

Управление характером токопереноса в барьере Шоттки с помощью δ -легирования: расчет и эксперимент для Al/GaAs

© В.И. Шашкин[¶], А.В. Мурель, В.М. Данильцев, О.И. Хрыкин

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 15 октября 2001 г. Принята к печати 30 октября 2001 г.)

Рассматривается возможность управления эффективной высотой барьера в диодах Шоттки при введении δ -легированного слоя вблизи контакта металл–полупроводник. Уменьшение эффективной высоты барьера связано с возрастанием роли туннелирования носителей через барьер. Для барьеров Шоттки к n -GaAs проведен полный квантово-механический численный расчет влияния параметров δ -слоя (концентрации и глубины залегания) на вольт-амперные характеристики модифицированных диодов. Сравнение полученных расчетных результатов с экспериментальными характеристиками диодов, изготовленных методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений, показывает достаточно хорошее согласие. Анализ проведенных исследований позволил выбрать оптимальные параметры δ -слоев для получения низкобарьерных диодов (~ 0.2 эВ) с удовлетворительным коэффициентом неидеальности ($n \leq 1.5$). На основе таких структур возможно изготовление микроволновых диодов для детектирования без смещения.

1. Введение

Транспортные характеристики контактов металл–полупроводник, изготовленных в чистых эпитаксиальных или сверхвысоковакуумных условиях, являются воспроизводимыми и достаточно хорошо изученными [1]. Токоперенос в основном определяется параметрами потенциального барьера Шоттки в полупроводнике вблизи границы с металлом. В частности, для арсенида галлия с умеренной концентрацией электронов ($< 10^{18} \text{ см}^{-3}$) барьер Шоттки имеет высоту в пределах 0.6–1.0 эВ для более чем 40 распространенных металлов [1–3]. В некоторых пределах высоту барьера можно изменять путем дополнительного сильного легирования приповерхностной области полупроводника [1,2]. Неэпитаксиальные методы, основанные на имплантации или впадении примеси, обеспечивают малый диапазон регулирования высоты барьера или приводят к неоднородности и плохой воспроизводимости [2,4]. Более успешным оказалось прецизионное легирование в ходе эпитаксии, реализованное в работах [5,6] для контролируемого снижения эффективной высоты барьера в n -GaAs (100). Различия в подходах было связано с использованием техники δ -легирования в работе [5] и однородного легирования — в работе [6]. Очевидно, что в обоих случаях причиной снижения эффективной высоты барьера является возникновение термополевой компоненты тока. В случае более сильного легирования ток становится туннельным, в пределе возможно получение омического контакта [7–9]. Если касаться способа легирования, то еще в работе [10] было отмечено, что в рассматриваемых задачах δ -легирование эквивалентно сверхвысокому уровню объемного легирования. Это связано с очевидным обстоятельством, что при одинаковых поверхностных концентрациях легирующих доноров расстояние от металла до δ -слоя, полностью экранирующего электрическое

поле контакта, будет вдвое меньше, чем для случая однородного легирования. Собственно поэтому подход с использованием δ -легирования представляется более перспективным и в задачах получения малого эффективного барьера, 0.2–0.25 эВ, при сохранении небольших значений коэффициента неидеальности, $n \lesssim 1.5$. Важно еще, что значения поверхностной концентрации заряженных доноров N_{2D} (например, Si) в δ -слое в GaAs могут превышать 10^{13} см^{-2} . При этом снижение высоты барьера на 0.6–0.8 эВ обеспечивается при расстояниях x_0 от границы металла до плоскости легирования 4–6 нм. На рис. 1 показана эта практически важная область параметров легирования в координатах $N_{2D} — x_0$. Линия соответствует границе обеднения δ -слоя при нулевом смещении и исходной величине барьера $\phi^0 = 0.7$ эВ в соответствии с зависимостью [7]

$$\phi^0 = q/\epsilon\epsilon_0 N_{2D} x_0, \quad (1)$$

где q — заряд электрона, ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-14} \text{ Ф} \cdot \text{см}^{-1}$. На вставках схематически показан ход края зоны проводимости по разные стороны от границы. При объемном легировании кремнием до значений $\sim 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, близких к предельной концентрации электрически активных примесных атомов Si в GaAs, для получения той же самой поверхностной концентрации заряженных доноров $\sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$ требуется гораздо большая толщина слоя x_0 , ~ 17 нм. Следствием этого может быть падение туннельной прозрачности вместе с усилением ее зависимости от напряжения смещения и, соответственно, рост коэффициента неидеальности n [6,11].

