06,13

Электропроводность и интерфейсные явления в тонкопленочных гетероструктурах на основе ниобата лития и танталата лития

© С.И. Гудков¹, А.В. Солнышкин¹, Р.Н. Жуков², Д.А. Киселев², Е.М. Семенова¹, А.Н. Белов³

¹ Тверской государственный университет,

Тверь, Россия

² Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС",

Москва, Россия

³ Национальный исследовательский университет "Московский институт электронной техники",

Зеленоград, Москва, Россия

E-mail: becauseimaphysicist@yandex.ru

Поступила в Редакцию 18 января 2023 г. В окончательной редакции 18 января 2023 г. Принята к публикации 28 января 2023 г.

> Исследованы электрофизические свойства структур металл-сегнетоэлектрик-полупроводник — Cu/LiNbO₃/Si и Ag/LiTaO₃/Si — с толщиной сегнетоэлектрического слоя 200 nm. Нанесение сегнетоэлектрического слоя осуществлялось методом высокочастотного магнетронного распыления. Исследование топографии пленок показало зеренную структуру. Изучена электропроводность структур, определены механизмы, которыми можно описать электрическую проводимость исследуемых образцов. Для структур Cu/LiNbO₃/Si это ток, ограниченный пространственным зарядом, прыжковая проводимость и эмиссия Шоттки; для структур Ag/LiTaO₃/Si — ток, ограниченный пространственным зарядом, и прыжковая проводимость. Асимметричный вид вольт-амперных характеристик может указывать на наличие потенциального барьера на интерфейсах. Для изучаемых структур определена величина потенциального барьера.

> Ключевые слова: структуры металл-сегнетоэлектрик-полупроводник, тонкие пленки, ниобат лития, танталат лития, электрофизические свойства, электропроводность, потенциальный барьер.

DOI: 10.21883/FTT.2023.04.55294.7

1. Введение

Ниобат лития LiNbO₃ (LN) и танталат лития LiTaO₃ (LT) являются сегнетоэлектриками со структурой ильменита [1]. При этом из-за более высокой температуры плавления (около 1650°C для LT, около 1255°C для LN) и более низкой температуры Кюри (около 600°С для LT, около 1050°С для LN) танталат лития остается менее изученным материалом, чем ниобат лития [1-3]. В настоящее время наиболее перспективным является использование сегнетоэлектрических материалов, в частности LiNbO3 и LiTaO3, не в виде объемных кристаллов, а в виде тонкопленочных структур, нанесенных на подложки. Это является актуальным из-за возможности использования тонких пленок в микроэлектромеханических системах, микроэлектронных устройствах и оптических устройствах [4]. Тонкие пленки ниобата лития и танталата лития могут быть использованы в тонкопленочных волноводных оптических модуляторах, в устройствах на поверхностных акустических волнах, в запоминающих устройствах с произвольным доступом, в пироэлектрических детекторах и так далее [5,6]. Чаще всего на основе тонких пленок сегнетоэлектриков изготавливаются гетероструктуры — металлсегнетоэлектрик-полупроводник (МСП). При исследовании МСП-структур необходимо учитывать, что на их электрофизические свойства оказывают влияние интерфейсные явления [7].

В настоящей работе исследуются топография поверхности, электропроводность и барьерные свойства на интерфейсах тонкопленочных МСП-гетероструктур на основе ниобата лития и танталата лития. Настоящая работа является продолжением исследований, опубликованных ранее [8,9]. Здесь детально рассмотрены механизмы проводимости и определены величины барьеров.

2. Объекты исследования и методика эксперимента

Объектами исследования в настоящей работе служили тонкопленочные гетероструктуры металл-сегнетоэлектрик-полупроводник на основе ниобата лития и танталата лития. Тонкий сегнетоэлектрический слой наносился на кремниевые подложки с ориентацией (111) и *р*-типом проводимости (*p*-Si) с помощью метода высокочастотного (BЧ) магнетронного распыления в вакуумной камере SUNPLA-40TM (Республика Корея). Перед нанесением сегнетоэлектрического слоя кремниевые подложки очищались с использованием ионной пушки в течение 5 min. В качестве мишени при синтезе образцов LN использовалась пластина Z-среза LiNbO₃. Напыление осуществлялось в аргоновой среде. Давление составляло 0.5 Ра, мощность магнетрона — 60 W. Постростовой отжиг проводился в воздушной среде при температуре 700°C в течение 120 min. Толщина слоя LN составляла 200 nm. На свободную поверхность пленки наносились медные круглые электроды диаметром 2.45 ± 0.21 mm. Таким образом, образцы имеют МСП-структуру — Cu/LiNbO₃/Si.

