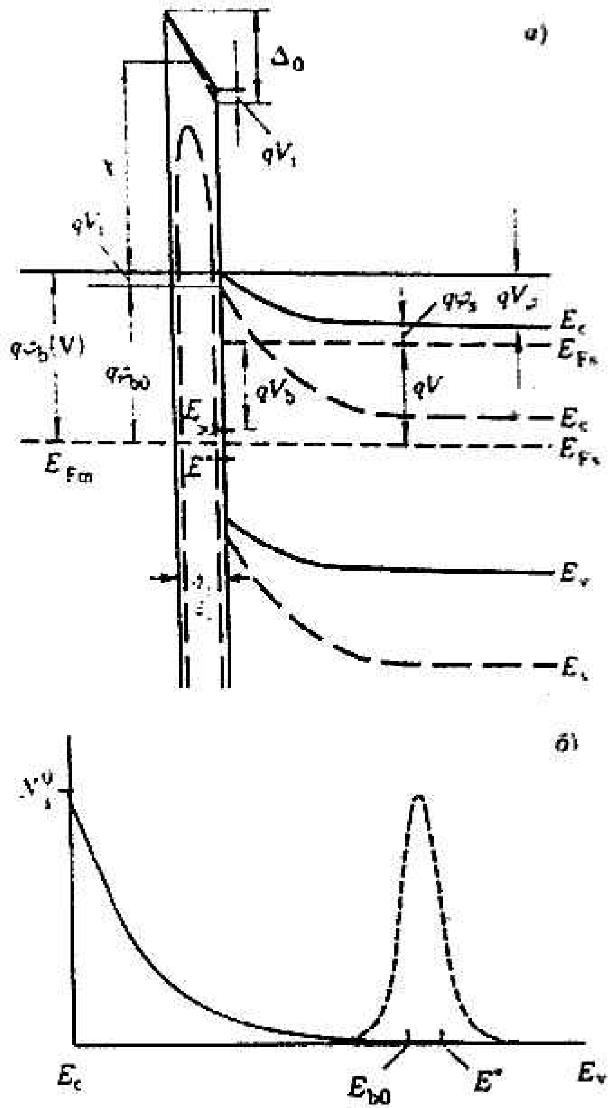

Рис. 1

Заряд в поверхностных электронных состояниях находится интегрированием по спектру поверхностных электронных состояний в пределах от E^* до $E_{Fs} + 2kT$, что определяется выбором приближения для функции распределения в виде

$$f_s(E) = \begin{cases} 1, & E \le E_{Fs} - 2kT; \\ 1 + \dfrac{E_{Fs} - 2kT - E}{4kT}, & E_{Fs} + 2kT \ge E \ge E_{Fs} - 2kT; \\ 0, & E \ge E_{Fs} + 2kT. \end{cases} \tag{28}$$

Здесь $E_{Fs} = E_{b0} + qV_b$ — положение уровня Ферми в полупроводнике (см. рис. 1а: уровни E_{b0} и E^* на рисунке соответствуют состоянию смещения, E_{Fm} — уровень Ферми в металле).

Наиболее простой путь нахождения n — дифференцирование уравнения (23) [15], что с учётом (2), (17) и соотношений для зарядов Q_m, Q_{sc} и Q_{ss} приводит к выражению

$$n = 1 + (C_{sc} + C_{ss})/C_{\delta i}, \tag{29}$$

где

$$C_{sc} = \left(\frac{q\varepsilon_s N_D}{2}\right)^{1/2} \frac{1 - \exp[-qV_\varphi/(kT)]}{[(kT/q)\exp[-qV_\varphi/(kT)] + V_\varphi - kT/q]^{1/2}}, \tag{30}$$

$$C_{ss} = \frac{q^2 N_s^0 E_0}{2kT}\,\mathrm{sh}\left(\frac{2kT}{E_0}\right)\exp\left[\frac{q(\varphi_{b0} - V_b)}{E_0}\right] \tag{31}$$

— емкости барьера Шоттки и поверхностных электронных состояний соответственно. Напомним, что выражение (29) соответствует равновесию поверхностных электронных состояний с полупроводником.

Высота барьера при плоских зонах может быть найдена из (17) при $V = V_{bf}$:

$$\varphi_{bf} \equiv \varphi_b(V_{bf}) = \varphi_{b0} - V_i(V_{bf}), \tag{32}$$

где, в свою очередь, $V_i(V_{bf})$ определяется из условия баланса заряда (23) при плоских зонах (т.е. при $V = V_{bf}$, когда $V_\varphi = (\varphi_{b0} - \varphi_s) - V_b(V_{bf}) = 0$).

