

# Туннелирование электронов с сохранением поперечного волнового вектора в системе Au/CaF<sub>2</sub>/Si(111)

© М.И. Векслер, Ю.Ю. Илларионов, С.М. Сутурин, В.В. Федоров, Н.С. Соколов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: nsokolov@fl.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 24 февраля 2010 г.  
В окончательной редакции 8 апреля 2010 г.)

Получены эпитаксиальные слои фторида кальция на кремнии ориентации (111), в которых наблюдался туннельный перенос электронов с сохранением поперечной компоненты импульса. Достигнуто хорошее соответствие между результатами моделирования и данными измерений. Подробно изложена процедура, лежащая в основе проведения расчетов. Полученные пленки пригодны для применения в качестве барьерных слоев в различных приборах твердотельной электроники.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ.

## 1. Введение

В настоящее время имеются развитые модели туннельных структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) [1], применяемые в основном для описания поведения приборов с диоксидом кремния и другими оксидами с более высокой, чем у SiO<sub>2</sub>, диэлектрической проницаемостью.

Теоретически при туннелировании наряду с полной энергией частицы  $E$  должна сохраняться поперечная компонента волнового вектора  $k_{\perp}$  [2]. Как известно, минимум зоны проводимости кремния смещен в  $k$ -пространстве относительно  $\Gamma$ -точки. Поэтому в МДП-структурах на Si величины туннельных токов должны резко различаться для ориентаций (100) и (111). Однако для приборов с традиционным SiO<sub>2</sub> такое различие не наблюдается [3].

Причиной несохранения  $k_{\perp}$  может быть прежде всего рассеяние различной природы как на интерфейсах, так и в толще диэлектрика, тем более что оксид является аморфным материалом. Совпадение результатов измерений и моделирования в пренебрежении сохранением волнового вектора в какой-то мере свидетельствует о не самом лучшем качестве образцов. В принципе соответствие должно достигаться, наоборот, с условием неизменности  $k_{\perp}$ .

Тонкие слои фторида кальция (CaF<sub>2</sub>) являются предметом значительного внимания исследователей благодаря возможности их эпитаксиального выращивания на кремниевых подложках (особенно ориентации (111)) [4,5]. Этот материал интересен в качестве барьерного слоя в твердотельных приборах — полевых транзисторах, резонансно-туннельных диодах и сверхрешетках. Перспектива получения высококачественного кристаллического слоя фторида со структурно совершенной границей раздела с кремнием связана с близостью постоянных решетки Si и CaF<sub>2</sub>.

В настоящей работе мы продемонстрируем возможность: а) проведения расчета характеристик МДП-

структур с учетом сохранения поперечного волнового вектора без отказа от использования традиционных формул; б) изготовления высококачественных пленок фторида кальция, перенос заряда в которых осуществляется посредством туннельного механизма с выполнением всех необходимых законов сохранения. Работа представляет собой более подробное изложение результатов, представленных в [6].

## 2. Туннельные токи в МДП-структуре

Ток, протекающий через диэлектрик, включает в себя электронную (между металлом и зоной проводимости кремния,  $j_e$ ) и дырочную (металл–валентная зона,  $j_h$ ) компоненты. В зависимости от зарядового состояния (обогащение, инверсия-обеднение) одна из этих компонент содержит только „непрерывную“ составляющую, а другая еще и „дискретную“ (рис. 1). Последняя создается туннелированием носителей между квантовыми уровнями инверсного или обогащенного слоя и металлом.

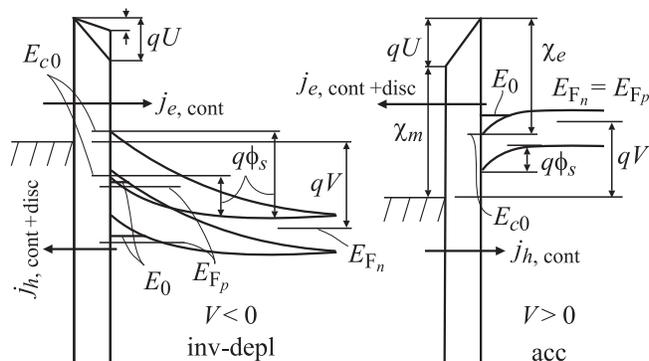


Рис. 1. Энергетические диаграммы с указанием величин, фигурирующих в формулах для тока: слева — инверсия-обеднение (напряжение  $U$  зависит от темпа генерации неосновных носителей), справа — обогащение.