При изготовлении образцов LT в качестве мишени использовалась пластина Z-среза LiTaO₃. Синтез проводился в плазме кислорода (40 vol%) и аргона (60 vol%). Давление составляло 0.57 Ра, мощность магнетрона — 150 W. Постростовой отжиг проводился дважды в воздушной среде: при температуре 550°C в течение часа и при температуре 700°C в течение часа. Толщина слоя LiTaO₃ составляла 200 nm. На свободную поверхность пленки танталата лития наносились круглые серебряные электроды диаметром 4.5 ± 0.3 mm. Образцы имеют МСП-структуру — Ag/LiTaO₃/Si.

Исследование поверхности образцов осуществлялось в Лаборатории магнитных материалов Центра коллективного пользования научной аппаратурой и оборудованием Тверского государственного университета с использованием сканирующего зондового микроскопа SolverNext (ООО "НТ-МДТ СИ", Российская Федерация) в режиме атомно-силовой микроскопии (АСМ). Исследование зависимости протекающего через структуру тока от величины приложенного смещающего напряжения (вольт-амперные характеристики, ВАХ) проводилось с помощью измерителя иммитанса Е7-20 (ОАО "МНИПИ", Республика Беларусь) в интервале напряжений от -5 до 5 V. Приложенное к структуре напряжение считается положительным, если к верхнему электроду приложен положительный потенциал, и отрицательным при обратной полярности. Эксперимент осуществлялся при комнатной температуре.

3. Результаты исследования и их обсуждение

Изображения поверхности тонких пленок LN и LT, полученные с помощью ACM, представлены на рис. 1. Из рис. 1, *а* видно, что тонкопленочные образцы LN имеют зернистую структуру. Диаметр зерен варьируется в интервале от 100 до 300 nm. Из рис. 1, *b* видно, что поверхность образцов LT имеет двухуровневую структуру. Верхний уровень представлен зернами с размерами $3-4\,\mu$ m. Нижний уровень (рис. 1, *c*) имеет зернистую структуру со средней шероховатостью до 2.5 nm. Поверхностные эффекты могут оказывать влияние на электрическую проводимость МСП-структуры.

Известно также [10], что проводящие свойства тонких диэлектрических пленок сильно зависят от состава пленки, ее толщины, уровня энергии и плотности ловушек. Вольт-амперные характеристики МСП-структур в большинстве случаев имеют сложный характер. В малых полях плотность электрического тока сквозь тонкую пленку мала и зачастую может быть описана с помощью закона Ома

$$J = \sigma E = q n_0 \mu \frac{V}{d},\tag{1}$$

где J — плотность тока, σ — удельная электропроводность, E — напряженность электрического поля, q — элементарный заряд, n_0 — концентрация свободных носителей заряда в тепловом равновесии, μ — дрейфовая подвижность электронов, V — приложенное напряжение смещения, d — толщина пленки.

С увеличением напряженности внешнего поля ток проводимости приобретает заметную величину, обусловленную различными механизмами проводимости [11]. Согласно [11], к основным механизмам проводимости, существующим в структуре металл-диэлектрикполупроводник (МДП-структура), а значит, и в МСПструктуре, относятся эмиссия Шоттки, туннелирование Фаулера-Нордгейма, прямое туннелирование, эмиссия Пула-Френкеля, прыжковая проводимость, ток, ограниченный пространственным зарядом (ТОПЗ). Определить основной для различных интервалов напряжений механизм проводимости можно с помощью перестроения ВАХ в координатах, позволяющих выделить линейные участки, соответствующие тому или иному механизму проводимости.

Учитывая то, что в настоящей работе исследуются пленки толщиной 200 nm, и то, что чаще всего прямое туннелирование возможно только в пленках, толщина которых составляет менее 2–3 nm, а туннелирование Фаулера–Нордгейма — в пленках с толщиной порядка нескольких нанометров, эти механизмы проводимости можно исключить из рассмотрения [12,13]. В литературе [14,15] сообщается о возможности описания электропроводности пленок ниобата лития с помощью закона Ома (в малых полях), эмиссии Пула–Френкеля, эмиссии Шоттки и прыжковой проводимости.