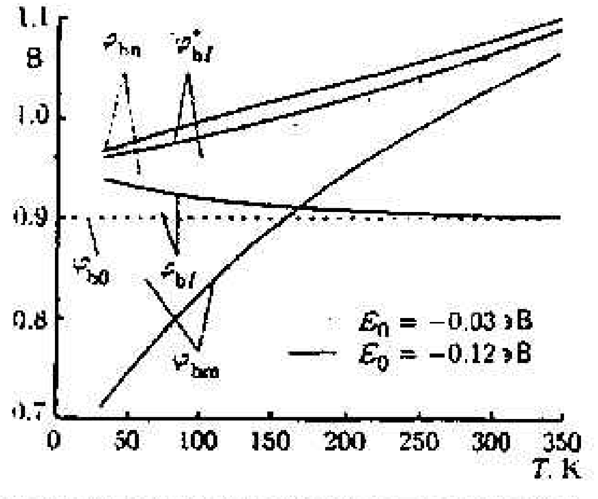

Рис. 2. Температурные зависимости высот барьеров (в вольтах) при прямом токе $I = 10^{-5}$ А, $\delta_i = 6\cdot10^{-8}$ см, $\chi = 1$ эВ, $N_s^0 = 10^{13}$ см$^{-2}\cdot$эВ$^{-1}$ и относительной диэлектрической проницаемости промежуточного слоя $\varepsilon_{i0} = 3$

Анализ полученных результатов мы начнём с температурных зависимостей высот барьеров (рис. 2). Но прежде отметим, что температурная шкала ограничена значением $T \approx 30$ К, ниже которого начинается «вымораживание» донорной примеси (уровень Ферми пересекает уровень донорной примеси, $E_d = 0.006$ эВ [2]) и нарушается использованное в расчётах условие постоянной концентрации ионизированной примеси N_D.

Из приведённых данных следует, что уже при минимальных значениях толщины промежуточного слоя $\delta_i = 6\cdot10^{-8}$ см ($\chi = 1$ эВ, $m_i = m_0$ [19]), когда, согласно известным данным [1, 15], экспериментальная ВАХ контакта металл—полупроводник с барьером Шоттки очень слабо реагирует на его наличие, наблюдается значительное увеличение эффективной (φ^*_{bf}) и измеряемой (φ_{bm}) высот барьера и рост их с повышением температуры. Поскольку экспериментально такие эффекты в достаточно совершенных контактах ($n < 1.1$ при комнатной температуре) не наблюдаются [1], мы полагаем, что коэффициент прозрачности промежуточного слоя в таких контактах примерно равен 1 и, следовательно, $\varphi^*_{bf} \approx \varphi_{bf}$. Это значит, что влияние промежуточного слоя на параметры ВАХ (показатель идеальности и измеряемую высоту барьера) осуществляется только через перераспределение напряжения на контакте (см. (17)). Ещё одним фактором влияния являются поверхностные электронные состояния.

Относительно слабая (о сравнении с расчётом, см. рис. 2) чувствительность ВАХ реальных КМП к толщине промежуточного слоя (по крайней мере, до толщин порядка 10^{-7} см [15]) может

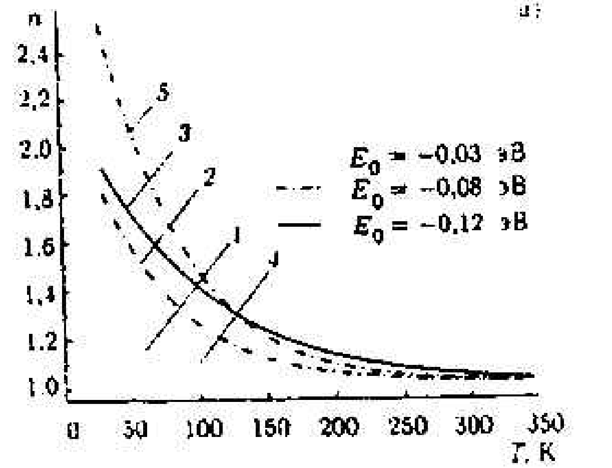

Рис. 3а. Характерные температурные зависимости показателя идеальности ВАХ при $\delta_\varepsilon = 6 \cdot 10^{-8}$ см. $N_s^0 = 10^{13}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ (кривые *1–3*), $\delta_\varepsilon = 10^{-7}$ см. $N_s^0 = 10^{13}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ (кривая *4*), $\delta_\varepsilon = 6 \cdot 10^{-8}$ см. $N_s^0 = 2 \cdot 10^{13}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ (кривая *5*) и прямом токе $I = 10^{-5}$ А