Используемые значения параметров туннельного барьера и зонной структуры кремния

Параметр	Величина	Параметр	Величина	Параметр	Величина
$t$	300 К	$m_{\perp}$ (el)	$0.358 m_0$	$m_t$	$0.19 m_0$
$\chi_m$	2.63 eV	$m_{\perp}$ (hol)	$0.33 m_0$	$m_z$	$0.258 m_0$
$\chi_e$	2.38 eV	$\nu_{\perp e}, \nu_{\perp h}$	6, 3	$a$	0.542 nm
$\epsilon_l$	8.43	$E_g$ (Si)	1.12 eV	$\Delta$	0.85
$m_e$	$1.0 m_0$	$m_l$	$0.92 m_0$	$\epsilon_s$ (Si)	11.9

Для описания каждой из названных компонент имеются общепринятые выражения. Например, электронная „непрерывная“ составляющая запишется как

$$j_{e,\text{cont}} = \frac{4\pi q m_{\perp} \nu_{\perp e}}{h^3} \times \int_{0|q\phi_s}^{+\infty} (f_m - f_n) \int_0^{E|E-q\phi_s} T^{*|**}(E, E_{\perp}) dE_{\perp} dE. \quad (1)$$

Здесь  $E$  — полная энергия электрона, отсчитываемая от края зоны проводимости кремния  $E_{c0}$  на границе с диэлектриком,  $f_m, f_n$  — функции Ферми для металла и зоны проводимости Si,  $E_{\perp}$  — энергия движения в плоскости, перпендикулярной направлению туннелирования  $z$ ,  $m_{\perp}$  — эффективная масса электрона в этой плоскости,  $\nu_{\perp e}$  — кратность вырождения долин, участвующих в переносе. Через  $T^{*|**}$  обозначена вероятность туннелирования; одна или две звездочки служат для акцентирования внимания на том, что данная величина в настоящей работе будет вычисляться иначе, чем ранее.

Для структуры на основе  $n$ -Si в режиме инверсии-обеднения весь электронный ток  $j_e$  состоит из  $j_{e,\text{cont}}$ , при этом в  $T$  и в качестве пределов в обоих интегралах берутся левые из указанных вариантов. В режиме обогащения, напротив, берутся правые варианты;  $q\phi_s$  обозначает величину изгиба зон в кремнии. В этом случае наличествует и даже доминирует дискретная составляющая ( $j_e = j_{e,\text{cont}} + j_{e,\text{disc}} \approx j_{e,\text{disc}}$ ). Если, как это нередко делается [7], ограничиться рассмотрением основного квантового уровня  $E_0$ , то названная составляющая примет вид

$$j_{e,\text{disc}} = \frac{q m_{\perp} \nu_{\perp e}}{\pi \hbar^2 \tau_{\text{ar}}(E_0)} \int_{E_0}^{+\infty} (f_m - f_n) T^{**}(E, E - E_0) dE. \quad (2)$$

Здесь снова мы будем иметь дело с несколько модифицированной вероятностью туннельного прохождения  $T^{**}$ , а под  $\tau_{\text{ar}}$  понимается квазиклассическое время между последовательными соударениями частицы со стенкой туннельного барьера. Заметим, что в записи дискретной компоненты функция Ферми нередко учитывается только на стороне квантовой ямы, а вероятность туннелирования рассчитывается с  $E_{\perp} = 0$  — тогда после интегрирования имеем привычное соотношение  $j_{e,\text{disc}} = -q N_s T(E_0, 0) / \tau_{\text{ar}}$ , в котором  $N_s$  — двумерная концентрация электронов.

Аналогично могут быть записаны выражения для дырочного тока  $j_h$  — из одной „непрерывной“ составляющей в режиме обогащения или из обеих для инверсии-обеднения

$$j_{h,\text{cont}} = \frac{4\pi q m_{\perp} \nu_{\perp h}}{h^3} \times \int_{-\infty}^{-E_g| - E_g - q\phi_s} (f_m - f_p) \int_0^{-E_g - E| - E_g - E - q\phi_s} T(E, E_{\perp}) dE_{\perp} dE, \quad (3)$$

$$j_{h,\text{disc}} = \frac{q m_{\perp} \nu_{\perp h}}{\pi \hbar^2 \tau_{\text{ar}}(E_0)} \int_{-\infty}^{-E_g - E_0} (f_m - f_p) T(E, -E_g - E - E_0) dE. \quad (4)$$

В настоящей работе они используются с обычной вероятностью  $T$  и никаких изменений не вводится. Однако принципиален сам факт учета  $j_h$ , так как в литературе часто рассматривается лишь  $j_e$ . На самом деле утверждение о безоговорочном преобладании  $j_e$  над  $j_h$  является неочевидным ввиду рассматриваемых далее деталей туннелирования. В двух последних формулах  $\nu_{\perp h} = 3$ , а  $m_{\perp}$  берется для дырок в кремнии.