В данной работе, продолжающей публикации [5,12], показана возможность получения низкобарьерных контактов к n -GaAs (100) при сохранении небольших значений фактора неидеальности. Представлены результаты детальных численных расчетов, начиная с определения

[¶] E-mail: sha@ipm.sci-nnov.ru

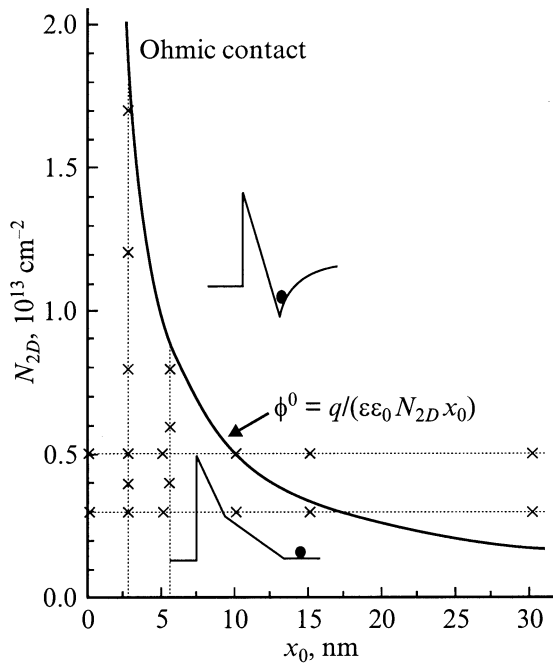


Рис. 1. Область параметров δ -легирования структуры с барьером Шоттки. Линия соответствует границе обеднения δ -слоя при нулевом смещении и $\phi^0 = 0.7$ эВ. На вставках выше и ниже этой границы схематически показан ход края зоны проводимости E_C в структурах. Точки — экспериментально реализованные значения параметров. Указана область параметров для формирования омических контактов.

зонного профиля и заканчивая вычислениями вольт-амперных характеристик (ВАХ). Проведено сопоставление с экспериментальными ВАХ. Практическое значение такого исследования достаточно очевидно и обусловлено, например, потребностью в низкобарьерных диодах для детекторов микроволнового излучения, не требующих постоянного рабочего смещения [12,13]. Не исключены и другие применения, использующие возможности технологии для получения несплавленных омических контактов [5,7,8], что может быть важным для приборов с нанометровыми размерами активных областей.

2. Методика вычислений

Численный расчет транспортных характеристик модифицированного контакта металл–полупроводник проводился в две стадии. На первой стадии путем решения одномерного уравнения Пуассона (см., например, [14]) вычислялся ход края зоны проводимости вдоль координаты x в глубь полупроводника при различных приложенных напряжениях смещения V . Профиль легирования считался заданным, а легирующая примесь — полностью ионизованной. Последовательность слоев в структуре принималась близкой к экспериментальной: сильно легированная подложка с концентрацией электронов $n^+ = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; слабо легирован-

ный эпитаксиальный слой с концентрацией электронов $n^- = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ толщиной 100 нм; δ -слоем атомов кремния с поверхностной концентрацией N_{2D} ; затем покрывающий нелегированный слой GaAs толщиной x_0 ; наконец — металлический контакт. Размытие δ -слоя в направлении x аппроксимируется гауссианом:

$$n(x) = \frac{N_{2D}}{\Delta x} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - x_0}{\Delta x} \right)^2 \right], \quad (2)$$

где Δx — стандартное отклонение, которое в расчетах принимается равным 0.5 нм [7]. Кроме того учитывается понижение высоты барьера за счет сил зеркального изображения. Температура полагается комнатной. При расчетах не учитываются эффекты квантования в потенциальной яме δ -слоя, поскольку в данном исследовании основные результаты относятся к случаю его полного обеднения.