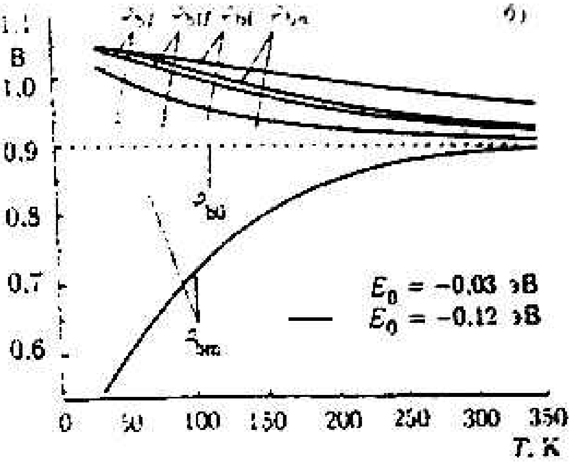

Рис. 3б. Температурные зависимости высот барьеров (в вольтах) при $\delta_\varepsilon = 6 \cdot 10^{-8}$ см. $N_s^0 = 10^{13}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ и $I = 10^{-5}$ А

иметь несколько объяснений [1]: наличие пор в диэлектрике, уменьшение высоты и ширины барьера промежуточного слоя из-за эффекта сил изображения (см. рис. 1*а*) и увеличение тока через контакт за счёт дополнительного переноса зарядов через поверхностные состояния. Значительный вклад в расхождение расчёта и эксперимента может внести и неопределённость эффективной массы m_i в сверхтонком диэлектрике, которая обычно принималась в расчётах равной массе свободного электрона [19].

Мы полагаем, что подходящим объяснением может быть сужение и уменьшение высоты барьера промежуточного слоя из-за неучитываемого в расчёте эффекта сил изображения (хотя нужно заметить, что форма барьера в рассматриваемом контакте согласно известным представлениям [1] может быть более сложной, чем на рис. 1*а*), причём такое, что для электронов зоны проводимости, пролетающих над барьером, $\tau \approx 1$. Вместе с тем можно предположить (в соответствии с [1]), что одновременно существуют поверхностные электронные состояния, находящиеся в равновесии с металлом (закрепляющие положение уровня Ферми) и с полупроводником (объясняющие рост показателя идеальности с понижением температуры). Последние, в частности, могут представлять собой часть поверхностных электронных состояний наиболее «углублённых» в полупроводник и связанных, например, с поверхностными и приповерхностными нарушениями структуры полупроводника. Это в целом соответствует представлениям о природе таких состояний [17, 18].

С учётом сказанного и известных литературных данных (см., прежде всего, [1]) параметры промежуточного слоя в расчётах варьировались в следующих пределах: относительная диэлектрическая проницаемость промежуточного слоя $\varepsilon_{i0} = 1 \div 5$, его приведённая толщина $\delta_\varepsilon = \delta_i/\varepsilon_{i0} = 5 \cdot 10^{-8} \div 2 \cdot 10^{-7}$ см, эффективная масса электрона $m_i = m_0$. Сочетания этих значений, а также параметры N_s^0 и E_0 распределения поверхностных электронных состояний выбирались исходя из известных данных для контактов металл–полупроводник на основе GaAs и Si [1, 2] и, главным образом, из качественного соответствия расчётных данных широко известным экспериментальным значениям показателя идеальности ВАХ, измеряемой высоты барьера и их температурной зависимости для диодов с барьером Шоттки на основе GaAs и Si (см., например, [5])