Распределение прикладываемого к структуре напряжения находятся с использованием стандартных одноуровневых моделей [7,8]. При этом могут быть определены все параметры энергетических зонных диаграмм в заданных режимах: изгиб зон в кремнии  $q\phi_s$ , энергия уровня  $E_0$  (рис. 1), концентрации носителей, напряжение на слое диэлектрика  $U$ , ширина обедненной области  $w$  при обратном смещении, время  $\tau_{\text{ar}}$ . Для случая аккумуляции принимается условие равновесия в толще кремния (равенство квазиуровней Ферми  $E_{F_p} = E_{F_n}$ , т.е.  $f_p = f_n$ ), а для режимов инверсии-обеднения вводится требование баланса неосновных носителей (дырок) [8]. В последнем случае распределение напряжения определяется не только смещением  $V$ , но и темпом генерации неосновных носителей  $G$ . На рис. 1 слева показаны ситуации двух различных  $G$ ; при вычислениях положено  $G = 10^{27} \text{ м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ .

Список параметров, используемых в расчетах, приведен в таблице. Никакие подгоночные факторы не применяются. Смысл некоторых из перечисленных в таблице величин уже пояснен выше, а остальных — обсуждается в следующем разделе. Высоты барьеров

$\chi_m, \chi_e$  обозначены на рис. 1 справа. Концентрация доноров  $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

### 3. Вычисления вероятности туннелирования

Стандартное выражение для вероятности туннелирования в рамках общепринятого метода Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна с параболическим законом дисперсии для электронов в диэлектрике имеет вид

$$T = R \exp \left( -2 \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}} \int_{cfr} \sqrt{E_{ci}(z) - E + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e}} dz \right). \quad (5)$$

Здесь  $E_{ci}$  (отсчитывается от  $E_{c0}$ ) — профиль зоны проводимости диэлектрика,  $m_e$  — эффективная масса электрона в диэлектрике,  $k_{\perp}$  — поперечный волновой вектор частицы, который, как и полная энергия  $E$ , сохраняется при туннелировании. Интегрирование в формуле производится по классически запрещенной области (CFR) диэлектрика. Выписанное выражение давно известно, но следует подчеркнуть, что применительно к материалу с такой широкой запрещенной зоной, как у  $\text{CaF}_2$ , оно используется в том числе для описания транспорта между металлом и валентной зоной полупроводника.  $R$  — корректирующий фактор, гладко сводящий вероятность на нуль вблизи краев зон кремния [9].

Видно, что в выражение для  $T$  не входит  $E_{\perp}$  явно. Формулы для туннельного тока в их более общем виде содержат не интегрирование по  $E_{\perp}$ , а суммирование или интегрирование по поперечному волновому вектору электронов [10]. Чтобы не отказываться от традиционных выражений,  $k_{\perp}^2$  обычно переписывается через  $E_{\perp}$  как  $k_{\perp}^2 = 2m_{\perp}E_{\perp}/\hbar^2$ . Это формально правомерно только при параболических зонах в полупроводнике без поперечного смещения минимума от нуля в  $k$ -пространстве. Такая ситуация реализуется для дырок, а также для двух из шести электронных долин в  $\text{Si}(100)$  в противоположном случаю  $\text{Si}(111)$ . Однако упомянутым соотношением между  $k_{\perp}$  и  $E_{\perp}$ , фактически игнорирующим непрямоугольный характер зонной структуры кремния, принято пользоваться почти всегда, а для  $v_{\perp e}$  при этом берется число 6 (не 2). Тем не менее в случае кристаллического фторида кальция учет реальной зонной структуры кремния необходим. В наших предыдущих работах на эту тему [11] была сделана лишь поправка на сдвиг в  $k$ -пространстве:  $k_{\perp}^2 = 2m_{\perp}E_{\perp}/\hbar^2 + k_{0\perp}^2$ , адекватная в области небольших энергий. В настоящей работе

$$|k_{0\perp}| = \sqrt{\frac{2}{3}} k_0 \quad \left( k_{0z} = \frac{1}{\sqrt{3}} k_0 \right), \quad (6)$$

