

# Вольт-амперная характеристика контакта металл–полупроводник с барьером Мотта

© В.И. Шашкин, А.В. Мурель

Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603000 Нижний Новгород, Россия

E-mail: sha@ipm.sci-nnov.ru

(Поступила в Редакцию 5 июня 2007 г.)

Получено аналитическое решение для вольт-амперных характеристик (ВАХ) контакта металл–полупроводник с барьером Мотта при учете пространственного заряда носителей тока  $n^+$ – $i$ -перехода. Основным допущением при решении уравнения Пуассона является пренебрежение объемным легированием  $i$ -слоя. Для характерных случаев термоэмиссионного и диффузионного механизмов переноса носителей тока рассчитаны зависимости тока от напряжения. В отличие от классического результата Мотта учет пространственного заряда носителей тока ограничивает рост тока при прямом смещении и уменьшает нелинейность ВАХ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 07-02-00163 и 07-02-12150).

PACS: 73.30.+y, 73.63.-b, 73.40.Ei

## 1. Введение

Модель контакта металла с полупроводником, имеющим на границе промежуточный нелегированный  $i$ -слой, была предложена в работах Мотта в конце 30-х годов прошлого века [1,2]. Модель предполагает также, что объем полупроводника достаточно сильно легирован, так что обедненной областью при всех напряжениях смещения является только верхний промежуточный слой. Эта модель, названная по имени автора барьером Мотта, сыграла важную роль при формировании представлений о контактах металл–полупроводник [3,4]. После возникновения эпитаксиальных технологий такие контакты нашли применение в микроэлектронике [4,5], в том числе вслед за оригинальным предложением [2] для детектирования высокочастотных сигналов [6,7]. В настоящей работе впервые рассчитываются вольт-амперные характеристики (ВАХ) контактов с барьером Мотта (КБМ) при учете неоднородности электрического поля в  $i$ -слое из-за пространственного заряда свободных носителей. Решается уравнение Пуассона для потенциала, выводятся выражения термоэмиссионного и диффузионного тока, обсуждаются изменения ВАХ, вызванные пространственным зарядом.

## 2. Расчет потенциала контакта с барьером Мотта

Рассмотрим решение задачи для электронов в слоистой структуре металл–нелегированный слой–сильно легированный  $n^+$ -слой. При оценках и построении графиков будем использовать параметры арсенида галлия [3]. Граница с металлом соответствует  $x = 0$ , толщину  $i$ -слоя обозначим  $D$ . Зависимость потенциала  $f(x)$

определяется из уравнения Пуассона:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{4\pi q}{\varepsilon} (n - N), \quad (1)$$

где  $n = N_D \exp(qf/kT)$  — концентрация электронов,  $N$  — плотность ионизированных доноров ( $N = 0$  при  $x < D$ ,  $N = N_D$  при  $x > D$ ),  $\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника. Граничные условия имеют вид  $f = 0$  и  $df/dx = 0$  при  $x = +\infty$ ,  $f$  и  $df/dx$  — неразрывные функции при  $x = D$ . Перейдем к безразмерным переменным  $\hat{f} = qf/kT$ ,  $\hat{V} = qV/kT$ ,  $\hat{x} = x/r_d$ ,  $\hat{D} = D/r_d$  ( $r_d = \sqrt{\varepsilon kT/4\pi q^2 N_D}$  — дебаевская длина), проинтегрируем уравнение (1) и воспользуемся граничными условиями