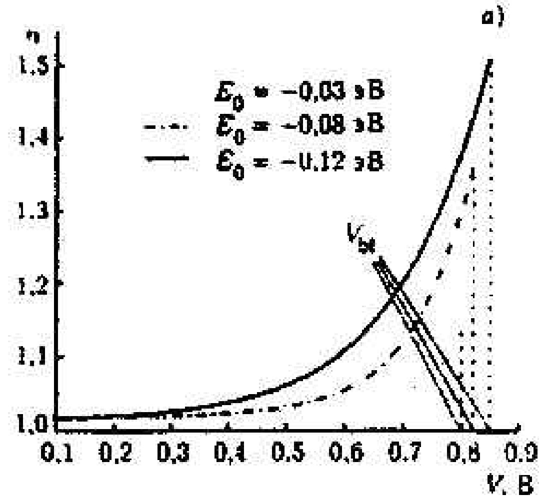

Рис. 4а. Зависимости показателя идеальности ВАХ от смещения при $\delta_t = 6 \cdot 10^{-8}$ см, $N_s^0 = 10^{14}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ и $T = 300$ К

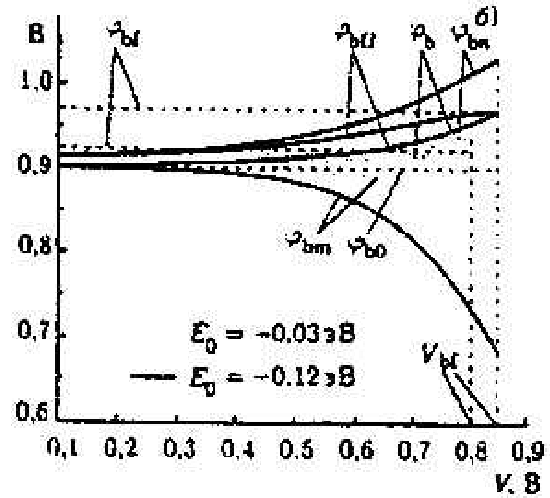

Рис. 4б. Зависимости высот барьеров (в вольтах) от смещения при $\delta_t = 6 \cdot 10^{-8}$ см, $N_s^0 = 10^{13}$ см$^{-2}$ · эВ$^{-1}$ и $T = 300$ К

Температурные зависимости рассчитывались при прямом токе $I = 10^{-5}$ А.

Характерные температурные зависимости показателя идеальности ВАХ n, истинной высоты барьера φ_{bl}, измеряемой высоты барьера φ_{bm}, значений φ_{bn}, φ_{blI} и высоты барьера при плоских зонах представлены на рис. 3. Вывод очевиден: в рамках модели Бардина при значительном варьировании (в очерченных выше рамках) параметров промежуточного слоя и поверхностных электронных состояний наблюдаются характерные для реальных КМП с барьером Шоттки черты низкотемпературной аномалии: рост n с понижением температуры, уменьшение при этом измеряемой высоты барьера φ_{bm} и относительно слабая зависимость от температуры величины $\varphi_{bn} \equiv n\varphi_{bm}$, достаточно близкой к истинной высоте барьера φ_{bl}. Отступление характеристик от идеальных (рост n) увеличивается с ростом плотности поверхностных электронных состояний N_s^0, постоянной $|E_0|$ и толщины промежуточного слоя. Манипуляцией этих параметров можно добиться широкого разнообразия представленных характеристик (см. рис. 3а), характерного для реальных КМП с барьером Шоттки [5]. Как и следует из расчёта (см. раздел 1), между различными высотами барьеров существует соотношение $\varphi_{bn} > \varphi_{blI} > \varphi_{bl}$ (см. рис. 3б). В наибольшей степени от истинной высоты барьера отличается высота барьера при плоских зонах φ_{bf}. Наиболее близка к ней рассчитываемая из измеренных значений n и φ_{bm} величина φ_{blI}. Высоты барьеров и соотношение между ними определяются параметрами промежуточного слоя и поверхностных электронных состояний, которые определяют нелинейные свойства высоты барьера.

Рис. 4 демонстрирует нелинейные свойства истинной высоты барьера $\varphi_b(V)$, приводящие к росту со смещением показателя идеальности n и понижению измеряемой высоты барьера φ_{bm}. Для каждого смещения выполняется то же соотношение между высотами барьера (см. выше): $\varphi_{bn} > \varphi_{blI} > \varphi_{bl}$. Заметим, что значения φ_{bn} (т.е. n и φ_{bm}) в области малых барьеров (при достаточно больших смещениях) нельзя считать достоверными, поскольку при этом нарушаются условия применимости термоэмиссионной теории для барьера Шоттки и формулы (18) [1, 2]. При смещении плоских зон (значения V_{bl} показаны на рис. 4) φ_{blI} и φ_b в согласии с (11) совпадают (при этом $I = I_{bl}$) и равны φ_{bl}. Кажется очевидным, что в рамках модели Бардина с высокой плотностью поверхностных электронных состояний, увеличивающейся к дну зоны проводимости, высоты барьера при плоских зонах столь существенно отличаются от истинной высоты барьера при обычных смещениях ($V < V_{bl}$) и столь сильно зависят от параметров промежуточного слоя и поверхностных электронных состояний, что теряют какой-либо смысл в качестве параметра контакта металл–полупроводник с барьером Шоттки.