где  $k_0 = \frac{2\pi}{a} \Delta$ ,  $a = 0.542 \text{ nm}$  — параметр решетки кремния,  $\Delta = 0.85$  — положение минимума зоны Бриллюэна в единицах  $2\pi/a$ . По сути, введение такой поправки (рис. 2) эквивалентно снижению энергии электрона на

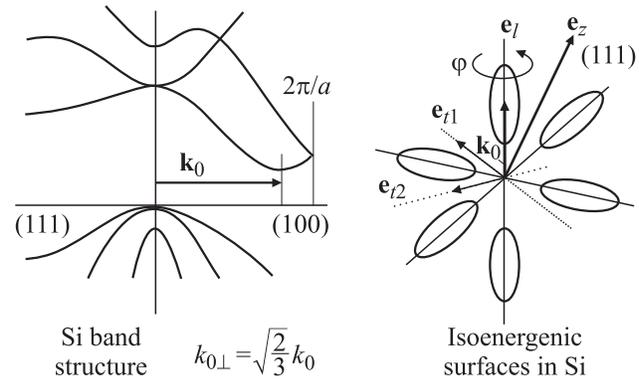


Рис. 2. Фрагмент зонной структуры Si.

величину  $\hbar^2 k_{0\perp}^2 / 2m_e$ , что составляет порядка 2.44 eV и радикально снижает вероятность туннелирования.

Однако переход такого рода от  $E_{\perp}$  и  $k_{\perp}^2$  никак не учитывает существенных различий в вероятности туннелирования из различных состояний с заданными  $E$  и  $E_{\perp}$ , нарастающих по мере удаления от минимума при росте энергии. На самом деле при наличии  $k_{0\perp} \neq 0$  нет возможности корректно заменить  $k_{\perp}^2$  на  $E_{\perp}$  в соотношении для вероятности и придется проводить усреднение по состояниям. Ввиду симметрии достаточно рассмотреть один из эквивалентных эллипсоидов (рис. 2) в  $k$ -пространстве. Введем угол  $\varphi$  в плоскости, перпендикулярной оси выбранного эллипсоида и отсчитываемый от луча, лежащего на пересечении с плоскостью (111) (рис. 2). Тогда поперечный волновой вектор станет функцией трех аргументов  $k_{\perp}^2 = k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \varphi)$ , а эффективную вероятность туннелирования следует находить как среднее по  $\varphi$

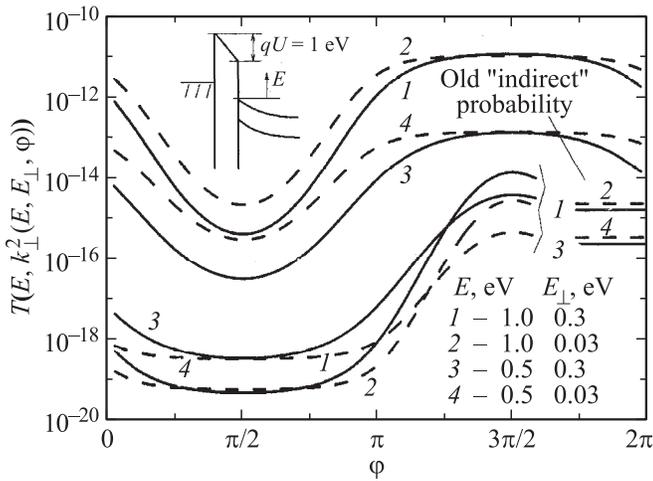
$$T^*(E, E_{\perp}) = \langle T(E, k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \varphi)) \rangle. \quad (7)$$

Математически усреднение производится через интегрирование

$$T^*(E, E_{\perp}) = \frac{\sum \int T(E, k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \varphi)) \xi(E, E_{\perp}, \varphi) d\varphi}{\sum \int \xi(E, E_{\perp}, \varphi) d\varphi} \quad (8)$$

в пределах  $0 \dots 2\pi$ , сумма учитывает ветвление, т.е. наличие двух состояний с заданными  $E_{\perp}$  и  $\varphi$ . При практических вычислениях и в числителе, и в знаменателе просто делается суммирование по состояниям с эквидистантным шагом по углу. Функция  $\xi$  играет роль веса, учитывающего неодинаковость вероятности занятия частицей различных состояний. В целом роль  $\xi$  не слишком велика, гораздо существеннее сильная зависимость  $T$  от угла.