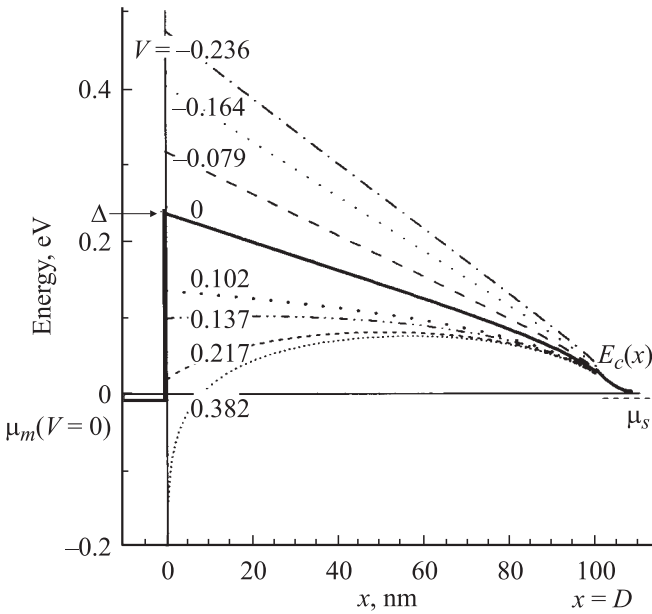
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d\hat{f}}{d\hat{x}} = \pm \sqrt{\exp(\hat{f}) - \hat{f}(\hat{D}) - 1}, \quad \hat{x} < \hat{D}. \quad (2)$$

В уравнение (2) в качестве свободного параметра входит значение потенциала  $\hat{f}(\hat{D})$  на границе слоев  $n^+$ – $i$ . Поскольку  $df/dx > 0$  при  $x = D$ , выбираем знак плюс в (2), что позволяет продолжить решение в сторону меньших значений  $x$ . Если на фазовой траектории  $df/dx$  обращается в нуль, то при дальнейшем продолжении решения следует выбрать знак минус, что означает наличие минимума потенциала при выбранных параметрах. Уравнение (2) можно проинтегрировать [8]

$$\hat{f}(\hat{x}) = \ln \frac{4bF \exp(\sqrt{2b}(\hat{D} - \hat{x}))}{[F \exp(\sqrt{2b}(\hat{D} - \hat{x})) - 1]^2}, \quad (3)$$

где  $F = \exp(-\hat{f}(\hat{D}))(\sqrt{b + \exp(\hat{f}(\hat{D}))} + \sqrt{b})$  при условии, что  $b = -\hat{f}(\hat{D}) - 1 > 0$ . При  $b = 0$  или  $\hat{f}(\hat{D}) = -1$

$$\hat{f}(\hat{x}) = -2 \ln(\sqrt{e} + (\hat{D} - \hat{x})/\sqrt{2}). \quad (4)$$



**Рис. 1.** Профиль дна зоны проводимости  $E_c(x)$  контакта с барьером Мотта при нескольких приложенных напряжениях.

При отрицательных значениях  $b = -\hat{f}(\hat{D}) - 1 < 0$  решение имеет следующий вид:

$$\hat{f}(\hat{x}) = \ln \frac{-b}{\sin^2(\sqrt{-b/2}(\hat{D} - \hat{x}) + \theta)}, \quad (5)$$

где  $\theta = \arcsin[\sqrt{-b \exp(-\hat{f}(\hat{D}))}]$ . В последнем случае возникают немонотонные решения с минимумом электростатического потенциала

$$\hat{f}_m = \ln(\hat{f}(\hat{D}) + 1). \quad (6)$$

Следует заметить, что физический смысл в (5) имеют значения аргумента синуса в интервале от 0 до  $\pi$ . При приближении к краям интервала значение потенциала неограниченно возрастает.

Приложенное напряжение во всех случаях определяется из следующего соотношения:

$$\mu_s - \mu_m \equiv V = f(0) + \Delta\chi, \quad (7)$$

где  $\mu_s$  и  $\mu_m$  — химические потенциалы соответственно полупроводника и металла,  $\Delta$  — высота барьера Шоттки,  $\chi = kT \ln(N_D/N_c)$ ,  $N_c = 2(2\pi m_e kT/h^2)$  — эффективная плотность состояний в зоне проводимости. На рис. 1 показан ход края зоны проводимости  $E_c(x)$ , рассчитанный на основе формул (3)–(5) при нескольких напряжениях (7). Выбраны параметры  $\Delta = 0.23$  eV,  $D = 100$  nm,  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$ , значения напряжений приведены на рисунке. Видно, что вблизи перехода  $n^+ - i$  поле неоднородно, при прямых смещениях область неоднородности распространяется на весь слой. При увеличении напряжения локальный максимум  $E_c(x)$  перемещается от границы с металлом внутрь  $i$ -слоя.

