

0- 811344

На правах рукописи



Шмаргунов Антон Владимирович

**Нелинейная зависимость высоты барьера
от смещения и природа аномалий
характеристик контактов с барьером Шоттки**

01.04.10 – Физика полупроводников

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2015

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», на кафедре физики полупроводников.

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
Божков Владимир Григорьевич

Официальные оппоненты:

Шашкин Владимир Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики микроструктур Российской академии наук, отдел технологии наноструктур и приборов, заведующий отделом

Троян Павел Ефимович, доктор технических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники», кафедра физической электроники, заведующий кафедрой

Ведущая организация: федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск

Защита состоится 24 сентября 2015 г. в 14³⁰ ч. на заседании диссертационного совета Д 212.267.07, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» www.tsu.ru.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ: www.tsu.ru/content/news/announcement_of_the_dissertations_in_the_tsu.php

Автореферат разослан «24» мая 2015г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Киреева
Ирина Васильевна

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Контакт металл-полупроводник (КМП) с барьером Шоттки (БШ) является основой широкого круга электронных устройств. Хорошо известно, что, несмотря на определённо установленный механизм токопрохождения в контактах с барьером Шоттки их вольтамперные характеристики (ВАХ) во многих ситуациях имеют значительные отклонения от теоретического поведения. Наиболее популярными для объяснения аномалий электрических характеристик стали в последние два десятилетия идеи о неоднородности высоты барьера в контакте. На этой основе разработаны две широко известные модели: модель Вернера-Гютлера с гауссовским распределением высоты барьера в контакте и зависимостью параметров распределения от смещения и модель неоднородности высоты барьера в виде так называемых «седловых точек» (модель Танга). Однако, несмотря на формальное согласие с экспериментом, прежде всего в части объяснения известной «низкотемпературной аномалии» и некоторых других особенностей ВАХ, во многих случаях это согласие является результатом обилия подгонных параметров и/или следствием недостаточно убедительных физических предположений.

В последнее десятилетие выполненные в нашем институте исследования показали, что причиной многих «аномалий» ВАХ контактов с БШ (в том числе наиболее известной «низкотемпературной аномалии») является общее свойство всех контактов с БШ, которое практически не учитывалось раньше при анализе экспериментальных ВАХ – нелинейная зависимость (нелинейность) высоты барьера от смещения, физическая природа которой может быть самой различной. Подход к анализу ВАХ контактов на основе учёта нелинейности высоты барьера позволяет не только указать на неточности, а в некоторых случаях и ошибки традиционных подходов, но и получить новые важные результаты, например, в самом представлении характеристик контактов. При этом речь идёт не только о реальных контактах, характеристики которых испытывают существенное влияние технологии и материала, но и об «идеальных», например, туннельных контактах, где возможно только интегральное представление ВАХ. В таких контактах нелинейность высоты барьера имеет фундаментальное происхождение: она связана с эффектом сил изображения и эффектом туннелирования.

Что же касается реальных контактов, где нелинейность высоты барьера может быть выражена значительно ярче, то в качестве её причины в настоящей работе использовано представление о неоднородном распределении по энергии интерфейсных состояний в контакте (в виде «хвостов» плотности состояний, спадающих от краёв запрещённой зоны к её середине). Может показаться невероятным, но эта модель распределения, которая так широко используется в теории кремниевых MOS-структур, в известной литературе



практически не привлекалась для объяснения характеристик контактов с БШ, кроме небольшого числа работ, выполненных в нашем институте.

Таким образом, в качестве альтернативы моделям неоднородности высоты барьера предлагаются модель контакта с промежуточным слоем (будем называть её моделью Бардина, МБ) и поверхностными электронными состояниями (ПЭС), распределёнными по энергии (см. выше) и модель тесного контакта (МТК) без промежуточного слоя при наличии спектра приповерхностных состояний (ППС), распределённых не только по энергии, но и по координате вглубь полупроводника. Оба типа состояний находятся в равновесии (т.е. взаимодействуют) с полупроводником в отличие от состояний, взаимодействующих с металлом и закрепляющих уровень Ферми. (Иногда для обозначения тех и других состояний используется название интерфейсных состояний, ИС.) Существенным при анализе модели тесного контакта был учёт наряду с ППС эффекта сил изображения и туннелирования. Их влияние оказалось повышенным из-за значительной деформации вершины барьера под влиянием заряда ППС. Наряду с теоретическим анализом было проведено достаточно широкое экспериментальное исследование реальных контактов М-n-GaAs и сравнение тех и других результатов.

Описанные выше вопросы стояли в центре внимания работы. Но важное значение имел и непосредственный анализ возможностей наиболее широко распространённой модели неоднородности высоты барьера в виде «седловых точек» для объяснения реальных ВАХ. Иначе говоря, сравнение предложенных нами моделей с наиболее известной. Этот анализ показал противоречивость указанной модели, а в ряде случаев и противоречие её экспериментальным данным.

Наконец, одной из проблем является то, что экспериментальные исследования электронной структуры контакта металл-полупроводник сводятся в основном к исследованию вольт-фарадных характеристик, интерпретация которых не менее сложна, чем самой ВАХ. В связи с этим, важная часть работы была посвящена новому оригинальному исследованию реальных контактов М-П на основе атомно-силовой микроскопии (АСМ) с использованием метода зонда Кельвина (МЗК).

Целью диссертационной работы является построение на основе учёта нелинейной зависимости высоты барьера от смещения и свойств интерфейсных электронных состояний модели контакта металл-полупроводник, максимально полно описывающей и объясняющей указанные аномалии ВАХ. Исследование, с данной точки зрения, влияния морфологии контакта на его электрические характеристики. Поиск иных (помимо ВАХ и ВФХ) экспериментальных возможностей оценки плотности интерфейсных состояний. Для этого были поставлены и решены следующие задачи:

1. Усовершенствованы имеющиеся и разработаны новые методы анализа экспериментальных ВАХ;



2. Прделано дальнейшее развитие модели реального контакта металл-полупроводник на основе учёта нелинейной зависимости высоты барьера от смещения, вызванной эффектом сил изображения, влиянием туннельного тока и неоднородным распределением по энергии приповерхностных состояний в контакте;

3. Сделана проверка основных следствий модели на достаточно широком экспериментальном материале: на характеристиках электрохимических контактов n -GaAs с Au и Ni, мало изученных контактов с Rh, и оригинальных контактов с Ir, технология которых создана в рамках данной работы;

4. Проведено детальное исследование, анализ и демонстрация противоречий наиболее распространённой в литературе альтернативной модели контакта – модели «седловых точек» и сравнение её возможностей с возможностями развиваемой нами модели;

5. Разработана оригинальная методика исследования КМП на основе АСМ-микроскопии с использование метода зонда Кельвина и впервые получены результаты, подтверждающие роль интерфейсных состояний в модификации свойств контактов.