Величина  $\mathbf{k}_{\perp}(E, E_{\perp}, \varphi)$  находится следующим образом. Пусть  $k_l$  и  $k_t$  — компоненты волнового вектора электрона в главных осях эллипсоида энергии в кремнии. Смысл этих величин очевиден из записи  $\mathbf{k} = (k_0 + k_l)\mathbf{e}_l + k_t \cos \varphi \mathbf{e}_{t1} + k_t \sin \varphi \mathbf{e}_{t2}$ , где орт  $\mathbf{e}_l$  соответствует оси эллипсоида, орт  $\mathbf{e}_{t1}$  сонаправлен с лучом



**Рис. 3.** Зависимости вероятности туннелирования от состояния, задаваемого углом  $\varphi$  при выбранных полной и поперечной энергиях. Наличие двух групп кривых обусловлено наличием двух состояний в  $k$ -пространстве с заданными  $E, E_{\perp}, \varphi$ . Горизонтальными линиями отмечены вероятности в рамках модели сдвига. Расчет выполнен для схемы, представленной в левом верхнем углу рисунка.

отсчета  $\varphi$ , а  $\mathbf{e}_{t2} = \mathbf{e}_l \times \mathbf{e}_{t1}$ . Тогда, если  $k_l, k_t$  известны, квадрат  $k_{\perp}^2$  вычисляется с помощью равенства

$$k_{\perp}^2 = \frac{2}{3} (k_0 + k_l)^2 + \frac{4}{\sqrt{18}} (k_0 + k_l) k_t \sin \varphi + k_t^2 \left( 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \varphi \right), \quad (9)$$

получающегося как  $k_{\perp}^2 = k^2 - k_z^2$  с использованием перехода от ортов  $\mathbf{e}_l, \mathbf{e}_{t1}, \mathbf{e}_{t2}$  к ортам  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ . Соотношение для такого перехода в явном виде  $\mathbf{e}_l = 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_x + 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_y + 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_z$ ,  $\mathbf{e}_{t1} = 1/\sqrt{2}\mathbf{e}_x - 1/\sqrt{2}\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_{t2} = 1/\sqrt{6}\mathbf{e}_x + 1/\sqrt{6}\mathbf{e}_y - 2/\sqrt{6}\mathbf{e}_z$ , или  $\mathbf{e}_x = 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_l + 1/\sqrt{2}\mathbf{e}_{t1} + 1/\sqrt{6}\mathbf{e}_{t2}$ ,  $\mathbf{e}_y = 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_l - 1/\sqrt{2}\mathbf{e}_{t1} + 1/\sqrt{6}\mathbf{e}_{t2}$ ,  $\mathbf{e}_z = 1/\sqrt{3}\mathbf{e}_l - \sqrt{6}/3\mathbf{e}_{t2}$ .

При фиксированных  $E, E_{\perp}, \varphi$  компоненты волнового вектора  $k_l, k_t$  определяются из равенства

$$E_{\perp} = E - \frac{\hbar^2 (k_z - k_{0z})^2}{2m_z} = E - \frac{\hbar^2}{2m_z} \left( \frac{1}{\sqrt{3}} k_l - \frac{2}{\sqrt{6}} k_t \sin \varphi \right)^2 \quad (10)$$

с подстановкой в него выражения

$$k_t = + \sqrt{\frac{2m_t}{\hbar^2} \left( E - \frac{\hbar^2 k_l^2}{2m_l} \right)}. \quad (11)$$

В результате получаются квадратные уравнения, дающие два решения для  $k_l$ , а затем определяются соответствующие им значения  $k_t$ . Масса  $m_z$  при этом равна  $3m_l m_t (m_t + 2m_l)^{-1}$ , где  $m_l$  и  $m_t$  обозначают продольную и поперечную (в главных осях) массы электрона в кремнии.

На рис. 3 представлены примеры рассчитанных зависимостей вероятности  $T(E, k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \varphi))$  от угла  $\varphi$  для двух значений  $E$  и двух разных  $E_{\perp}$ . Реально существуют лишь ветви, отвечающие большим вероятностям. Горизонтальными линиями у правой границы на рис. 3 отмечены вероятности, получаемые в прежней модели „сдвига“ на  $k_{0\perp}$ . Как и следовало ожидать,  $T$  сильно изменяется, причем влияние  $\varphi$  на рис. 3 более выражено при увеличении  $E$  и/или  $E_{\perp}$ .