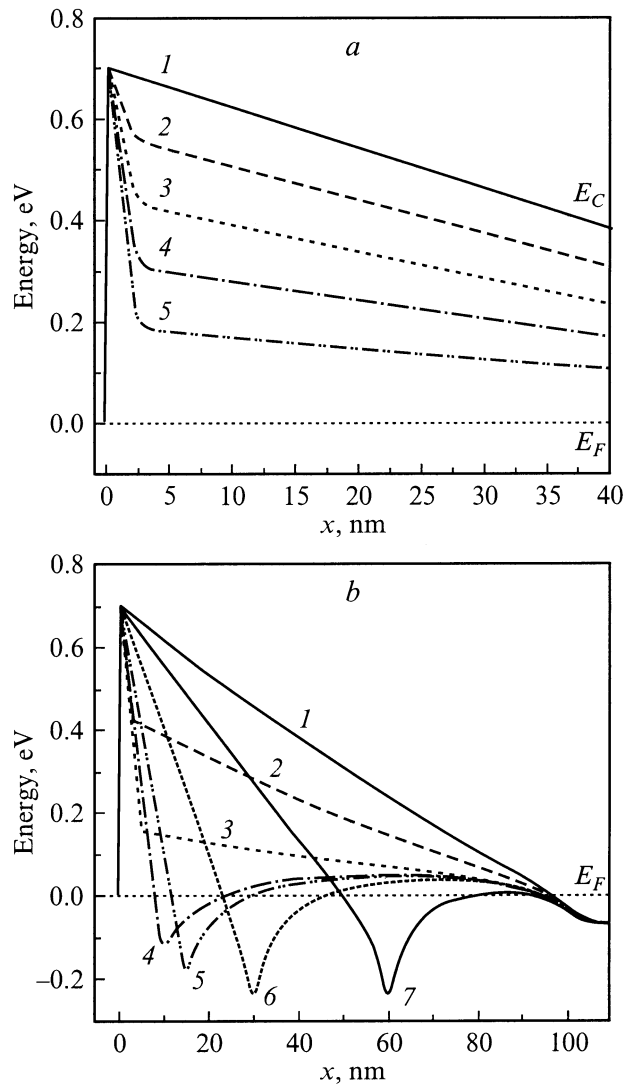


Рис. 2. Расчет потенциала модифицированного барьера Шоттки. *a* — $x_0 = 2, 5$ нм; $N_{2D}, 10^{12} \text{ см}^{-2}$: 1 — 0, 2 — 4, 3 — 8, 4 — 12, 5 — 16. *b* — $N_{2D} = 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$; $x_0, \text{ нм}$: 1 — 0, 2 — 2.5, 3 — 5, 4 — 10, 5 — 15, 6 — 30, 7 — 60.

Примеры расчета потенциального барьера контакта металл–полупроводник без внешнего смещения при двух комбинациях x_0 и N_{2D} приведены на рис. 2, a и b соответственно. Видно возникновение вследствие δ -легирования острого треугольного „клюва“ на вершине барьера, туннельная прозрачность которого, собственно, и приводит к снижению эффективной высоты барьера для электронов. При одновременном увеличении N_{2D} и x_0 у его подножия возникает потенциальная яма, заполненная электронами.

На следующей стадии для рассчитанного потенциального барьера решается уравнение Шредингера методом матрицы переноса [11]. Рассчитывается коэффициент прохождения электронов \tilde{T} в зависимости от энергии электронов E и приложенного смещения V , которое определяет форму потенциального барьера. Последующее интегрирование коэффициента прохождения $\tilde{T}(E, V)$ по всем занятым электронным состояниям в полупроводнике и всем свободным электронным состояниям в металле дает плотность тока носителей из полупроводника в металл j_{S-M} . Аналогично вычисляется плотность тока из металла в полупроводник j_{M-S} , а их разность дает общую плотность тока в диоде Шоттки:

$$j(V) = j_{S-M} - j_{M-S} = \frac{2q}{h^3} \int_{E_C}^{\infty} \tilde{T}(E, V) \cdot [f_{E_F}(E) - f_{E_F - qV}(E)] dE, \quad (3)$$

где $f_{E_F}(E)$ и $f_{E_F - qV}(E)$ — функции распределения Ферми в полупроводнике и металле соответственно. Коэффициент прохождения предполагается не зависящим от момента электрона, параллельного границе металл–полупроводник, поэтому выражение для тока можно проинтегрировать в поперечных направлениях, в результате чего получается следующее выражение для тока [9]:

$$j(V) = \frac{A^* T}{k_B} \int_{E_C}^{\infty} \tilde{T}(E_x, V) \times \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_x - E_F^S)/k_B T]}{\exp(-qV/k_B T) + \exp[(E_x - E_F^S)/k_B T]} \right\} dE_x, \quad (4)$$