Научная новизна работы:

1. Теоретический анализ и экспериментальная проверка подтвердили, что наиболее общий подход в описании вольтамперных характеристик реальных контактов может быть реализован на основе учёта нелинейной зависимости высоты барьера от смещения. Наиболее вероятной причиной, вызывающей нелинейность высоты барьера в реальных контактах, является неоднородное по энергии распределение интерфейсных состояний.

2. Получено выражение, содержащее реальную высоту барьера и описывающее экспериментальные вольтамперные характеристики в широком диапазоне температур, концентраций примеси в полупроводнике и диаметров контакта.

3. Впервые в рамках модели неоднородности высоты барьера в виде седловых точек проведено численное моделирование дисперсии высоты барьера для набора контактов металл-полупроводник, получено точное выражение для показателя идеальности и показано наличие существенных ограничений возможности данной модели в описании экспериментальных вольтамперных характеристик при комнатной температуре и показателе идеальности $< 1,1$.

4. Одновременное исследование морфологии, экспериментальных электрических характеристик и проведённый расчёт позволяют связать появление краевых эффектов с упругими напряжениями и объяснить зависимости высоты барьера от показателя идеальности флуктуациями механических напряжений, которые, вероятно, вызывают флуктуации плотности донорных состояний.

5. Впервые показано, что сканирование поверхности контакта металл-полупроводник кантилевером при наличии смещения на барьере Шоттки приводит к заряджению сканированной области и изменению её контактного потенциала. Экспериментально показано, что атомно-силовую микроскопию с методом зонда Кельвина можно использовать для исследования интерфейсных состояний контактов металл-полупроводник.

Практическая значимость. Разработаны методики анализа ВАХ, позволившие ускорить отработку эффективного способа осаждения иридия на арсенид галлия и получить совершенные выпрямляющие контакты.

Обоснованные модели, объясняющие основные закономерности поведения характеристик контактов с БШ, создают возможности более целенаправленной и эффективной работы по повышению качества контактов с БШ.

Предложенный в работе способ АСМ-зарядки поверхности полупроводника может быть основой новой техники литографии для прикладных целей.

Экспериментально показано, что АСМ-зарядку можно использовать для оценки плотности состояний.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Предложенное, на основе учёта нелинейной зависимости высоты барьера от смещения, обусловленной эффектом сил изображения и влиянием туннельной составляющей, простое выражение описывает ВАХ идеального контакта металл-полупроводник в широком диапазоне температур, концентраций примеси полупроводника, диаметров контактов.

2. В реальных контактах металл-полупроводник нелинейная зависимость высоты барьера от смещения, позволяющая объяснить основные особенности ВАХ, обусловлена неоднородным по энергии распределением интерфейсных состояний; связь измеряемой высоты барьера и показателя идеальности для набора однотипных контактов обусловлена флуктуациями плотности состояний.

3. Модель неоднородности высоты барьера в виде «седловых точек» (модель Танга) отличается противоречивостью и не способна описать экспериментальные ВАХ при комнатной температуре и показателе идеальности $< 1,1$.

4. Сканирование поверхности контакта металл-полупроводник кантилевером АСМ в контактном режиме при наличии смещения на барьере Шоттки приводит к заряджению интерфейсных состояний контакта металл-полупроводник и изменению контактного потенциала.

Апробация работы:

Основные результаты докладывались на конференции: CriMiCo 2011 – 21st International Crimean Conference: Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings (12-16 Sep., 2011, Sevastopol, Crimea, Ukraine).

Публикации:

По теме диссертации опубликовано 5 статей в научных рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК [1-5]. Все в зарубежных журналах, включенных в Web of Science и Scopus: Journal of Applied Physics (4-е публикации), Microelectronic Engineering (1-а публикация). Опубликован 1 тезис в материалах международной конференции [6]. Представленные в работе методики способствовали эффективной разработке высококачественных контактов Ir-GaAs, полученные электрохимическим осаждением. На способ осаждения оформлен патент [7].

Личный вклад автора.

Автором проведена разработка алгоритмов и соответствующего программного обеспечения для численной проверки известных моделей. Проведены все численные расчёты и основные эксперименты. Впервые для исследования интерфейса КМП автором был разработан и использован метод АСМ с МЗК. Кроме того автор принимал активное участие в общем планировании работы, в планировании и проведении экспериментов, в дальнейшем развитии моделей и в обсуждении результатов.

Структура и объем диссертации.

Диссертационная работа состоит из введения, 5 разделов, заключения и 5 приложений. Общий объем диссертации 152 страницы, из них 128 страниц текста и 13 страниц приложений, включая 68 рисунков и 5 таблиц. Библиографический список включает 138 наименований на 11 страницах.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель работы и пути её достижения, представлены выносимые на защиту положения, описана структура диссертации.

Первый раздел представляет собой обзор литературных данных по теме диссертации. Здесь приведены современные представления об особенностях переноса заряда в КМП с БШ с учётом целого ряда факторов. В том числе: фундаментальные эффекты – сил изображения и туннелирования через барьер, наличие неоднородности высоты барьера, промежуточного слоя и интерфейсных состояний. Представлены основные соотношения, термины и определения. Наиболее важным здесь являются способы определения высоты барьера из ВАХ, т.к. в литературе существует некоторая путаница в этих понятиях. Любая ВАХ КМП может быть представлена в самом общем виде:

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

где A – площадь контакта, R^* – постоянная Ричардсона, q – заряд электрона, k – константа Больцмана, T – температура. Так определяется эффективная высота барьера φ_b , которая, в случае учёта эффекта туннелирования, естественно меньше реальной высоты барьера φ_{bi} :

$$\varphi_{bi} = V_m + \varphi_s. \quad (2)$$

Здесь V_m – максимум потенциала в барьере, $q\varphi_s$ – энергетический интервал между дном зоны проводимости и уровнем Ферми.

Согласно классическому способу, измеряемая по току насыщения, высота барьера φ_{bm} определяется касательной к ВАХ:

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_{bm}}{kT}\right) \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right). \quad (3)$$

Установлена связь между этими высотами барьера ($\varphi_b|_{I=const} \equiv \varphi_{bi}$) [1*]:

$$\varphi_{bi} = n\varphi_{bm} - (n-1) \frac{kT}{q} \ln \frac{AR^*T^2}{I}, \quad (4)$$

означающая, что только для идеального контакта ($n \rightarrow 1$) измеряемая высота барьера равна эффективной и обе они равны реальной.

Кроме того в данном разделе были кратко изложены основы атомно-силовой микроскопии с использованием метода зонда Кельвина и примеры использования данной методики для исследований плотности ловушек в различных структурах.

Во втором разделе рассмотрено явление нелинейной зависимости высоты барьера от смещения, а также возможные его проявления при традици-

онных способах анализа ВАХ: появлении размерных эффектов в контакте и низкотемпературная аномалия ВАХ.