Весовая функция  $\xi$  оценивается как

$$\xi = A \left| 1 + \sqrt{2} \frac{m_t k_l}{m_l k_t} \sin \varphi \right|^{-1}, \quad (12)$$

где через  $A$  обозначена нормировочная константа, сокращающаяся при вычислении  $T^*$ . Математический смысл такой функции — „плотность“ плотности состояний в переменных  $E_{\perp}, \varphi$

$$\rho(E) = \int_0^{2\pi} \sum_0^E \int_0^E \xi(E, E_{\perp}, \varphi) dE_{\perp} d\varphi. \quad (13)$$

Как обсуждается в [12], значение  $\rho$  с точностью до множителя  $1/4\pi^3 \hbar$  может быть вычислено интегрированием обратной величины модуля скорости  $\hbar^{-1} (k_l^2 m_l^{-2} + k_t^2 m_t^{-2})^{-1/2}$  по изоэнергетической поверхности. Элемент площади такой поверхности можно записать как  $k_l d\varphi \sqrt{(dk_l)^2 + (dk_t^2)}$ , т.е. как  $k_l d\varphi dk_l \sqrt{1 + m_t^2 k_l^2 / m_l^2 k_t^2}$ . После этого делаем замену переменной  $k_l$  на  $E_{\perp}$  и получаем

$$\rho = \frac{m_t}{4\pi^3 \hbar^2} \iint dk_l d\varphi = \frac{m_t}{4\pi^3 \hbar^2} \int \sum \int \left| \frac{\partial E_{\perp}}{\partial k_l} \right|^{-1} dE_{\perp} d\varphi. \quad (14)$$

Если в (14) подставить  $E_{\perp}$  по формуле (10), в которой уже использовано соотношение (11) для  $k_t$ , придем к выражению (12) для  $\xi$ .

Рис. 4 демонстрирует результат вычислений тока  $j_e$  как функции напряжения  $U$  на слое фторида (инверсия-обеднение) в рамках изложенного выше подхода. Приведены также кривые, полученные на основе предыдущих моделей — без учета непрямоугольной структуры („direct“) и с ее учетом („indirect“) посредством сдвига на  $k_{0\perp}$ . Естественно, если условно считать кремний прямоугольным материалом, получающиеся токи оказываются несоизмеримо больше по величине, чем на самом деле, при ориентации Si(111). Что же касается модели сдвига, то она неплохо реализуется при низких напряжениях  $U$ , но оказывается несостоятельной при повышении  $U$ . Особенно это заметно для толстых пленок  $\text{CaF}_2$ , когда вклад в ток состояний с высокими  $E, E_{\perp}$  становится относительно существеннее. Именно в таких ситуациях усреднение по состояниям с различными  $\varphi$  приобретает

решающее значение и приводит к заметному эффективному увеличению вероятности прохождения.

Очевидно, что условия туннелирования между металлом и зоной проводимости *n*-кремния в режимах инверсии-обеднения и обогащения существенно различны. В последнем случае в *c*-зоне Si образуется квантовая яма, в которой, как известно, максимум распределения частиц по координате смещен от границы с диэлектриком [13]. Приблизительно можно считать, что распределение пропорционально обратной *z*-компоненте скорости частицы на квантовом уровне в классически разрешенной области (classically-allowed region — CAR). „Исходные пункты“ электронов при туннелировании считаем распределенными по тому же закону. Тогда вероятность туннелирования представится как

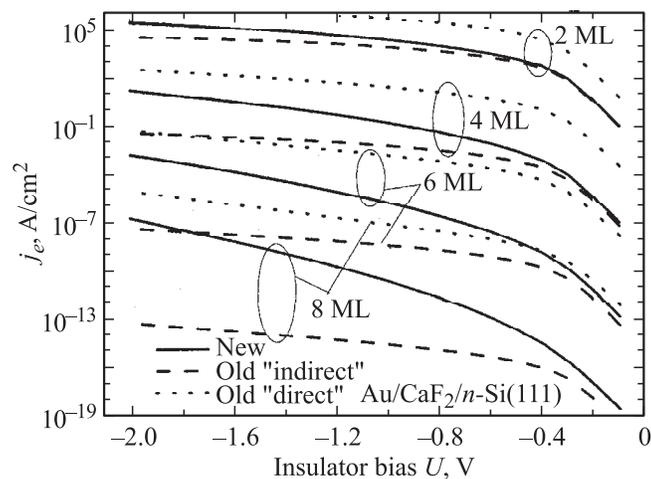
$$T^{**}(E, E_{\perp}) = \left( \int_{\text{car}} v_z^{-1}(z) dz \right)^{-1} \times \int_{\text{car}} \frac{\sum \int T(E, k_{\perp}^2) \xi d\varphi}{\sum \int \xi d\varphi} v_z^{-1}(z) dz \quad (15)$$