где E_x — часть энергии электрона, соответствующая его движению по оси x , E_F^S — энергия уровня Ферми в полупроводнике, T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Проводя численный расчет интеграла при различных напряжениях смещения, можно получить ВАХ заданной структуры. Необходимо отметить, что в рассчитанных ВАХ не учитывались последовательное и параллельное сопротивление, которые всегда присутствуют в реальных диодных структурах. Учет сопротивлений, как это сделано, например, в [6], позволил бы добиться более точного совпадения рассчитанных и экспериментальных ВАХ.

3. Методики экспериментов

Эпитаксиальные структуры арсенида галлия выращивались методом газофазной эпитаксии из металл-органических соединений (МОГФЭ) при температурах 600–650°C. Параметры слоев соответствовали указанным в предыдущем разделе. В ходе экспериментов варьировались величины N_{2D} и x_0 . Они показаны точками на рис. 1. Техника выращивания методом МОГФЭ и диагностики δ -слоев описана в работе [15]. Значения N_{2D} оценивались из измерений на тестовых структурах, где аналогичные δ -слои выращивались на глубине 0.15–0.2 мкм, что позволяет характеризовать их методами Холла и вольт-фарадных характеристик. Было показано, что в условиях МОГФЭ слоевая концентрация носителей n_s совпадает с введенной концентрацией доноров N_{2D} до значений $6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, а далее насыщается.

После окончания роста арсенида галлия температура в ростовой камере уменьшалась до 160–200°C и без вскрытия реактора и нарушения ростовых условий выращивался слой алюминия толщиной ~ 100 нм. В ряде случаев проводилось дополнительное послеростовое напыление алюминия. Методом фотолитографии и химического травления формировались диоды с диаметром металлического контакта 10–500 мкм и с глубиной мезы 0.2 мкм. Обратный омический контакт создавался путем электрохимического осаждения GeNi + Au с последующим вжиганием.

Вольт-амперные характеристики диодов измерялись при комнатной температуре. Значения эффективных высот барьеров ϕ^{eff} извлекались стандартным способом из измеренных ВАХ в предположении, что зависимость близка к первому приближению теории термополевой эмиссии [12]:

$$j_{TE} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\phi^{\text{eff}}(V)}{k_B T}\right) \left\{ \exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right\}, \quad (5)$$

где A^* — модифицированная постоянная Ричардсона. Зависимость эффективной высоты барьера ϕ^{eff} от напряжения смещения определяет фактор неидеальности контакта металл–полупроводник. В отсутствие δ -легирования высота барьера ϕ^{eff} составляет ~ 0.7 эВ, $n = 1.04$ – 1.06 .

4. Обсуждение результатов эксперимента и численных расчетов

Эффект управления эффективной высотой барьеров иллюстрирует рис. 3, где приведены измеренные и рассчитанные ВАХ диодов с δ -легированием в пределах $(4$ – $16) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в плоскости, отстоящей от металла на 2.5 нм. Видно, что рассчитанные ВАХ имеют хорошее качественное согласие с экспериментальными. Подобные расчеты и эксперименты были проведены для более глубокого расположения плоскости легирования, 5 нм. Во всех случаях были определены эффективные высоты