На основе нелинейной зависимости высоты барьера от смещения проведено чёткое разделение в терминологии высот барьеров, широко используемых в практике исследований: измеряемой из ВАХ по току насыщения высоты барьера φ_{bm} , зависящей от показателя идеальности; эффективной высоты барьера φ_b , также определяемой из ВАХ, но не зависящей от показателя

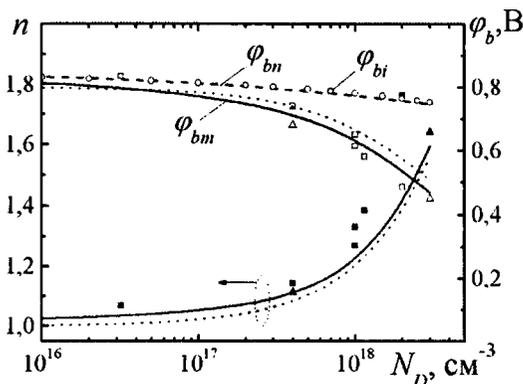


Рисунок 1 – Экспериментальные (значки) [2*] и расчётные (линии) зависимости высоты барьера и показателя идеальности контактов Pt-Ti-GaAs от концентрации легирующей примеси; пунктирные линии – расчёт, сделанный в [2*]

идеальности; реальной высоты барьера φ_{bi} – максимума потенциала в ОПЗ, отсчитанного от уровня Ферми.

Детальный численный анализ прямой ВАХ «идеального» контакта с учётом эффекта сил изображения и туннелирования в широком диапазоне температур, диаметров контактов и концентраций легирующей примеси показал близкое совпадение с экспериментальными данными, полученными в [2*] (рисунок 1). Результаты исследования позволяют сделать вывод, что известное чисто эмпирическое выражение:

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_{bn}}{nkT}\right) \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right), \quad (5)$$

не лишено оснований и величина $\varphi_{bn}=n\varphi_{bm}$ действительно близка к реальной высоте барьера φ_{bi} , благодаря чему ВАХ можно представить в виде:

$$I = AR^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_{bi}}{nkT}\right) \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right), \quad (6)$$

содержащем реальную (максимум потенциала), а не измеряемую высоту барьера.

Результаты второго раздела опубликованы в работах [2, 6].

В разделе третьем на примере реального контакта были проанализированы модели интерфейсных состояний, находящихся в равновесии с полу-

проводником: модель Бардина и модель тесного контакта. Спектр состояний представлялся в виде «хвостов» состояний, спадающих к середине запрещённой зоны от её краёв (U -образная форма).

Проверка моделей проводилась на контактах Au-GaAs, Ni-GaAs и Ir-GaAs.

Экспериментальные ВАХ для контактов Au-n-GaAs с диаметрами 500, 50 и 5 мкм (рисунок 2) с высокой точностью аппроксимируются теоретическими зависимостями на основе модели Бардина и модели тесного контакта с одной и той же системой интерфейсных состояний (ИС) и приповерхностных состояний (ППС), соответственно, для всех диаметров. В случае МБ основные параметры распределения: концентрация вблизи границ запрещённой зоны – $N_s^0 = 1,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$, постоянная спада по энергии – $E_0 = -0,25 \text{ эВ}$ и ширина промежуточного слоя – $\delta_i = 10^{-7} \text{ см}$; для МТК: $N_s^0 = 1,2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$, $E_0 = -0,17 \text{ эВ}$, постоянная спада по координате (~длина распространения состояний вглубь полупроводника) – $\lambda = 8 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.

Все экспериментальные зависимости параметров ВАХ вполне удовлетворительно аппроксимируются расчётными в рамках обеих рассматриваемых моделей контакта (рисунок 3) с той же системой параметров ИС и ППС,

Рисунок 2 – Экспериментальные (значки) и рассчитанные в соответствии с МБ и МТК (линии) ВАХ контактов Au-GaAs

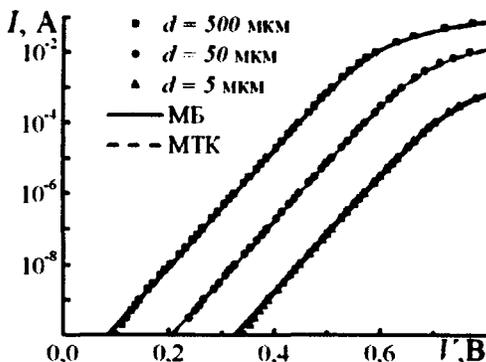


Рисунок 2 – Экспериментальные (значки) и рассчитанные в соответствии с МБ и МТК (линии) ВАХ контактов Au-GaAs

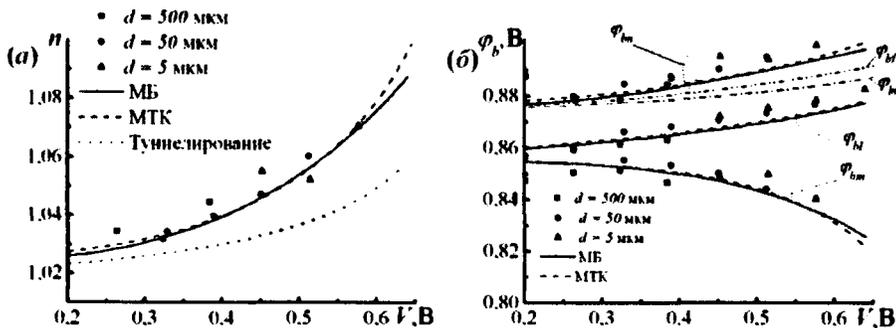


Рисунок 3 – Экспериментальные (значки) и рассчитанные в соответствии с МБ и МТК (линии) зависимости параметров ВАХ контактов Au-GaAs от смещения: показателя идеальности (n) и высот барьеров (ϕ)

которая определена на рисунке 2. Здесь хорошо видна разница между различными способами определения высоты барьера из ВАХ. Высота барьера, измеряемая по току насыщения касательной к ВАХ φ_{bn} (3), зависит от показателя идеальности n , в связи с этим, падает с ростом смещения.

Отклонение φ_{bn} от реальной высоты барьера φ_{bi} (рисунок 3б) в рамках МТК, также как и для туннельного контакта, незначительно. Это означает, что изначально предложенное для идеального контакта с учётом эффектов туннелирования и сил зеркального изображения выражение (6) эффективно описывает и реальный контакт с относительно невысокой концентрацией легирующей примеси и в присутствии ППС.

Нелинейность высоты барьера, обусловленная неоднородным по энергии распределением ИС (для МБ) и ППС (для МТК), полностью объясняет размерные эффекты в контактах Au-GaAs: рост показателя идеальности и падение измеряемой по току насыщения высоты барьера с уменьшением диаметра контакта (рисунок 4).