Это решение описывается выражением (5), откуда можно определить область значений  $\hat{f}(\hat{D})$ , когда максимум  $E_c(x)$  находится внутри  $i$ -слоя. Для этого нужно решить трансцендентное уравнение, допускающее при условии  $\hat{D} \gg 1$  приближенное решение. При

$$\hat{f}(\hat{D}) > \hat{f}_0 \approx \frac{\pi^2}{2(\hat{D} + \sqrt{2e})^2} - 1, \quad (8a)$$

что соответствует напряжениям

$$\hat{V} > \hat{V}_0 \approx \ln \frac{\pi^2}{2(\hat{D} + \sqrt{2e})^2} + \hat{\Delta} + \hat{\chi}, \quad (8b)$$

внутри  $i$ -слоя возникает локальный максимум, связанный с пространственным зарядом носителей тока. Для случая, приведенного на рис. 1, это соответствует напряжению  $V_0 = 0.102$  V. В вакуумной электронике подобный эффект приводит к формированию виртуального катода [8].

### 3. Зависимость тока от напряжения в КБМ

При обсуждении ВАХ диода с барьером Мотта пренебрегаем эффектом снижения высоты барьера за счет сил изображения. Этот эффект является существенным при обратных смещениях, его влияние на обратный ток хорошо изучено [3,4] и может быть учтено впоследствии. Расчет проведем в термоэмиссионном и диффузионном приближениях [3], пренебрегая эффектами непараболичности и несферичности закона дисперсии полупроводника.

В модели термоэмиссии выражение для плотности тока  $j_t$  имеет вид [3]

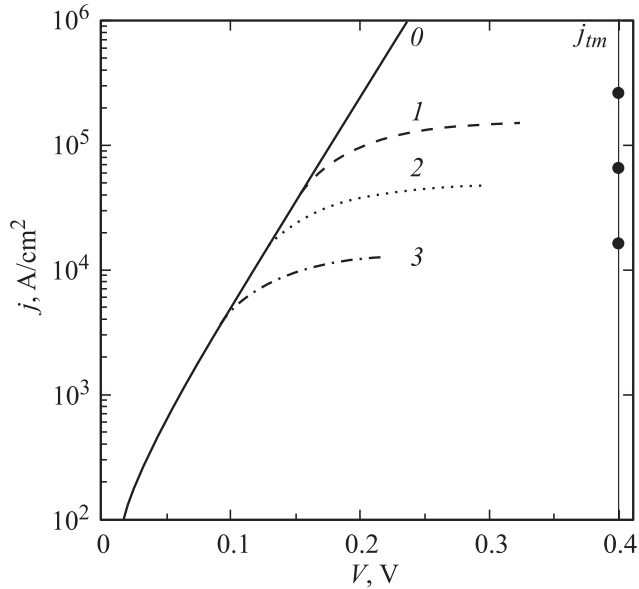
$$j_t = A^* T^2 \exp(-\hat{\Phi}(\hat{V})) (\exp(\hat{V}) - 1), \quad (9)$$

где  $A^* = 4\pi q m k^2 / (2\pi\hbar)^3$  — постоянная Ричардсона. Задача сводится к учету зависимости максимума потенциального барьера  $\hat{\Phi} = q\Phi/kT$  от напряжения. Очевидно, что

$$\hat{\Phi} = \Delta, \quad \hat{V} < \hat{V}_0, \quad (10a)$$

$$\hat{\Phi} = -\ln(\hat{f}(\hat{D}) + 1) + \hat{V} - \hat{\chi}, \quad \hat{V} > \hat{V}_0. \quad (10b)$$

Выражения (5), (7), (9) и (10) дают параметрическую связь тока и напряжения. ВАХ отклоняется от зависимости (9) только при  $\hat{V} > \hat{V}_0$ . Рассчитанные прямые ветви ВАХ при  $\Delta = 0.23$  eV,  $T = 300$  K,  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$  и трех значениях  $D$  — 50, 100 и 200 nm приведены на рис. 2. Основной эффект от учета пространственного заряда состоит в резком ограничении нарастания тока при  $V > V_0$ . При  $\hat{D} \gg 1$  можно оценить величину тока насыщения:  $j_{tm} \approx A^* T^2 \exp(\hat{\chi}) 2\pi^2 / \hat{D}^2$ . Она оказывается обратно пропорциональной квадрату нормированной толщины  $i$ -слоя и не зависит от высоты барьера  $\Delta$ .