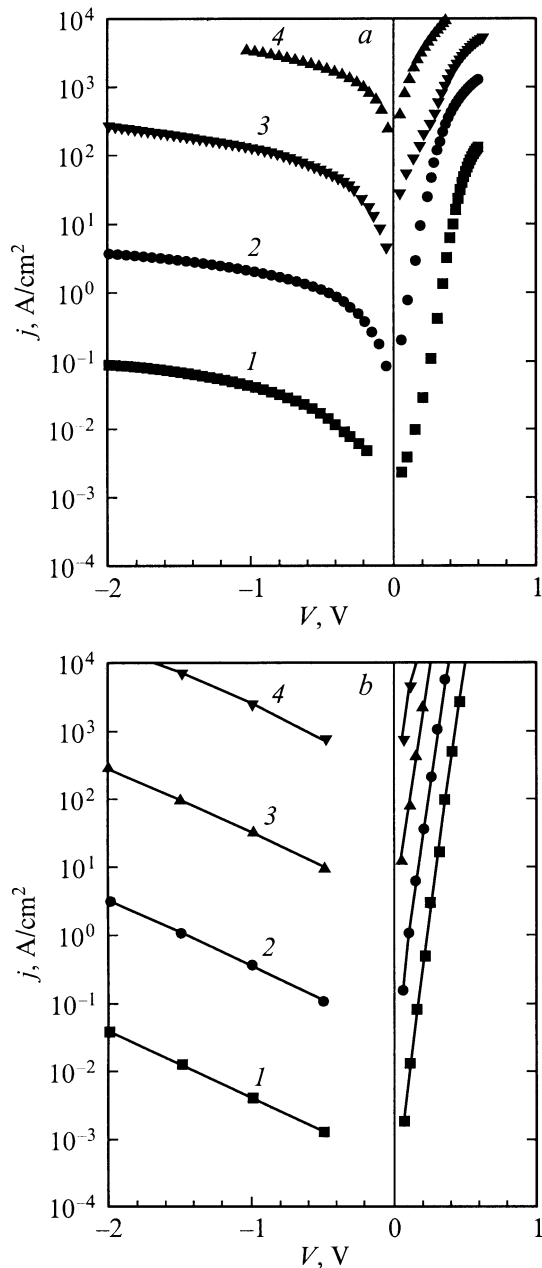


Рис. 3. Вольт-амперные характеристики модифицированных диодов Шоттки: *a* — эксперимент; *b* — расчет. $x_0 = 2.5$ нм; $N_{2D}, 10^{12} \text{ см}^{-2}$: 1 — 4, 2 — 8, 3 — 12, 4 — 16.

барьеров, которые показаны на рис. 4 в зависимости от слоевой концентрации. Как видно из рисунка, эффективная высота барьера линейно уменьшается с ростом поверхностной концентрации, и это означает, что представление о туннельно-прозрачном „клубе“ над непрозрачным классическим пьедесталом является хорошей физической идеализацией. Чем глубже расположен δ -слой, тем сильнее может быть уменьшение эффективной высоты барьера (рис. 4, кривая 2), но лишь при условии сохранения достаточно большой туннельной прозрачности треугольного барьера. Что происходит, ес-

ли это условие перестает выполняться, показала вторая серия экспериментов.

Во второй серии экспериментов фиксировалась поверхностная плотность доноров N_{2D} и изменялась глубина x_0 в интервале 2.5–60 нм. Экспериментальные и рассчитанные ВАХ для случая $N_{2D} = 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ приведены на рис. 5, *a* и *b* соответственно. Видно, что с ростом x_0 сначала наблюдается уменьшение эффективной высоты барьера ϕ^{eff} , а затем — рост, обусловленный падением туннельной прозрачности потенциального барьера между металлом и δ -слоем. Минимальное достижимое значение $\phi^{\text{eff}} \approx 0.33$ эВ (кривая 2) для $N_{2D} = 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ соответствует $x_0 \approx 10$ нм. Из рисунка видно, что расчет достаточно хорошо предсказывает детали поведения ВАХ, например, образование двух участков насыщения на обратной ветви, что связано с изменением суммарного поверхностного заряда в δ -слое при заполнении его электронами при изменении внешнего напряжения смещения. Немонотонная зависимость эффективной высоты барьера ϕ^{eff} от глубины расположения δ -слоя x_0 при двух значениях N_{2D} приведена на рис. 6, *a*. Обработка рассчитанных ВАХ для тех же значений поверхностной концентрации примеси в δ -слое дает очень близкие результаты, как показано на том же рисунке. С ростом N_{2D} минимум $\phi^{\text{eff}}(x_0)$ достигается при более близком расположении δ -слоя от контакта металл–полупроводник. На рис. 6, *b* показано, как меняется рассчитанный фактор неидеальности в зависимости от глубины залегания δ -слоя x_0 для двух значений N_{2D} . Обращает на себя внимание рост фактора неидеальности n в области $x_0 \approx 10$ нм,