На рис. 2 представлены типичные зависимости плотности тока от напряжения смещения для тонких пленок ниобата лития (рис. 2, a) и тонких пленок танталата лития (рис. 2, b). Вид зависимостей J от V носит диодный характер. ВАХ для тонких пленок ниобата лития и танталата лития обсуждались нами ранее в [8,9].

На рис. З изображены ВАХ образцов LN, перестроенные в координатах, позволяющих выделить линейные участки, соответствующие тому или иному механизму проводимости. Из рис. 3, a видно, что при прямом смещении на зависимости J от V в логарифмическом масштабе наблюдается несколько линейных участков. Такое поведение зависимости плотности тока от смещающего напряжения характерно для тока, ограниченного пространственным зарядом. В случае отсутствия лову-



Рис. 1. Топография поверхности, полученная методом атомно-силовой микроскопии для образцов ниобата лития (*a*) и танталата лития (*b*, *c*).



Рис. 2. Зависимость плотности тока от напряжения смещения для тонких пленок ниобата лития (*a*) [8] и танталата лития (*b*) [9]. На вставках — обратное смещение в увеличенном масштабе.



Рис. 3. Вольт-амперные характеристики МСП-структуры на основе ниобата лития при прямом смещении, характерные для ТОПЗ (*a*), а также при обратном смещении, характерные для прыжковой проводимости (*b*) и эмиссии Шоттки (*c*). Прямые линии — линейная аппроксимация.

шек ТОПЗ описывается выражением [11]:

$$J = \frac{9}{8}\mu\varepsilon_0\varepsilon_s\,\frac{V^2}{d^3},\tag{2}$$

где ε_0 — электрическая постоянная, ε_s — статическая диэлектрическая проницаемость. В случае наличия ловушек справедливо выражение

$$J = \frac{9}{8} \mu \varepsilon_0 \varepsilon_s \theta \frac{V^2}{d^3},\tag{3}$$

где θ — отношение плотности свободных носителей заряда к плотности общего количества носителей. На участке I на рис. 3, *а* ВАХ подчиняется закону Ома. Величина удельной электропроводности, рассчитанная при малых полях из наклона прямой на зависимости *J* от *V* (рис. 2, *a*), составляет ~ $1.02 \cdot 10^{-9} \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$; а величина, рассчитанная из пересечения прямой (участок I на рис. 3, *a*) с осью ординат на зависимости *J* от *V* в логарифмическом масштабе составляет

 $\sim 1.21 \cdot 10^{-9} \,\Omega^{-1} \cdot m^{-1}$. На участке II при напряжении смещения от $V_T \approx 0.46 \,\mathrm{V}$ до $V_{TFL} \approx 0.78 \,\mathrm{V}$ имеет место ловушечный ТОПЗ. Напряжение V_{TFL} — напряжение полного заполнения ловушек, после которого начинается быстрое возрастание плотности тока (участок III). На участке IV наблюдается безловушечный ТОПЗ. Зная величину напряжения полного заполнения ловушек V_{TFL} , можно определить плотность ловушек N_T из выражения [16]:

$$N_T = \frac{2\varepsilon_s \varepsilon_0 V_{TFL}}{q d^2}.$$
 (4)

Учитывая, что $V_{TFL} \approx 0.78$ V, плотность ловушек составляет $\sim 9.55 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$. Значение ε_s для ниобата лития при расчете принималось равным ~ 44.29 [1].

При обратном смещении для МСП-структуры на основе LiNbO₃ линейный участок на зависимости J от V (рис. 2, a) наблюдается в интервале напряжений от 0 до 0.22 V, что свидетельствует о подчинении ВАХ закону Ома при данных значениях напряжения. Величина удель-

ной электропроводности, рассчитанная по наклону прямой на этом участке, составляет ~ $0.79 \cdot 10^{-9} \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$. При увеличении значений напряжения смещения выше 0.22 V и до 0.96 V линейный участок наблюдается на зависимости $\ln J$ от V (рис. 3, b), что свидетельствует о том, что основным механизмом здесь является прыжковая проводимость. Прыжковая проводимость описывается выражением [11]:

$$J = qan_e v \exp\left[\frac{qaE}{kT} - \frac{E_a}{kT}\right],$$
(5)