**Рис. 2.** Прямые ветви тока контакта с барьером Мотта в модели термоэмиссии ( $\Delta = 0.23$  eV;  $T = 300$  K;  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$ ;  $D$ , nm: 1 — 50, 2 — 100, и 3 — 200). Кривая 0 — без учета пространственного заряда. Точки сплава — максимальные значения плотности тока  $j_{tm}$ .

Расчет тока  $j_d$  в диффузионном приближении основан на вычислении интегралов [3]

$$j_d \cong kT\mu N_c \cdot (\exp(\hat{V}) - 1) \left[ \int_0^D \exp(\hat{E}_c(x)) dx \right]^{-1}, \quad (11)$$

где  $\mu$  — подвижность носителей. Основной вклад в интеграл вносит область вблизи максимума потенциального барьера. Поэтому можно пренебречь небольшим вкладом в интеграл от  $n^+$ -слоя и выбрать для верхнего предела интегрирования значение  $D$ . Для всех решений (3)–(5) интегралы можно вычислить аналитически. В итоге получаем выражения

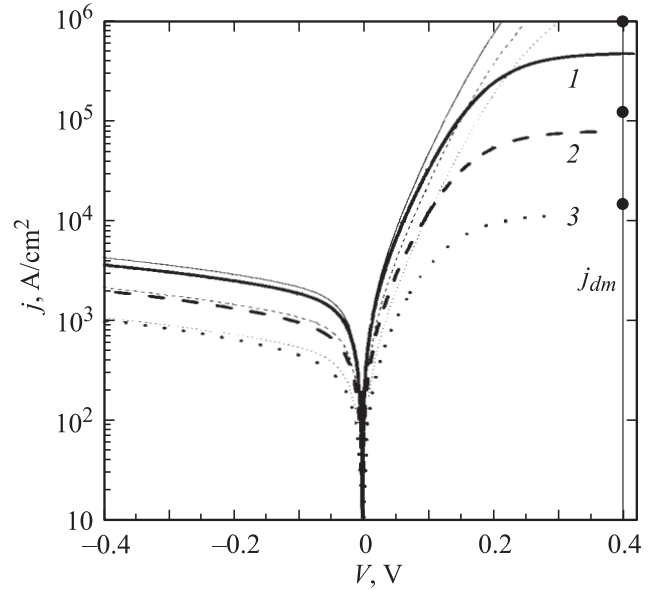
$$j_d \cong \frac{kT\mu N_c \exp(-\hat{\Delta}) (\exp(\hat{V}) - 1)}{D} \times \frac{\exp(-\sqrt{2b} \hat{D}) (F \exp(\sqrt{2b} \hat{D}) - 1)^2}{F^2 \frac{\exp(\sqrt{2b} \hat{D}) - 1}{\sqrt{2b} \hat{D}} - 2F + \frac{1 - \exp(-\sqrt{2b} \hat{D})}{\sqrt{2b} \hat{D}}} \quad (12)$$