Аналогичная картина наблюдается в контактах Ni-GaAs (рисунок 5) и Ir-GaAs (рисунок 6). ВАХ и их параметры хорошо аппроксимируются расчё-

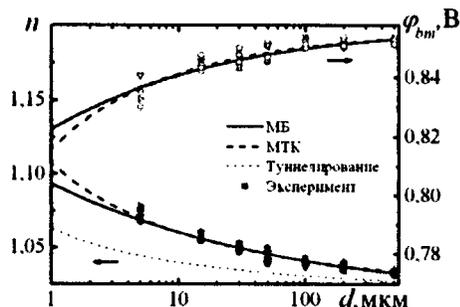


Рисунок 4 – Экспериментальные (значки) и рассчитанные в соответствии с МБ и МТК (линии) зависимости параметров ВАХ контактов Au-GaAs от диаметра контакта

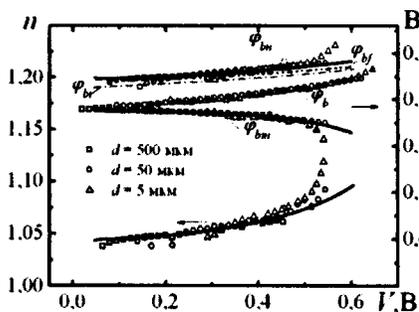


Рисунок 5 – Зависимости экспериментальных (значки) и расчётных в соответствии с МТК (сплошные линии) параметров прямой ВАХ контактов Ni-GaAs от смещения

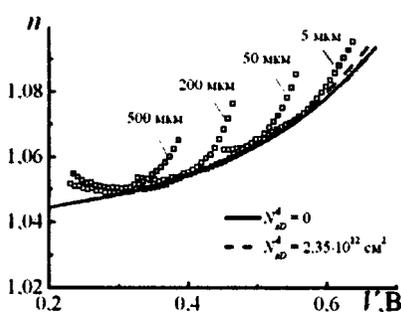


Рисунок 6 – Экспериментальные (значки) и расчётные в соответствии с МТК (сплошные линии) зависимости $n(V)$ для контактов Ir-GaAs

том.

Контакты Ni-GaAs характеризуются чувствительностью контактов малого диаметра к удалению защитного SiO₂ с периферии контакта, тем более высокой, чем меньше диаметр. В контактах диаметром 5 мкм при удалении диэлектрика дисперсия высоты барьера существенно уменьшается, а средняя высота барьера увеличивается (рисунок 7). Таким образом, мы наблюдаем краевой эффект. Подобные эффекты известны из литературы и объясняются обычно упругими механическими напряжениями (УМН) в контакте, которые формируются под влиянием напряжений в металле и периферийном диэлектрике.

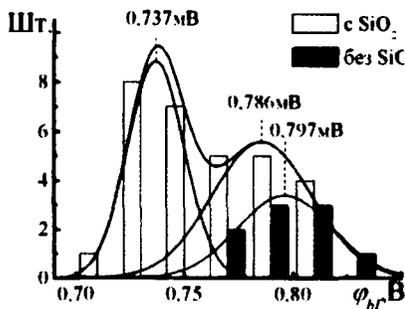


Рисунок 7 – Распределение эффективной высоты барьера в контактах Ni-GaAs диаметром 5 мкм

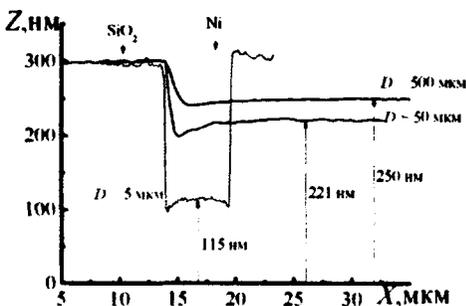


Рисунок 8 – Распределение толщины никелевых осадков в сечении контактов с различным диаметром

Благодаря АСМ исследованию (рисунок 8) мы видим, что особенность осаждения никеля такова, что толщина плёнки в малых контактах существенно меньше. Весьма вероятно, что именно это уменьшение толщины является причиной большей чувствительности малых контактов к удалению SiO₂. Можно предположить, что благодаря меньшим внутренним напряжениям тонкая металлическая плёнка в таких контактах подвергается большому воздействию УМН, созданными периферийным диэлектриком.

Одна из существенных и наиболее общих характеристик КМП – связь измеряемой высоты барьера ϕ_{bm} и показателя идеальности для набора однотипных контактов. Как правило, данная зависимость объясняется присутствием различного типа неоднородности высоты барьера. В рамках моделей с ИС рост значений n и уменьшение высот барьеров ϕ_{bm} и ϕ_{bl} для набора контактов Ni-GaAs диаметром 5 мкм (рисунок 9) могут быть полностью объяснены флуктуациями плотности донорных состояний в верхней части запрещённой зоны с $5 \cdot 10^{12}$ до $7 \cdot 10^{13}$ см⁻²эВ⁻¹, при неизменных других параметрах. По сути, предлагается модель неоднородного распределения ИС по поверхности полупроводника. Указанные зависимости $\phi_{bm}(n)$ и $\phi_{bl}(n)$ одинаково

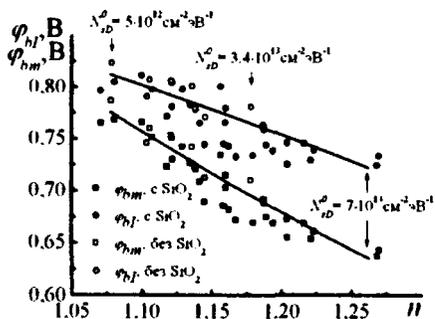


Рисунок 9 – Связь высот барьера φ_{hm} и φ_{hj} с показателем идеальности для набора контактов Ni-GaAs диаметром 5 мкм и соответствующий расчёт в рамках МТК

20-50 нм. Это может способствовать однородности осадка и меньшим механическим напряжениям в контакте. И действительно дисперсия высоты барьера в контактах Ir-GaAs существенно меньше, чем в никелевых и даже золотых контактах, которые благодаря пластичности металла должны иметь в этом смысле лучшие характеристики (рисунок 10).

В целом можно утверждать, что проведённые экспериментальные исследования показали более чем удовлетворительное согласие расчётных и экспериментальных зависимостей, что позволяет говорить о достаточной физической обоснованности предлагаемых моделей для интерпретации характеристик КМП. Все исследованные контакты Au-GaAs, Ni-GaAs, Ir-GaAs демонстрируют характерные признаки нелинейной зависимости эффективной высоты барьера φ_b от смещения и влияние этой зависимости на поведение измеряемых и вычисляемых параметров контакта: n , φ_{hm} , φ_b и φ_{bn} . Модели интерфейсных состояний в отличие от моделей неоднородности высоты барьера хорошо объясняют зависимость параметров ВАХ от смещения. Причиной изменения значений n и φ_{bn} в 5-микронных контактах могут быть флуктуации плотности ИС или ППС.