В условиях, когда высота барьера при плоских зонах слишком существенно отличается от истинной высоты барьера φ_b, последняя представляется наиболее приемлемой характеристикой контакта металл–полупроводник с барьером Шоттки, несмотря на зависимость от смещения. При комнатной (или близкой к ней) температуре хорошим приближением для неё является высота барьера φ_{b0} при нулевом смещении (см. рис. 3б и 4б), близкая к измеряемой высоте барьера. Действительно, как следует из (5), при $n < 1,1$ и $V < 0,3$ В соотношение $\varphi_b \approx \varphi_{b0} \approx \varphi_{bm}$ выполняется с точностью около 3 %. Теоретически φ_{b0} может быть оценена также из измерений φ_{bcm} согласно (15):

$$\varphi_{b0} = \frac{\varphi_{bcm}}{n} - \frac{n-1}{n}\left(\varphi_s - \frac{kT}{q}\right). \quad (33)$$

Наконец, при низких температурах при достаточно больших n допустимым приближением для истинной высоты барьера представляются значения φ_{bf} и φ_{bn}.

Анализируя многообразие зависимостей $n(T)$ (см. рис. 3а), нетрудно представить, что подгонкой параметров контакта вполне возможно получить зависимость типа $n(T) = 1 + T_0/T$, где $T_0 = \text{const}$, получившую название T_0-эффекта (см. формулу (7)). Однако, как выяснилось, получить хорошее соответствие расчётных зависимостей $n(T)$ T_0-эффекту довольно трудно. Ситуация с подгонкой существенно упрощается, если использовать две спадающие (резко, с постоянной E_{01}, и плавно, с постоянной E_{02}) ветви поверхностных электронных состояний с относительно высокой (N_{s1}^0) и относительно низкой (N_{s2}^0) концентрацией. Пример такой подгонки показан на рис. 5. Здесь пунктиром показана зависимость $n(T)$ с $T_0 = 30$ К. Как видно, она довольно хорошо совпадает с расчётной кривой $n(T)$ (показана сплошной линией) для указанных на рисунке параметров двух ветвей поверхностных электронных состояний с одним и тем же значением $\delta_i = 6 \cdot 10^{-8}$ см. Зависимости высот барьеров от температуры (сплошные линии) при этом подобны приведённым выше. Этот результат подтверждает заключение (см., например, [20]) о том, что T_0-эффект не носит характер общего закона, а является, скорее, закономерностью, характерной для определённых условий создания определённого типа контактов.

Говоря о том, что причиной низкотемпературной аномалии ВАХ является нелинейная зависимость высоты барьера от смещения, необходимо подчеркнуть, что роль поверхностных электронных состояний (прежде всего, рост их плотности с приближением к дну зоны проводимости) в этом смысле сводится, по существу, к усилению этой нелинейности до такого уровня, при котором получают объяснение характерные особенности поведения КМП (низкотемпературная аномалия): быстрый рост показателя идеальности с понижением температуры и параллельное уменьшение измеряемой высоты барьера.

При однородном распределении поверхностных электронных состояний (или их отсутствии) нелинейность высоты барьера и связанная с ней низкотемпературная аномалия выражены значительно слабее. В этом случае при определённых допущениях для КМП в модели Бардина можно, как известно [14, 20], получить аналитическое приближение для зависимости $n(T)$. Действительно, если предположить, что распределение поверхностных электронных состояний однородно и коэффициент прозрачности промежуточного слоя равен единице, то показатель идеальности ВАХ в случае равновесия поверхностных электронных состояний с полупроводником можно представить в виде (см. (29))

$$n = n_0 + \frac{\delta_i}{\varepsilon_i}\left[\frac{q\varepsilon_s N_D}{2(\varphi_{b0} - \varphi_s - V_b - kT/q)}\right]^{1/2}, \quad (34)$$