при условии  $b = -\hat{f}(\hat{D}) - 1 > 0$  и

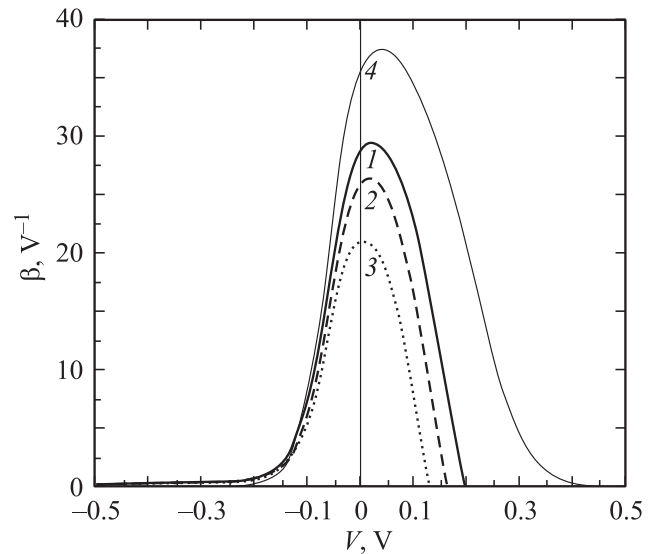
$$j_d \cong \frac{kT\mu N_c \exp(-\hat{\Delta}) (\exp(\hat{V}) - 1)}{D} \times \frac{2 \sin^2(\sqrt{-b/2} \hat{D} + \theta)}{1 - \frac{\sin(\sqrt{-b/2} \hat{D}) \cos(\sqrt{-b/2} \hat{D} + 2\theta)}{\sqrt{-b/2} \hat{D}}} \quad (13)$$

при  $b = -\hat{f}(\hat{D}) - 1 < 0$ , которые вместе с (7) определяют ВАХ. Для выделенного значения  $\hat{f}(\hat{D}) = -1$

решение опускаем. На рис. 3 приведены ВАХ, рассчитанные при  $\Delta = 0.23$  eV,  $T = 300$  K,  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$ ,  $\mu = 4000$  cm $^2$ /V · s и трех значениях  $D$  — 50, 100 и 200 nm. Для сравнения на рисунке тонкими линиями показаны ВАХ, которые получаются при пренебрежении пространственным зарядом, когда электрическое поле в



**Рис. 3.** ВАХ контакта с барьером Мотта в диффузионной модели ( $\Delta = 0.23$  eV;  $T = 300$  K;  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$ ;  $\mu = 4000$  cm $^2$ /V · s;  $D$ , nm: 1 — 50, 2 — 100, и 3 — 200). Тонкие линии — без учета пространственного заряда. Точки сплава — максимальные значения плотности тока  $j_{dm}$ .



**Рис. 4.** Зависимость коэффициента нелинейности  $\beta = j_{VV}/j_V$  от напряжения  $V$  ( $\Delta = 0.23$  eV;  $T = 300$  K;  $N_D = 5 \cdot 10^{17}$  cm $^{-3}$ ;  $\mu = 4000$  cm $^2$ /V · s;  $D$ , nm: 1 — 50, 2 — 100 и 3 — 200). 4 — без учета пространственного заряда.

слаболегированном слое постоянно:

$$j_{d0} \cong \frac{kT\mu N_c \exp(-\hat{\Delta}) (\exp(\hat{V}) - 1)}{D} \frac{\hat{\Delta} + \chi - \hat{V}}{1 - \exp(-\hat{\Delta} - \hat{\chi} + \hat{V})}. \quad (14)$$

Видно, что учет пространственного заряда приводит к отклонению от зависимости (14) и насыщению тока при прямом смещении. При  $\hat{D} \gg 1$  ток насыщения можно оценить как  $j_{dm} \approx 4\pi^2 kT\mu N_D r_d^2 / D^3$ . Величина  $J_{dm} \sim D^{-3}$  и не зависит от высоты барьера  $\Delta$ . При увеличении обратного напряжения зависимость тока от напряжения приближается к линейной. Дифференциальное сопротивление в этой области  $\sim D \exp(\Delta) / kT\mu N_c$ . Несмотря на близость ВАХ к зависимости (14), характеристики нелинейности существенно отличаются при малых напряжениях. Это иллюстрирует рис. 4, где приведены зависимости коэффициента нелинейности  $\beta = j_{VV} / j_V$  от напряжения, рассчитанные для ВАХ (рис. 3). Его величина для идеального диода составляет  $38 \text{ V}^{-1}$  при комнатной температуре, что и наблюдается для зависимости (14), причем величина  $\beta$  не зависит от  $D$ . При учете пространственного заряда КБМ максимальное значение коэффициента нелинейности снижается и начинает зависеть от толщины нелегированной области. Этот результат важен для оптимизации детекторов [2,6], поскольку их сигнал прямо пропорционален  $\beta$ .