хорошо описывают поведение параметров контактов при наличии диэлектрика по периферии контакта и без него (в последнем случае предельная плотность донорных состояний падает до $3.4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{В}^{-1}$). Это может свидетельствовать в пользу того, что УМН воздействуют на плотность состояний и при удалении диэлектрика она уменьшается.

Контакты Ir-GaAs представляют особый интерес, т.к. имеют мелкодисперсную структуру. Средний размер зерна варьируется в пределах

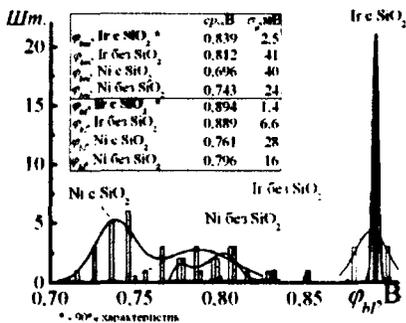


Рисунок 10 – Распределение эффективной высоты барьера в контактах Ir-GaAs и Ni-GaAs диаметром 5 мкм

Результаты третьего раздела опубликованы в работах [1, 3, 4, 7]

В четвёртом разделе проведён детальный анализ возможностей модели Танга неоднородности высоты барьера в виде седловых точек в описании экспериментальных ВАХ и их параметров. Данная модель в настоящее время наиболее популярна при объяснении аномалия ВАХ. Анализ проводился на основе зависимости показателя идеальности от поданного смещения.

Суть модели состоит в наличии на поверхности КМП участков с пониженной высотой барьера – патчей. В результате взаимодействия потенциала данных участков с окружающим потенциалом образуется седловая точка.

Наиболее интересный и часто используемый случай для большого числа патчей, имеющих гауссовское распределение по характеристическому параметру (γ), определяемому радиусом патча (R_0) и величинной понижения высоты барьера в данной области (Δ): $\gamma = 3(R_0^2 \Delta / 4)^{1/3}$. Основные параметры модели: c – плотность патчей на поверхности полупроводника ($\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$) и σ_γ – среднеквадратичное отклонение γ в распределении Гаусса ($\sim 5 \cdot 10^{-5} \text{ В}^{1/3} \text{ см}^{2/3}$). ВАХ такого контакта имеет вид [3*]:

$$I_{\text{tot}} \approx J_{\text{idl}} \left\{ 1 + \frac{4}{9} \pi c \sigma^2 \left(\frac{\eta}{V_\phi} \right)^{1/3} \exp \left(\frac{\beta^2 \sigma_\gamma^2}{2} \left(\frac{V_\phi}{\eta} \right)^{2/3} \right) \times \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\beta \sigma_\gamma}{\sqrt{2}} \left(\frac{V_\phi}{\eta} \right)^{1/3} \right) \right] \right\}. \quad (7)$$

Здесь $I_{\text{idl}} = A \cdot J_{\text{idl}}$, J_{idl} – плотность тока в однородной части контакта с высотой барьера ϕ_s^0 , A – полная площадь контакта, $\beta = q/kT$, $\eta = \epsilon_s/qN_D$, $V_\phi = \phi_s^0 - V - \phi_s$ – изгиб зон в однородной части контакта.

Было получено выражение полной площади неоднородной части контакта:

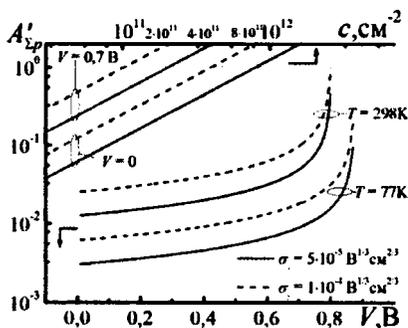


Рисунок 11 – Зависимости эффективной относительной суммарной площади неоднородной части контакта A'_{zp} (8) от смещения ($c = 10^{10} \text{ см}^{-2}$) и плотности патчей c ; $N_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$

$$A_{zp} = A \cdot A'_{zp} = A \frac{4}{9} \frac{\sigma_\gamma c}{\beta} \sqrt{2\pi} \left(\frac{\eta}{V_\phi} \right)^{2/3}, \quad (8)$$

(рисунок 11). Используя это выражение, удалось сформулировать условие применимости модели:

$$c < \frac{9}{16} \frac{\beta \sqrt{\pi}}{\sigma_\gamma \sqrt{2}} \left(\frac{V_\phi}{\eta} \right)^{2/3}, \quad (9)$$

согласно которому максимальная плотность патчей для стандартных σ_γ составляет $\sim 1,5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

Получено точное выраже-

ние показателя идеальности ВАХ модели неоднородности в виде седловых точек:

$$n_{\text{tot}} = \left\{ 1 - \frac{A'_{sp}}{3\beta V_{\phi}} \frac{[2Z_1^2 V_{\phi}^{2/3} (Z_2 + 1) - Z_2]}{1 + A'_{sp} Z_2} \right\}^{-1}, \quad (10)$$

где

$$\begin{cases} Z_1 = \frac{\beta\sigma}{\sqrt{2\eta}^{1/3}}, \\ Z_2 = Z_1 \sqrt{\pi} V_{\phi}^{1/3} \exp(Z^2 V_{\phi}^{2/3}) [1 + \text{erf}(Z V_{\phi}^{1/3})] \cong 2Z_1 \sqrt{\pi} V_{\phi}^{1/3} \exp(Z_1^2 V_{\phi}^{2/3}). \end{cases} \quad (11)$$

Показано, что точное выражение для показателя идеальности ВАХ (10) при комнатной температуре и показателя идеальности < 1,1 даёт отрицательный наклон зависимости $n(V)$ и, таким образом, не соответствуют экспериментальным значениям n для исследованных контактов Au-GaAs, Ni-GaAs,