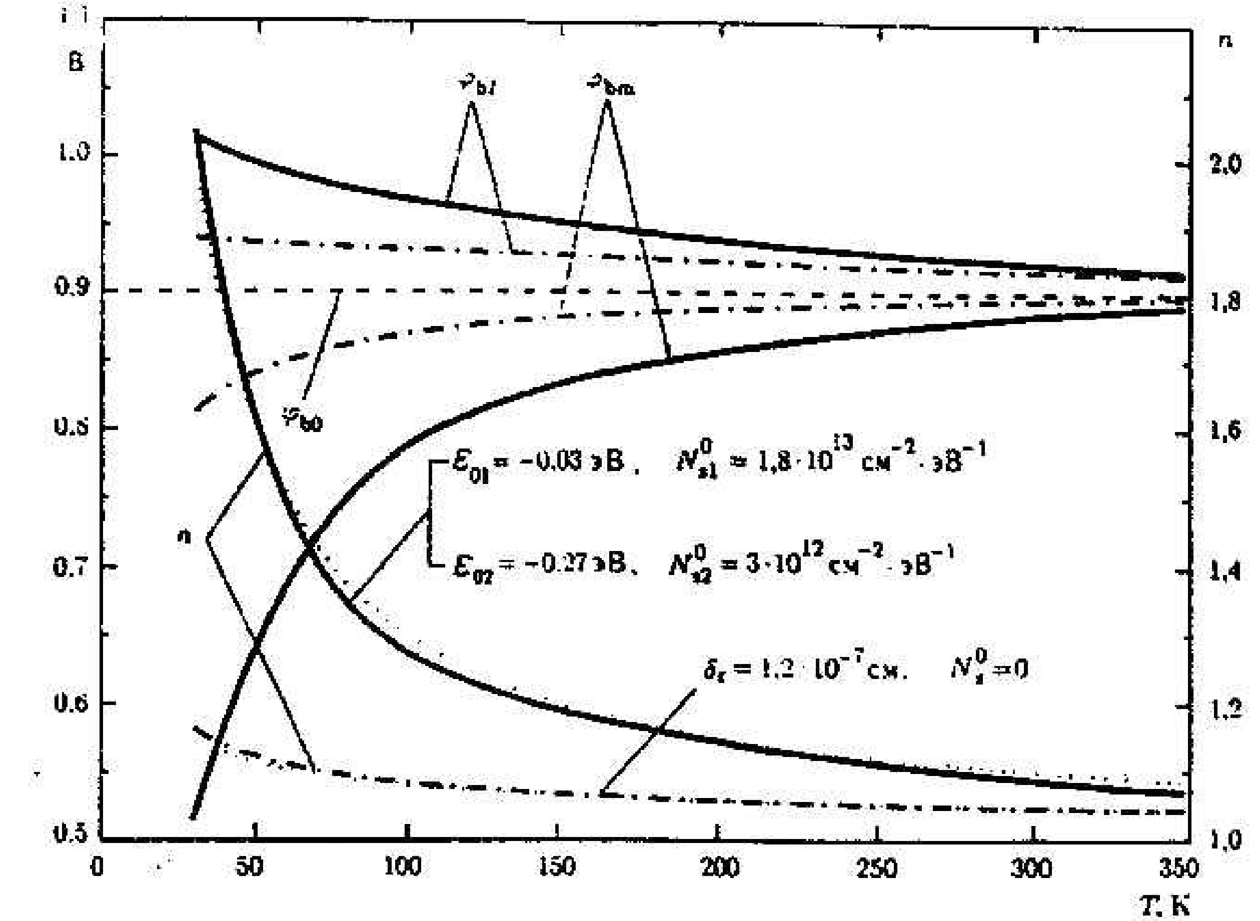

Рис. 5 Зависимости показателя идеальности ВАХ и высот барьеров от температуры при $I = 10^{-5}$ А

где $n_0 = 1 + C_{ss}/C_{\delta i} = \mathrm{const}$. ВАХ (18) с учётом (16) и (17) в этом случае можно преобразовать к виду $I = I_{bf}\exp[-q(\varphi_{b0} - \varphi_s - V_b)/(kT)]$. Используя это выражение, получим

$$n(T) \approx n_0 + a_1\left(\frac{kT}{q}\right)^{-1/2}\left[\ln\left(\frac{I_{bf}}{I}\right) - 1\right]^{-1/2}, \tag{35}$$