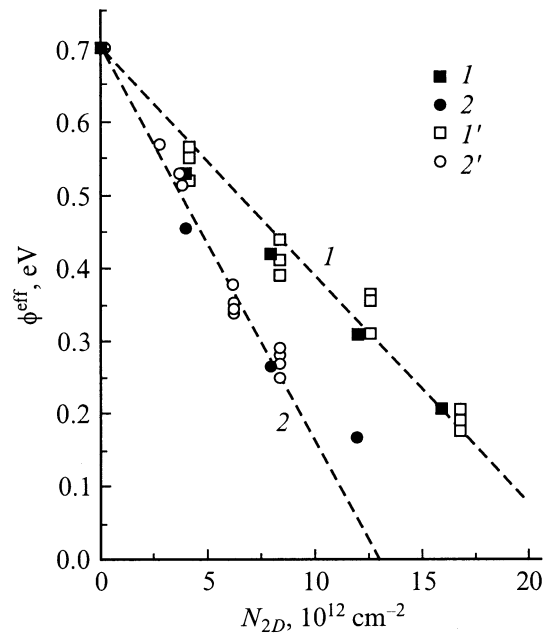


Рис. 4. Изменение эффективной высоты барьера в зависимости от уровня δ -легирования для двух расстояний δ -слоя от контакта металл–полупроводник. $x_0 = 2.5$ (*1, 1'*) и 5 нм (*2, 2'*). *1, 2* — расчет, *1', 2'* — эксперимент.

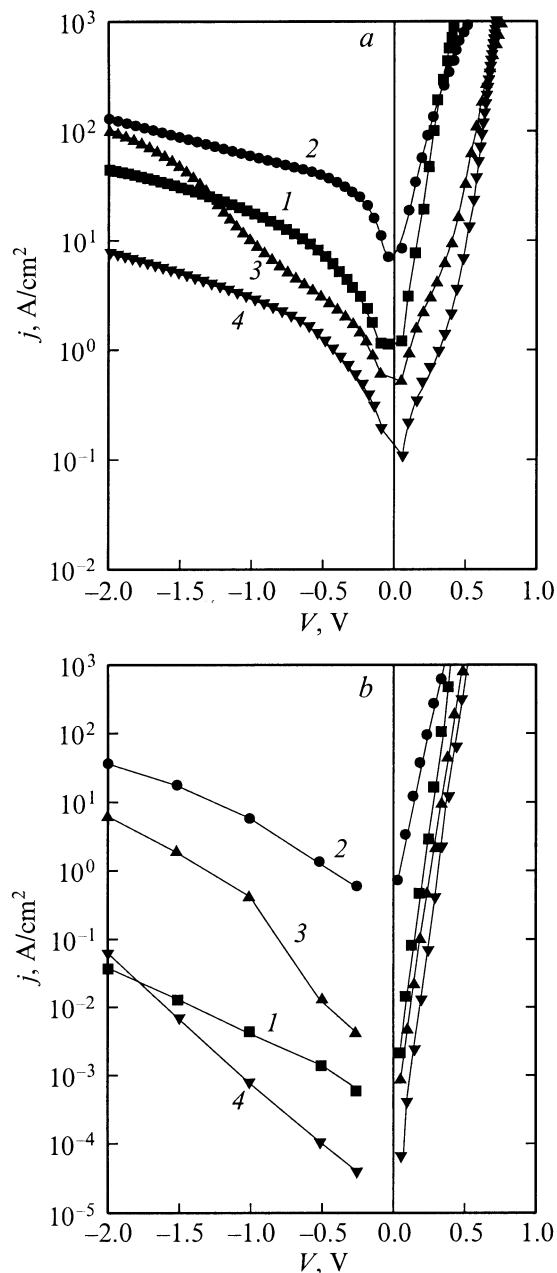


Рис. 5. Вольт-амперные характеристики модифицированных диодов Шоттки: *a* — эксперимент, *b* — расчет. $N_{2D} = 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, x_0 , нм: 1 — 2,5, 2 — 10, 3 — 30, 4 — 60.

т. е. при такой глубине залегания, когда начинает падать вероятность туннелирования электронов через барьер. При дальнейшем увеличении x_0 начинает превалировать термоэлектронная компонента тока и фактор неидеальности уменьшается. Таким образом, самым неблагоприятным случаем является расположение δ -слоя на глубине 8–15 нм. Этот же эффект проявляется в случае сильного однородного легирования вблизи контакта металл–полупроводник, наблюдался в [6] при толщинах сильно легированного слоя более 10 нм, что резко ограничивает возможности получения диодов с низкой