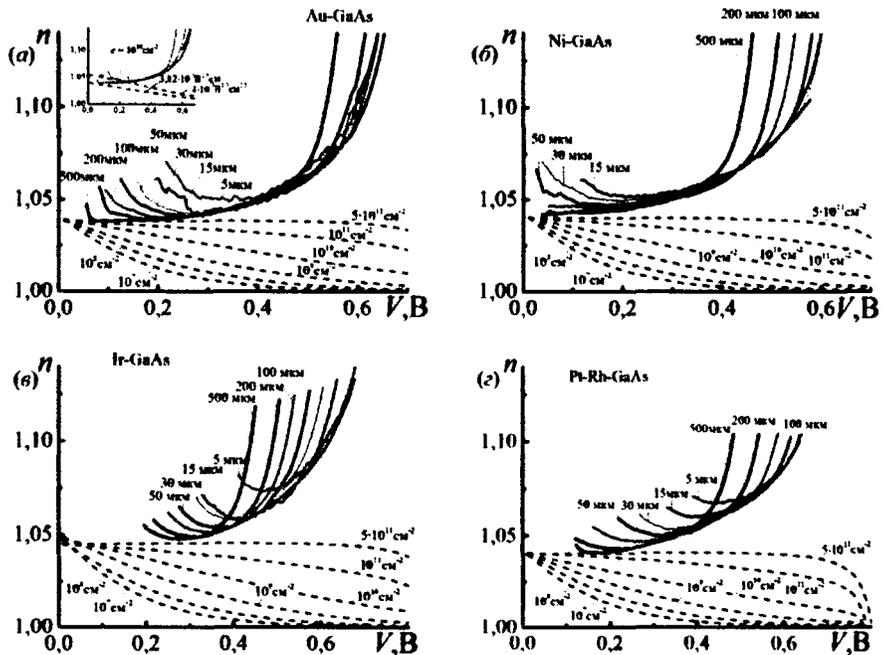


Рисунок 12 – Экспериментальные (сплошные линии) и рассчитанные по (10) (штриховые линии) зависимости $n(V)$ для контактов Au-GaAs (а), Ni-GaAs (б), Ir-GaAs (в), Pt-Rh-GaAs (г);

Ir-GaAs, Pt-Rh-GaAs в широком диапазоне концентраций патчей: 10^7 – $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ (рисунок 12). Нужно отметить, что, как было показано в работе, учёт влияния сопротивления может сказаться только для напряжений $> 0,6 \text{ В}$ и не может объяснить отрицательного наклона зависимости показателя идеальности от смещения при меньших напряжениях.

Экспериментальные зависимости показателя идеальности для разных диаметров контактов укладываются на единую кривую (исключая отклонения обусловленные токами утечки и влиянием сопротивления), как и было предсказано в рамках модели, учитывающей нелинейность высоты барьера.

Проведённый анализ модели Танга обнаружил существенно большее влияние концентрации на величину показателя идеальности, чем наблюдается в эксперименте. Так рост N_D с 10^{16} см^{-3} до $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ увеличивает показатель идеальности с 1,011 до 1,122 ($V = 0$), что в реальных контактах не замечено.

Анализ активно используемого в литературе приближённого выражения для показателя идеальности ВАХ контакта с неоднородностью в виде «седловых точек» (7) [3*]:

$$n_T = 1 + \frac{\beta \sigma_\gamma^2}{3\eta^{2/3} V^{1/3}} \quad (12)$$

обнаружил значительные расхождения с расчётом согласно точному выражению (10).

В данной работе впервые проведено прямое численное моделирование ВАХ набора контактов (подобно эксперименту до 50 контактов каждого диаметра), с использованием генератора псевдослучайных чисел (ГПСЧ), соответствующим образом изменённого для получения распределения Гаусса, в условиях наличия неоднородности по типу Танга с распределением Гаусса по параметру γ .

Сравнение с экспериментальными значениями среднеквадратичного отклонения измеряемой высоты барьера (σ_ϕ) показывает, что для величин параметров, наиболее часто встречающихся в литературе, расчётные кривые оказываются на один два порядка ниже (рисунок 13). В отдельных случаях моделируемые значения σ_ϕ близки к экспериментальным, но показатель идеальности для данных значений параметров модели оказыва-

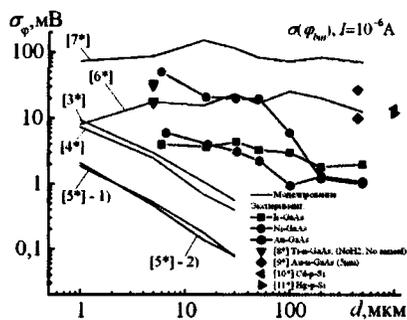


Рисунок 13 – Экспериментальные (значки) и смоделированные (сплошные линии) зависимости среднеквадратичного отклонения от диаметра контакта

ется $> 1,2$. Кроме того на данных кривых наблюдается уменьшение средне-квадратичного отклонения в контактах малого диаметра из-за небольшой плотности патчей $c \sim 10^7 \text{см}^{-2}$. Подобной картины в эксперименте не наблюдается.

Таким образом, модель Танга неоднородности высоты барьера в виде седловых точек не может описать экспериментальные характеристики при комнатной температуре и показателе идеальности $< 1,1$. Хотя при низкой температуре (77 К) она даёт результаты качественно, а иногда количественно, близкие к реальным.

Отдельные результаты четвёртого раздела опубликованы в работе [3].

В пятом разделе представлено явление заряжения сканированной области КМП в процессе пропускания тока при прохождении АСМ-зонда.

В данной работе впервые сделана целенаправленная попытка применить метод АСМ-зарядки к исследованию структуры с БШ – Au-n-GaAs. Метод состоит в пропускании тока при постоянном смещении через контакт с последующим измерением контактной разности потенциала (КРП) методом зонда Кельвина (МЗК), т.е. в бесконтактном режиме.

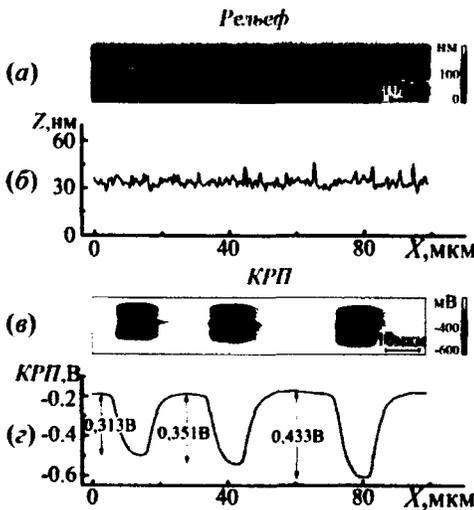


Рисунок 14 – АСМ-изображение рельефа поверхности и КРП после зарядки

АСМ-изображение рельефа и КРП поверхности контакта Au-n-GaAs вместе с сечениями этих изображений в вертикальной плоскости представлены на рисунке 14. Напряжение смещения в процессе зарядки $V_r = -10$ В. Первая, вторая и третья области с изменённым потенциалом (слева направо) на рисунке 14в и рисунке 14г соответствуют одному, двум и трём циклам зарядки участка поверхности площадью 10×10 мкм. Обработка поверхности металла в растворе $\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O} = 1:10$ качественно не изменяет картину.

Величина V_{ind} (индуцированный потенциал) растёт с ростом времени сканирования и ростом обратного смещения. Среднее время зарядки составляет ~ 2 мкс. Скорость же разрядки – сотни часов. Это позволяет создавать сложный рисунок потенциала (рисунк 15).