где $a_1 = (\delta_i/\varepsilon_i)(q\varepsilon_s N_D/2)^{1/2}$ — постоянная, n_0 не зависит от температуры для однородного распределения поверхностных электронных состояний. Пренебрегая температурной зависимостью величины $\ln I_{bf}$ и учитывая условие постоянства тока при измерениях, n при произвольной температуре можно выразить через параметр идеальности ВАХ $n_к$ при комнатной температуре $T_к$:

$$n(T) \approx n_0 + \frac{T_0}{T^{1/2}}, \tag{36}$$

где $T_0 = (n_к - n_0)T_к^{1/2}$. Кривая этого типа с $T_0 = 0{,}81$ K$^{1/2}$, рассчитанная по формуле (36), представлена на рис. 5 (пунктир) наряду с точно рассчитанной зависимостью $n(T)$ (а также с зависимостями $\varphi_{bm}(T)$ и $\varphi_{bf}(T)$) для $\delta_i = 1{,}2\cdot10^{-7}$ см и $N^0_s = 0$ (штрих-пунктирные кривые). Совпадение зависимостей для n можно признать хорошим. Оно может быть ещё лучшим, если использовать подгоночное значение $T_0 = 0{,}83$ K$^{1/2}$. Как видим, при отсутствии поверхностных электронных состояний или при их однородном распределении в силу слабой нелинейности зависимости $\varphi_b(V)$ (см. рис. 5) низкотемпературная аномалия (зависимости $n(T)$ и $\varphi_{bm}(T)$) выражена значительно слабее.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наиболее важным результатом работы является подтверждение теоретических расчётов, объясняющих низкотемпературную аномалию в контакте металл—полупроводник с барьером Шоттки нелинейной зависимостью высоты барьера от смещения. В рамках модели реального контакта (модели Бардина) эта нелинейность обеспечивается главным образом характером распределения поверхностных электронных состояний, находящихся в равновесии с полупроводником: достаточно быстрым ростом их плотности при приближении к дну зоны проводимости. Из анализа следует, что ВАХ вида

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_{bm}}{nkT}\right) \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \tag{37}$$

с достаточно высокой точностью соответствует ВАХ реального КМП с барьером Шоттки в широком диапазоне температур в отличие от широко принятой ВАХ вида [1, 2]

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_b}{kT}\right) \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right), \tag{38}$$

которая не учитывает нелинейной зависимости высоты барьера от смещения и поэтому приводит к нереальным значениям высоты барьера в области низких температур. Отметим, что выражение типа (37) неоднократно использовалось экспериментаторами (см., например, [3, 20, 21]), но теоретическое обоснование получило впервые.

Известный T_0-эффект также вполне объясняется в рамках проведённого расчёта. Очевидно, что этот эффект является не строгим законом, а приближением, которое может быть хорошим при определённых параметрах КМП и неудовлетворительным — при других.

В рамках рассмотренной модели реального КМП с барьером Шоттки показано, что высота барьера при плоских зонах в том варианте (не учитывающем нелинейность высоты барьера), как она используется в известных работах ($\varphi_{bf} = n\varphi_{b0} - (n-1)\varphi_s$), не соответствует своему названию. Практически, она в большей степени соответствует истинной (реальной) высоте барьера. То же относится и к высоте барьера φ_{bcm}, определяемой известным методом из вольт-фарадной характеристики. Использование высоты барьера при плоских зонах в качестве параметра КМП с барьером Шоттки в этом случае нецелесообразно, поскольку она очень сильно зависит от параметров (модели) контакта.

Необходимо отметить и проблемы, связанные с использованием самой модели Бардина. Наличие поверхностных электронных состояний, находящихся в равновесии с полупроводником, которое необходимо для объяснения низкотемпературной аномалии, противоречит требованию высокой прозрачности промежуточного слоя, на которую указывают известные экспериментальные данные и при которой более вероятно равновесие поверхностных электронных состояний с металлом. Разрешение этого противоречия возможно в предположении наличия состояний, находящихся в равновесии и с металлом, и с полупроводником. Последнее возможно для «углублённых» в полупроводник состояний, связанных, вероятно, с нарушением структуры его поверхности и приповерхностной области. Высокая же прозрачность промежуточного слоя может быть следствием особенностей структуры сверхтонких слоёв и влияния сил изображения на высоту их барьера.