со смещенным первым аргументом функций  $k_{\perp}^2$  и  $\xi$

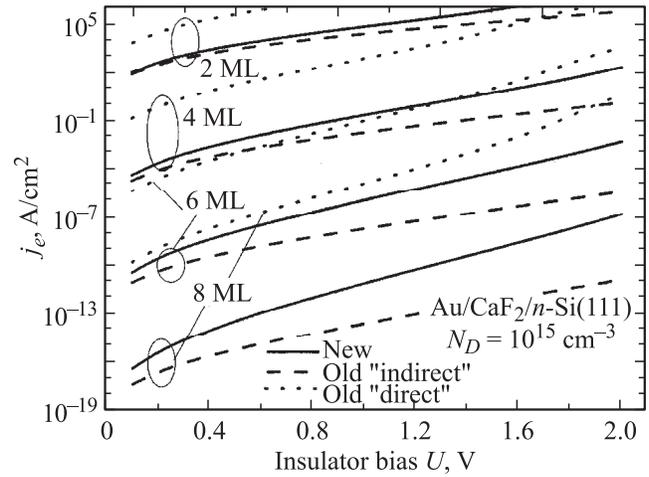
$$k_{\perp}^2 = k_{\perp}^2(E - E_c(z), E_{\perp}, \varphi), \quad \xi = \xi(E - E_c(z), E_{\perp}, \varphi). \quad (16)$$

Здесь  $E_c(z)$  — профиль зоны проводимости в кремнии, а  $v_z$  — скорость, равная  $[2m_z^{-1}(E_0 - E_c(z))]^{1/2}$ . Что касается непрерывной компоненты электронного тока в режиме обогащения, то правомерность использования  $T^{**}$  вместо  $T^*$  при ее вычислении неоднозначна, но в любом случае названная компонента мала по сравнению с дискретной.

На рис. 5 приведены результаты таких же расчетов, как и рис. 4, но для случая обогащения. Наблюдаются аналогичные тенденции, но различие между кривыми,



**Рис. 4.** Рассчитанные зависимости электронного тока от напряжения на диэлектрике в режиме инверсии-обеднения.



**Рис. 5.** Рассчитанные зависимости электронного тока от напряжения на диэлектрике в режиме обогащения.

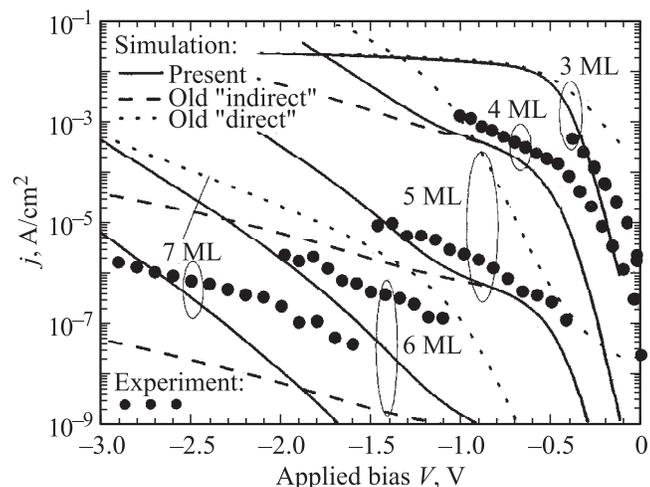
полученными по новой модели и в рамках модели сдвига, несколько менее выражено. Дело в том, что энергии электронов в квантовой яме — отсчитываемые относительно дна зоны проводимости кремния — существенно ниже энергий тех состояний, которые оказываются задействованными в транспорте при обратной полярности (рис. 4). Вследствие этого поперечные энергии  $E_{\perp}$  также не слишком велики. Описанное количественное различие между двумя режимами должно проявиться в том, что токи на обратной полярности ( $V < 0$ ) будут ниже токов на прямой ( $V > 0$ ), если только дырочная компонента  $j_h$  не окажется доминирующей.

#### 4. Сравнение с данными измерений

МДП-структуры Au/CaF<sub>2</sub>/*n*-Si(111) изготавливались на слабо легированных ( $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) кремниевых подложках. После стандартных процедур отмытки подложки помещались в ростовую установку. Нанесение пленки фторида осуществлялось методом молекулярно-лучевой эпитаксии при температуре 250°C [11]. Для контроля качества слоя использовалась дифракция электронов высокой энергии. Золотые электроды напылялись через маску с отверстиями диаметром 80 μm. Один монослой (ML) соответствует толщине 0.315 nm.