## 4. Обсуждение результатов

Применимость термоэмиссионного или диффузионного подхода для описания токопереноса в контактах неоднократно обсуждалось [3,4]. Следует заметить в этой связи, что для прямых смещений  $qV \sim \Delta$  длина свободного пробега носителей тока  $l$  становится сравнимой и много меньше характерного масштаба изменения потенциальной энергии на величину  $kT$ . Можно определить область напряжений, когда  $l < DkT/(\Delta + \chi - qV)$  и справедлива диффузионная модель. Для контактов с небольшой высотой барьера  $\Delta < 0.4 \text{ eV}$  эта область захватывает нулевые напряжения. Поэтому предсказанный эффект уменьшения нелинейности контакта (рис. 4) может быть проверен экспериментально.

Для оценки пределов применимости полученных результатов были проведены численные расчеты потенциала при отличном от нуля легировании барьера Мотта ( $N = N_i$  при  $x < D$ ). Как и следовало ожидать, потенциал слабо меняется, если дебаевская длина  $r_i = \sqrt{\epsilon kT / 4\pi q^2 N_i D}$ . При  $D = 100 \text{ nm}$  и комнатной температуре это примерно соответствует  $N_i \leq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

При решении задачи использовалось предположение в невырожденной статистике носителей тока. Формально это накладывает ограничение на уровень легирования  $n^+$ -слоя. На самом деле полученные аналитические выражения дают хорошее совпадение с численными расчетами и при вырождении в  $n^+$ -слое. Причина в

том, что ток определяется величиной и ходом потенциала вблизи вершины барьера. Его высота, отсчитанная от уровня химического потенциала в полупроводнике, оказывается  $\gg kT$  и только при больших прямых напряжениях  $qV \sim \Delta$  снижается до значений  $\sim 3kT$ . В этих условиях неточное описание потенциала у подножки барьера вблизи  $n^+ - i$ -перехода сравнительно слабо влияет на ток. При  $\Delta = 0.23 \text{ eV}$ ,  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ ,  $N_D = 3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\mu = 4000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  ошибка в токе составляет 20% при  $V = 0.4 \text{ V}$  и не превышает 5% при  $V \leq 0.3 \text{ V}$ .

## 5. Заключение

Получены аналитические выражения для термоэмиссионного и диффузионного описания тока в контактах металл–полупроводник с барьером Мотта при учете пространственного заряда носителей тока в  $i$ -области. В отличие от классического результата Мотта, учет пространственного заряда носителей тока ограничивает рост тока при прямом смещении и снижает нелинейность ВАХ. Это уменьшает величину сигнала при детектировании. Эффекты особенно выражены для контактов с малой высотой барьера  $< 0.4 \text{ eV}$ .

## Список литературы

- [1] N.F. Mott. Proc. Cambr. Phil. Soc. **34**, 568 (1938).
- [2] N.F. Mott. Proc. Roy. Soc. A **171**, 27 (1939).
- [3] E.H. Rhoderick, R.H. Williams. Metal–semiconductor contacts. Clarendon Press, Oxford (1988). 252 p.
- [4] С. Зи. Физика полупроводниковых приборов. Мир, М. (1984). Т. 1. 456 с.
- [5] M. McColl, M.F. Millea. Proc. IEEE **61**, 499 (1973).
- [6] V.I. Shashkin, V.M. Daniltsev, O.I. Khrykin, A.V. Murel, Yu.I. Chechenin, A.V. Shabanov. Proc. Int. Semicon. Dev. Res. Symp. (ISDRS 1997). Charlottesville, USA (1997). P. 147.
- [7] В.И. Шашкин, В.Л. Вакс, В.М. Данильцев, А.В. Масловский, А.В. Мурель, С.Д. Никифоров, Ю.И. Чеченин. Изв. вузов. Радиофизика **48**, 544 (2005).
- [8] Л.Н. Добрецов, М.В. Гомоюнова. Эмиссионная электроника. Наука, М. (1966). 564 с.