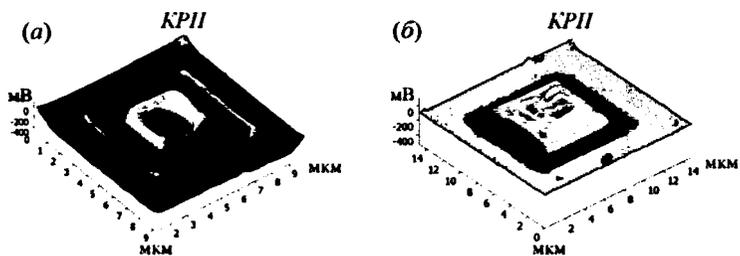


Рисунок 15 – Примеры модификации потенциала

Подтверждением того что заряд скапливается именно на границе КМП, является больший индуцированный потенциал в структурах с более тонкой металлизацией.

Поляризованные участки поверхности золота обнаружили ещё одно удивительное свойство – изменение химической активности. Как оказалось, скорость их травления выше, чем на остальной поверхности. Это позволяет формировать сложный рельеф (рисунок 16) и может служить основой для новой методики литографии.

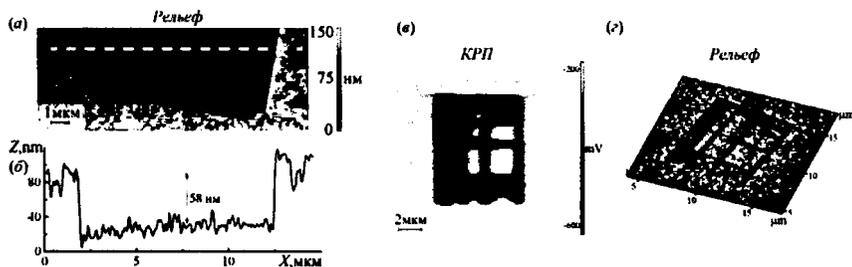


Рисунок 16 – Литография на основе АСМ-зарядки

В рамках данной работы представленное явление имеет особое значение с точки зрения оценки состояния интерфейса контакта металл-полупроводник.

Были изготовлены две структуры. В первом случае финальная обработка перед осаждением золота состояла только в декапировке в растворе серной кислоты с последующей промывкой. Во втором – в обработке в аммиачно-перекисном растворе и в растворе $\text{NH}_4\text{OH}:\text{H}_2\text{O} = 1:5$.

Как известно из литературы, сернокислотная обработка оставляет на поверхности GaAs элементный мышьяк. После второй обработки элементный As на поверхности отсутствует.

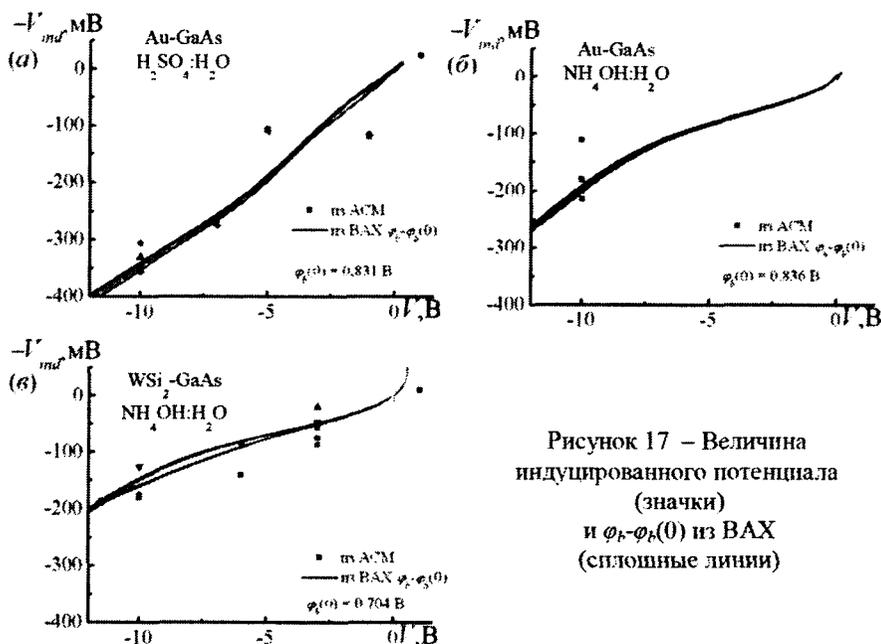


Рисунок 17 – Величина индуцированного потенциала (значки) и $\phi_b - \phi_b(0)$ из ВАХ (сплошные линии)

И действительно, при напряжении зарядки (-10 В), после сернокислотной обработки изменение КПП составляет ~350 мВ (рисунок 17а), а после аммиачной обработки изменение КПП уже 180-200 мВ (рисунок 17б). Обращает внимание хорошее совпадение потенциала зарядки, полученного с помощью АСМ, и изменения эффективной высоты барьера, полученного из ВАХ данного контакта (линии на рисунке). Для сравнения также приведены данные по контактам WSi₂-GaAs, полученным магнетронным распылением, также после аммиачной обработки (рисунок 17в).

Вероятнее всего, именно значительная концентрация поверхностных состояний, обусловленных As-комплексами, на поверхности полупроводника после обработки в растворе H₂SO₄ привела к большому накопленному заряду в интерфейсе. Близкое совпадение результатов АСМ-зарядки и ВАХ приводит к выводу: состояния, участвующие в процессе захвата заряда при АСМ-зарядке и состояния участвующие в обмене заряда в процессе измерения вольтамперной характеристики – суть одни и те же состояния. В связи с тем, что измерение потенциала МЗК проводится в бесконтактном режиме, переноса заряда не происходит и система остаётся в неравновесном состоянии, что и позволяет измерить накопленный заряд.

Была проведена оценка перезаряжающихся состояний на основе МБ. Полное число перезаряжающихся состояний составляет $1,9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для сер-

нокислотной и $1,1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для аммиачной обработки при смещении зарядки -10В.

Результаты пятого раздела опубликованы в работе [5].

В Заключение отражены основные выводы.

1. Наиболее общий подход в описании ВАХ реальных контактов может быть реализован на основе учёта нелинейной зависимости высоты барьера от смещения. При этом механизмы, лежащие в основе нелинейной зависимости, могут быть достаточно разнообразными.

2. С проявлениями нелинейности высоты барьера в совокупности с условием постоянства тока связаны известные «аномалии ВАХ»: низкотемпературная аномалия, связь измеряемой высоты барьера с показателем идеальности, а также размерные эффекты.

3. ВАХ идеального контакта, при учёте эффектов сил изображения и туннелирования, в широком диапазоне температур, концентраций примеси в полупроводнике и диаметров контакта может быть описана простым выражением, которое помимо измеряемого показателя идеальности содержит реальную высоту барьера в контакте, учитывающую понижение высоты барьера за счёт эффекта сил изображения.

4. Наиболее вероятная причина нелинейности высоты барьера в реальных контактах – неоднородное по энергии распределение интерфейсных или приповерхностных состояний, находящихся в равновесии с полупроводником.