Измерения статических вольт-амперных характеристик проводились в темноте при комнатной температуре. Во избежание механической порчи золотого электрода для контакта с ним использовался проводящий кантилевер атомно-силового микроскопа.

На рис. 6 приведены измеренные характеристики при отрицательной полярности прикладываемого к металлическому электроду напряжения. На том же рисунке воспроизведены расчетные кривые рис. 4, для чего был осуществлен переход от одного аргумента к другому, а именно: от напряжения на диэлектрике  $U$  к напряжению



**Рис. 6.** Вольт-амперные характеристики структур Au/CaF<sub>2</sub>/n-Si(111): сравнение данных измерений образцов, изготовленных в настоящей работе, и результатов расчета, полученных на основе рис. 4. Измерения проведены в темноте при комнатной температуре.

на клеммах  $V$ . Видно, что только новая модель, полноценно учитывающая сохранение поперечной компоненты волнового вектора, обеспечивает удовлетворительное соответствие при всех толщинах. Модель сдвига дает совершенно неправильный результат для толщин 6–7 ML, на несколько порядков занижая токи. Неадекватность теории, вообще не учитывающей  $k_{0\perp} \neq 0$ , также очевидна, кроме области совсем малых  $|V|$ , в которой неизбежны паразитные утечки. Результаты для аккумуляционной полярности опущены (они приведены в [6]). Полученное соответствие свидетельствует, во-первых, об успешном усовершенствовании модели, а во-вторых, о достигнутом прогрессе в части технологии роста.

Дополнительно могло бы представить интерес сравнение токов в МДП-структурах с одинаковой толщиной CaF<sub>2</sub>, выполненных на кремнии (111) и (100). В случае Si(100) для двух из шести долин поперечный волновой вектор электронов  $k_{\perp}$  вблизи энергетического минимума мал, вследствие чего токи должны быть намного больше. Но, к сожалению, такое сравнение оказывается неосуществимым, поскольку рост сплошных планарных слоев фторида при ориентации (100) невозможен по термодинамическим причинам [14].

## 5. Заключение

Следует отметить следующие важные моменты. В работе удалось для конкретной МДП-структуры доказать сохранение поперечной компоненты волнового вектора при туннелировании. При исследованиях более традиционных структур с оксидами в качестве диэлектрика этого сделать не удавалось. Что же касается предыдущих исследований структур именно с фторидом кальция, то и в наших работах, и в публикациях других авторов

отмечались значительно большие по величине токи, что исключало корректное сравнение.

Для практических целей существенно, что хорошее соответствие теории и эксперимента можно констатировать для всего туннельного диапазона толщин фторида.

Авторы благодарны И.В. Грехову и С.Э. Тягинову за содействие.

## Список литературы

- [1] A. Gehring, S. Selberherr. *J. Comp. Theor. Nanosci.*, **2**, 1, 26 (2005).
- [2] Л. Эсаки. *УФН* **116**, 4, 569 (1975).
- [3] A. Schenk. *Advanced physical models for silicon device simulations*. Springer, Wien–N.Y. (1998). 349 p.
- [4] M. Sugiyama, M. Oshima. *Microelectron. J.* **27**, 4–5, 361 (1996).
- [5] A. Klust, T. Ohta, A.A. Bostwick, E. Rotenberg, Q. Yu, F.S. Ohuchi, M.A. Olmstead. *Phys. Rev. B* **72**, 204 336 (2005).
- [6] Ю.Ю. Илларионов, М.И. Векслер, С.М. Сутурин, В.В. Федоров, Н.С. Соколов. *Письма в ЖТФ* **36**, 9, 26 (2010).
- [7] M.I. Vexler. *Solid State Electron.* **47**, 8, 1283 (2003).
- [8] M.I. Vexler, S.E. Tyaginov, A.F. Shulekin. *J. Phys.: Cond. Matter* **17**, 50, 8057 (2005).
- [9] L.F. Register, E. Rosenbaum, K. Yang. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3, 457 (1999).
- [10] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов*. Пер. с англ. Мир, М. (1984). Кн. 2. 456 с.
- [11] M.I. Vexler, N.S. Sokolov, S.M. Suturin, A.G. Bانشchikov, S.E. Tyaginov, T. Grassler. *J. Appl. Phys.* **105**, 083 716 (2009).
- [12] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. Наука, М. (1990). 688 с.
- [13] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем*. Пер. с англ. Мир, М. (1985). 416 с.
- [14] L.J. Schowalter, R.W. Fathauer. *CRC Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* **15**, 367 (1989).