Важный практический вывод работы заключается в том, что рост показателя идеальности ВАХ с понижением температуры, характерный в той или иной степени практически для всех реальных КМП с барьером Шоттки, не может быть показателем какого-либо определённого механизма токопрохождения, на что можно найти указания во многих экспериментальных исследованиях. Практически, он свидетельствует лишь о нелинейной зависимости высоты барьера от смещения, причины которой в общем случае могут быть различными.

Наконец, следует сказать, что представленное объяснение свойств реальных контактов металл—полупроводник с барьером Шоттки (в частности, низкотемпературной аномалии) в рамках модели Бардина не является единственно возможным. Такими свойствами при определённых условиях могут обладать и неоднородные контакты, которые заслуживают специального исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rhoderick E. H., Williams R. H. Metal-Semiconductor contacts: 2nd ed. Oxford. Clarendon, 1988.
2. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов / Пер. с англ. под ред. Р. А. Суриса. М.: Мир, 1984.
3. Padovani F. A., Sumner G. G. // J. Appl. Phys. 1965. V. 38, № 12. P. 3744.
4. Божков В. Г. // Изв. вузов. Радиофизика. 2002. Т. 45, № 5. С. 416.
5. Bozhkov V. G., Kuzyakov D. Ju. // J. Appl. Phys. 2002. V. 92, No. 8, P. 4502.
6. Werner J. H., Guttler H. H. // J. Appl. Phys. 1991. V. 69, No. 3. P. 1522.
7. Бехштедт Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников: Пер. с англ. М.: Мир. 1990.
8. Monch W. // J. Vac. Sci. Technol. B. 1996. V. 14, No. 4. P. 2985.
9. Drummond T. J. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59, No. 12, P. 8182.
10. Wagner L. F., Jong R. W., Sugerman A. // IEEE Electron Dev. Lett. 1983. V. 4, No. 9. P. 320.
11. Werner J. H., Guttler H. H. // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. P. 1315.
12. Broom R. F., Meier H. P., Walter W. // J. Appl. Phys. 1986. V. 60, No. 5. P. 1832.
13. Chin V. W. L., Green M. A., Storey J. W. V. // J. Appl. Phys. 1990. V. 68, No. 7. P. 3470.
14. Стриха В. И. Теоретические основы работы контакта металл—полупроводник. Киев: Наукова думка, 1974.
15. Card H. C., Rhoderick E. H. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1971. V. 4. P. 1589.
16. Егудин А. Б., Чкалова О. В., Фомина Н. В. // Электронная техника. Сер. 2. Полупроводниковые приборы. 1974. Вып. 9. С. 50.
17. Spicer W. E., Chye P. W., Skeath P. R., Su C. Y., Lindau I. // J. Vac. Sci. Technol. 1979. V. 16, No. 5. P. 1422.
18. Spicer W. E., Eglash S., Lindau I., Su C. Y., Skeath P. R. // Thin Solid Films. 1982. V. 89. P. 447.
19. Card H. C. // Solid-St. Electron. 1975. V. 18, No. 10. P. 881.
20. Hackam R., Harrop P. // IEEE Trans. Electron. Dev. 1972. V. 19, No. 12. P. 1231.
21. Гольдберг Ю. А., Поссе Е. А., Царенков Б. В. // Физика и техника полупроводников. 1971. Т. 5, вып. 3. С. 468.

[1] ОАО «НИИПП», г. Томск;
[2] Томский госуниверситет, г. Томск, Россия

Поступила в редакцию
29 августа 2003 г.

ANALYSIS OF THE ACTUAL SCHOTTKY-BARRIER CONTACT MODEL IN A WIDE TEMPERATURE AND BIAS-VOLTAGE RANGE

V. G. Bozhkov and S. E. Zaitzev

We numerically study the model of an actual metal-semiconductor Schottky-barrier contact with an interfacial layer and surface states (the Bardeent model). Our study is based on the previously developed view that the anomalies of characteristics of such a contact is a consequence of the nonlinear dependence of the barrier height on the bias voltage. It is shown that on this basis it is possible to explain in a natural way the so-called "low-temperature anomaly" (i.e., an increase in the ideality factor of the current-voltage characteristic and a decrease in the measured barrier height with decreasing temperature) in metal–semiconductor Schottky-barrier contacts and the relationship between different barrier heights characterizing a contact, namely, between the actual barrier height, which is measured from a saturation current, the flat-band barrier height, and the barrier height measured from a $C-V$ characteristic.