высотой барьера таким способом. Реально достигнутое в [6] понижение высоты барьера составило 0,6 эВ при факторе неидеальности до 1,3 (концентрация объемного легирования была $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Поэтому использование δ -легированной плоскости оказывается более предпочтительным. Из совместного анализа данных рис. 6, *a* и *b* видно, что возможно получение диодов с малой высотой барьера ($\sim 0,2$ эВ) и фактором неидеальности $n \leq 1,5$ при расположении δ -слоя на глубинах, не превышающих 5 нм. Это подтверждается экспериментально (рис. 6, *b*). Несколько завышенные значения фактора неидеальности, чем предсказываемые теорией при расстояниях $x_0 \leq 5$ нм, могут быть обусловлены глубокими заряженными состояниями доноров в δ -слое. В работе [15] показано, что уже при $N_{2D} > 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ начинается формирование протяженного хвоста плотности состояний доноров в запрещенной зоне GaAs, глубина их залегания достигает 100 мэВ. С ростом N_{2D} эффект становится более выраженным. При малых ϕ^{eff} ($\phi^{\text{eff}} < 0,2$ эВ) и (или) больших прямых смещениях это приводит к перезарядке глубоких донорных состояний

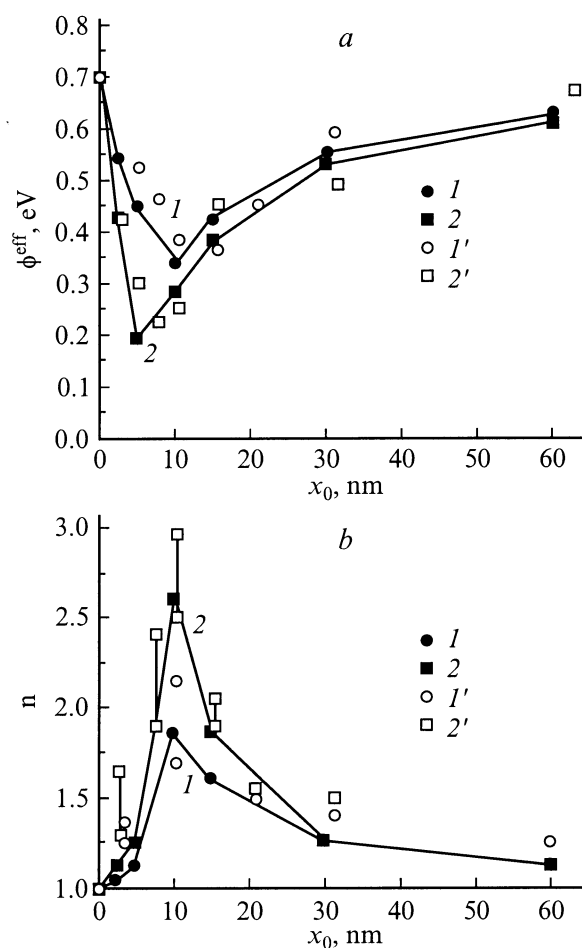


Рис. 6. Зависимость эффективной высоты барьера ϕ_{eff} (*a*) и коэффициента неидеальности n (*b*) от глубины залегания δ -слоя x_0 при: $N_{2D} = 4 \cdot 10^{12}$ (*1, 1'*) и $8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ (*2, 2'*). *1, 2* — расчет; *1', 2'* — эксперимент.

δ -слоя. Вследствие этого величина эффективного барьера ϕ^{eff} в (4) приобретает дополнительную зависимость от напряжения смещения и возрастает величина фактора неидеальности. Очевидно, что этот эффект при статических измерениях усложняет картину и в принципе может приводить к разным значениям ϕ^{eff} и n для прямых и обратных ветвей ВАХ. При $N_{2D} = 1.6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ и $x_0 = 2.5 \text{ нм}$ вычисления дают значения $\phi^{\text{eff}} \approx 0.2 \text{ эВ}$ и $n \leq 1.5$, которые подтверждаются экспериментом. На основе этих структур были изготовлены микроволновые диоды, эффективно детектирующие излучение без напряжения смещения [13].