где *а* — средняя длина прыжка, *n_e* — концентрация электронов в зоне проводимости сегнетоэлектрика, и частота тепловых колебаний электронов в узлах ловушек, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, E_a — энергия активации. Согласно выражению (5), по наклону прямой на графике $\ln J$ от V можно рассчитать среднюю длину прыжка а, которая соответствует среднему расстоянию между ловушками. В нашем случае $a \approx 21.46$ nm. С другой стороны, среднее расстояние между ловушками можно определить из величины плотности ловушек, учитывая, что $a^3 = N_T^{-1}$ объем, приходящийся на одну ловушку. Значение а, рассчитанное таким образом, составляет ~ 21.88 nm, что хорошо согласуется со значением, определенным по наклону прямой на графике ln J от V. При дальнейшем увеличении напряжения смещения происходит переход к эмиссии Шоттки. Выражение для эмиссии Шоттки имеет вид

$$J = A^* T^2 \exp\left[\frac{-q(\varphi_b - \sqrt{qE/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r})}{kT}\right], \qquad (6)$$

где $A^* = 4\pi q k^2 m^*/h^3$ — эффективная постоянная Ричардсона, φ_b — величина барьера Шоттки, ε_r — оптическая диэлектрическая проницаемость, m^* — эффективная масса электрона в сегнетоэлектрике, h — постоянная Планка. Зависимость $\ln J$ от $V^{1/2}$, линейная в случае эмиссии Шоттки, представлена на рис. 3, *c*. Из формулы (6) по наклону прямой на графике зависимости $\ln J$ от $V^{1/2}$ можно рассчитать величину показателя преломления $n_r = \sqrt{\varepsilon_r}$. Из расчетов было получено $n_r \approx 2.8$, что хорошо согласуется со значениями из литературы: при длине волны ~ 0.4–0.6 μ m величина показателя преломления LiNbO₃ составляет ~ 2.3–2.4 [17,18].

Определение доминирующих механизмов проводимости также осуществлялось для МСП-структур на основе танталата лития, и ВАХ в соответствующих координатах представлены на рис. 4. При прямом смещении наиболее вероятно, что перенос носителей можно охарактеризовать с помощью тока, ограниченного пространственным зарядом. Об этом свидетельствует несколько линейных участков на зависимости J от V в логарифмическом масштабе, представленной на рис. 4, *а*. Участок I на рис. 4, *а* соответствует выполнению закона Ома при напряжении от 0 до $V_T \approx 0.38$ V. Величина удельной электропроводности на данном участке составляет ~ 4.87 · 10⁻¹² Ω^{-1} · m⁻¹ из наклона прямой на зависимости *J* от *V* (рис. 2, *b*) и ~ 7.34 · 10⁻¹² Ω^{-1} · m⁻¹ из пересечения прямой с осью ординат на рис. 4, *a* (участок I). Участок II на рис. 4, *a* соответствует ТОПЗ с ловушками. Величина плотности ловушек N_T для данной структуры, рассчитанная при значении $V_{TFL} \approx 0.50$ V с использованием выражения (4), составляет ~ 5.89 · 10²² m⁻³ (значение ε_s для танталата лития принималось равным ~ 42.60 [1]). При дальнейшем увеличении напряжения смещения происходит резкий рост плотности тока (участок III) и переход к безловушечному ТОПЗ (участок IV).

При обратном смещении на зависимости J от V для МСП-структуры на основе LiTaO₃ линейный участок, соответствующий закону Ома, наблюдается до напряжения 1.46 V. Величина удельной электропроводности, определенная для этого участка из наклона прямой на графике *J* от *V* (рис. 2, *b*) составляет $\sim 2.20 \cdot 10^{-12} \,\Omega^{-1} \cdot m^{-1}$. В интервале напряжений от 1.48 до 2.20 V наиболее вероятным механизмом проводимости является прыжковая проводимость (рис. 4, b). Величина среднего расстояния между ловушками, рассчитанная из наклона прямой на графике зависимости $\ln J$ от V, имеет значение ~ 24.93 nm; значение *a*, рассчитанное с использованием величины плотности ловушек, определенной для прямого смещения, составляет ~ 25.71 nm. Последующее увеличение обратного напряжения смещения, вероятнее всего, показывает тенденцию перехода к току, ограниченному пространственным зарядом (рис. 4, с). Причем этот ток не является безловушечным током, ограниченным пространственным зарядом, так как коэффициент наклона прямой $\alpha \approx 4.6$. Это свидетельствует о токе, ограниченном ловушками, для которого зависимость плотности тока от напряжения смещения при экспоненциальном распределении ловушек по энергиям имеет вид $J \sim V^{\alpha}$, где $\alpha > 2$ и зависит от плотности ловушек [19,20].