5. Разброс параметров ВАХ и связь измеряемой высоты барьера с показателем идеальности для набора однотипных контактов обусловлены флуктуациями ИС, связанными, в отдельных случаях, с механическими напряжениями в КМП.

6. Проведённое моделирование дисперсии высоты барьера в модели Танга неоднородности высоты барьера в виде седловых точек, анализ зависимости показателя идеальности от напряжения и сравнение с экспериментальными данными показали невозможность применения данной модели при комнатной температуре и показателе идеальности $< 1,1$.

7. Показано, что сканирование поверхности КМП зондом АСМ при подаче смещения на БШ приводит к зарядению сканированной области и изменению её поверхностного потенциала. Описанная методика применена для оценки плотности состояний в интерфейсе КМП.

Основные публикации по теме диссертации

Статьи, опубликованные в журналах, включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора и кандидата наук, и в Web of Science:

1. Bozhkov, V. G. About the determination of the Schottky barrier height with the C-V method / V. G. Bozhkov, N. A. Torkhov, **A. V. Shmargunov** // J. Appl. Phys. – 2011. – V. 109, Is. 7. – 073714. – 10 pp. – 0,6 / 0,1 p.p. – DOI: 10.1063/1.3561372

2. Bozhkov, V. G. Influence of the nonlinear bias dependence of the barrier height on measured Schottky-barrier contact parameters / V. G. Bozhkov, **A. V. Shmargunov** // J. Appl. Phys. – 2011. – V. 109, Is. 11. – 113718. – 10 pp. – 0,6 / 0,3 p.p. – DOI: 10.1063/1.3587233

3. Bozhkov, V. G. Investigation of special features of parameters of Schottky barrier contacts caused by a nonlinear bias dependence of the barrier height / V. G. Bozhkov, **A. V. Shmargunov** // J. Appl. Phys. – 2012. – V. 111, Is. 5. – 053707. – 10 pp. – 0,6 / 0,3 p.p. – DOI: 10.1063/1.3691959

4. Bozhkov, V. G. The Ir-n-GaAs Schottky barrier contacts made by electrochemical deposition / V. G. Bozhkov, **A. V. Shmargunov**, T. P. Bekezina, N. A. Torkhov, V. A. Novikov // J. Appl. Phys. – 2014. – V. 115, Is. 22. – 224505. – 8 pp. – 0,5 / 0,15 p.p. – DOI: 10.1063/1.4867778

5. Shmargunov A.V. AFM study of charging of the Au-n-GaAs contact / **A. V. Shmargunov**, V. G. Bozhkov, V. A. Novikov // Microelectronic Engineering. – 2015. – V. 133. – P. 73–77. – 0,3 / 0,2 p.p. – DOI: 10.1016/j.mee.2014.12.006

Патент:

6. Пат. № 2530963 Российская Федерация, С2, МПК С 25 D 3/50, С 25 D 7/12. Электролит для электрохимического осаждения иридия на арсенид галлия и способ его приготовления / Бекезина Т. П., Мокроусов Г. М., Божков В. Г., Бурмистрова В. А., Торхов Н. А., **Шмаргунов А. В.**; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (ТГУ) (RU), Открытое акционерное общество «Научно-исследовательский институт полупроводниковых приборов» (ОАО «НИИПП») (RU). – № 2013101201/02; заявл. 10.01.2013; опубл. 20.10.2014, Бюл. № 29. – 10 с. – 0,6 / 0,06 п.л.

Публикация в сборнике трудов конференции, включенном в Scopus:

7. Bozhkov, V. G. Influence of the nonlinear bias dependence of the barrier height on measured Schottky-barrier contact parameters / V. G. Bozhkov, **A. V. Shmargunov** // CriMiCo 2011–2011 21st International Crimean Conference: Microwave and Telecommunication Technology, Conference Proceedings. Sevastopol, 12-16 September 2011. – Sevastopol, 2011. – P. 247. – 0,1 / 0,05 p.p.

Список цитированной литературы

1* Божков В.Г. О природе «низкотемпературной аномалии» в контактах металл-полупроводник с барьером Шоттки/ В.Г. Божков//Известия вузов. Радиофизика. –2002. –Т.45. –№5. –С.1.

2* Broom R. F. Doping dependence of the Schottky-barrier height of Ti-Pt contacts to n-gallium arsenide/ R. F. Broom, H. P. Meier, and W. Walter// J. Appl. Phys. –1986. –V.60. –P.1832.

3* Tung R. T. Electron transport at metal-semiconductor interfaces: General theory/R. T. Tung// Phys. Rev. B. –1992.–V.45.–P.13509.

4* Jones F. E. Current transport and the role of barrier inhomogeneities at the high barrier n-InP | poly(pyrrole) interface/ F. E. Jones, B. P. Wood, J. A. Myers, C. Daniels-Hafer, and M. C. Lonergan // J. Appl. Phys. –1999. –V.86, –P.6431.

5* Çetin H. On barrier height inhomogeneities of Au and Cu/n-InP Schottky contacts/ H. Çetin, E. Ayyıldız//Physica B. –2010. –V.405. –P.559.

6* Schmitsdorf R. F. Explanation of the linear correlation between barrier heights and ideality factors of real metal-semiconductor contacts by laterally non-uniform Schottky barriers/ R. F. Schmitsdorf, T. U. Kampen, and W. Mönch // J. Vac. Sci. Technol. B. –1997. –V.15. –P.1221.

7* Sarpatwari K. Effects of barrier height inhomogeneities on the determination of the Richardson constant/ K. Sarpatwari, S. E. Mohney, and O. O. Awadelkarim // J. Appl. Phys. –2011. –V.109. –P.014510.

8* Forment S. Influence of hydrogen treatment and annealing processes upon the Schottky barrier height of Au/n-GaAs and Ti/n-GaAs diodes/S. Forment, M. Biber, R.L. Van Meirhaeghe, W.P. Leroy and A. Tüüt// Semicond. Sci. Technol. –2004. –V.19. –P.1391.

9* Biber M. The effect of Schottky metal thickness on barrier height inhomogeneity in identically prepared Au/n-GaAs Schottky diodes/ M. Biber, Ö. Güllü, S. Forment, R.L. Van Meirhaeghe and A. Tüüt // Semicond. Sci. Technol. –2006. –V.21. –P.1.

10* Akkiliç K. Correlation between barrier heights and ideality factors of Cd/n-Si and Cd/p-Si Schottky barrier diodes/ K. Akkiliç, A. Tüüt, G. Çankaya, T. Kiliçoğlu// Solid State Communications. –2003. –V.125. –P.551.

11* Wittmer M. Ideal Schottky Diodes on Passivated Silicon/ M. Wittmer and J. L. Freeouf// Phys. Rev.Lett. –1992. –V.69. –P.2701.

10-

Тираж 100. Заказ 408.

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

634050, г. Томск, пр. Ленина, 40.

Тел. 533018.