5. Заключение

В результате проведенных исследований показана возможность управления эффективной высотой барьера Шоттки с помощью приповерхностного δ -легирования, которое усиливает роль термополевой (туннельной) компоненты тока проводимости. Численное моделирование токопереноса при достаточно больших изменениях параметров δ -легирования позволило выявить основные закономерности и определить наиболее приемлемые технологические параметры диодов с пониженной высотой барьера на основе GaAs. Методом МОГФЭ изготовлены диодные структуры Al/n-GaAs($\delta(n)$). Показано, что их характеристики находятся в хорошем согласии с результатами численного моделирования. В частности, показана возможность формирования барьерного контакта к n-GaAs, имеющего высоту $\sim 0.2 \text{ эВ}$ и фактор неидеальности $n < 1.5$.

Авторы выражают благодарность В.Я. Алешкину, И.М. Нефедову и И.А. Шерешевскому за полезные обсуждения и помощь в составлении программ и организации математических расчетов.

Работа выполнена при поддержке грантами РФФИ № 01-02-16451, а также МНТП „Физика твердотельных наноструктур“.

Список литературы

- [1] Э.Х. Родерик. *Контакты металл-полупроводник* (М., Радио и связь, 1982).
- [2] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984) ч. 1.
- [3] G. Myburg, F.D. Auret, W.E. Meyer, C.W. Louw, M.J. van Staden. *Thin Sol. Films*, **325**, 181 (1998).
- [4] Т.А. Брянцева, В.Е. Любченко, Е.О. Юневич. *Радиотехника и электроника*, N 8, 1306 (1995).
- [5] В.И. Шашкин, А.В. Мурель, Ю.Н. Дроздов, В.М. Данильцев, О.И. Хрыкин. *Микроэлектроника*, **26**, 57 (1997).
- [6] S. Sassen, B. Witzigmann, C. Wolk, H. Brugger. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **47**, 24 (2000).
- [7] E.F. Schubert, J.E. Cunningham, W.S. Tsang, T.H. Chiu. *Appl. Phys. Lett.*, **49**, 292 (1986).
- [8] M. Missous, T. Taskin. *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, 1848 (1993).
- [9] R.K. Kupka, W.A. Anderson. *J. Appl. Phys.*, **69**, 3623 (1991).
- [10] J.M. Geraldo, W.N. Podrigues, G. Medeiros-Ribeiro, A.G. de Oliveira. *J. Appl. Phys.*, **73**, 820 (1993).
- [11] *Туннельные явления в твердых телах* (М., Мир, 1973) [Пер. с англ.: *Tunneling Phenomena in Solids*, ed. by E. Burstein, S. Lundqvist (N. Y., Plenum Press, 1969)].
- [12] V.I. Shashkin, V.M. Daniltsev, O.I. Khrykin, A.V. Murel, Yu.I. Chechenin, A.V. Shabanov. *Proc. Int. Semicond. Dev. Res. Symp. (ISDRS)* (Charlottseville, USA, 1997) p. 147.
- [13] В.И. Шашкин, В.Л. Вакс, Е.А. Вopilкин, В.М. Данильцев, А.В. Мурель, А.В. Масловский, О.И. Хрыкин, Ю.И. Чеченин. *Матер. 7-й Росс. конф. „Арсенид галлия“* (Томск, 1999) с. 175.
- [14] I.H. Tan, G.L. Snider, E.L. Hu. *J. Appl. Phys.*, **68**, 4071 (1990).
- [15] В.Я. Алешкин, В.М. Данильцев, А.В. Мурель, О.И. Хрыкин, В.И. Шашкин. *ФТП*, **32**, 733 (1998).

Редактор Л.В. Шаронова

Control of current transport mode in Schottky barrier by δ -doping: design and experiment for Al/GaAs

V.I. Shashkin, A.V. Murel, V.M. Danil'tsev, O.I. Khrykin

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Possibility is considered of controlling the effective height of the barrier in Schottky diodes by introducing a δ -doped layer near the metal-semiconductor contact. Reduction of the effective height of the barrier is determined by an increased role of tunneling of the carriers through the barrier. A complete quantum-mechanical numerical simulation of the effect produced by δ -layer parameters (concentration and depth) on the current-voltage characteristics of the modified diodes is carried out for Schottky barriers on n-GaAs. Comparison of the computation results obtained and the experimental characteristics of the diodes made by the method of metal-organic chemical vapor epitaxy shows rather good an agreement. Analysis of the carried-out research has allowed to choose optimum parameters of δ -layers for producing low barrier diodes ($\sim 0.2 \text{ eV}$) with a reasonable ideality factor ($n < 1.5$). Such structures may be used as a basis for manufacturing microwave detector diodes without voltage bias.