Одной из характеристик пленочной структуры, влияющей на ее электропроводность, является величина потенциального барьера, возникающего на интерфейсе. Значение этого параметра необходимо учитывать при выборе той или иной модели описания контактных свойств [21]. Представленные на рис. 2 ВАХ имеют асимметричный характер, что может свидетельствовать о наличии потенциального барьера на интерфейсах [22].

Величину потенциального барьера на интерфейсе можно определить с помощью I-V-метода [23–25]. Этот метод применялся для сегнетоэлектриков в [26]. При малых значениях напряжения смещения плотность тока J в диодах Шоттки может быть описана с помощью выражения

$$J = J_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right) \right] \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right),\tag{7}$$

где n — коэффициент идеальности (для идеального диода n = 1, но обычно n имеет значение больше единицы), J_0 — плотность тока насыщения, определяемая



Рис. 4. ВАХ МСП-структуры на основе танталата лития при прямом смещении, характерные для ТОПЗ (*a*), а также при обратном смещении, характерные для прыжковой проводимости (*b*) и ТОПЗ (*c*). Прямые линии — линейная аппроксимация.

выражением

$$J_0 = A^* T^2 \exp\left(\frac{-q\varphi_e}{kT}\right),\tag{8}$$

где φ_e — эффективная величина потенциального барьера при нулевом смещении. Величина φ_e может быть рассчитана с помощью выражения (8)

$$\varphi_e = (\ln A^* T^2 - \ln J_0) \frac{kT}{q}.$$
 (9)

Значение $\ln J_0$ определяется по точке пересечения оси ординат прямой на зависимости $\ln [J/\{1 - \exp(-qV/kT)\}]$ от V при прямом смещении. Из наклона данной прямой (коэффициент наклона β) также можно определить коэффициент идеальности по формуле

$$n = \frac{q}{kT} \frac{1}{\beta}.$$
 (10)

Зависимости $\ln[J/\{1 - \exp(-qV/kT)\}]$ от V для образцов LN и LT представлены на рис. 5. Для расчета величины барьера значения эффективной массы

электрона m^* были взяты из [27]: для ниобата лития значение m^* принималось равным $0.058m_0$, для танталата лития — $0.098m_0$, где m_0 — масса электрона в вакууме. Согласно расчетам, для тонкой пленки LiNbO₃ $\varphi_e \approx 0.84 \text{ eV}$, $n \approx 1.16$, для тонкой пленки LiNbO₃ $\varphi_e \approx 0.84 \text{ eV}$, $n \approx 1.16$, для тонкой пленки LiTaO₃ $\varphi_e \approx 1.01 \text{ eV}$, $n \approx 2.81$. Высокое значение коэффициента идеальности для пленки LT может быть обусловлено дополнительными эффектами, связанными с двухуровневой структурой поверхности пленки, границами зерен и влиянием последовательного сопротивления [24].

Иной способ определения величины потенциального барьера был предложен в работе [28]. Для описания влияния последовательного сопротивления на электропроводность предлагается представлять диод Шоттки последовательным соединением диода и сопротивления R_s [24,28]. В этом случае плотность тока через структуру описывается выражением

$$J = J_0 \exp\left(\frac{q(V - SR_s J)}{nkT}\right),\tag{11}$$



Рис. 5. Зависимость $\ln[J/\{1 - \exp(-qV/kT)\}]$ от V для тонких пленок ниобата лития (*a*) и танталата лития (*b*). Прямые линии — линейная аппроксимация.



Рис. 6. Зависимости $dV/d(\ln J)$ и H от J для МСП-структур на основе ниобата лития (a) и танталата лития (b). Прямые линии — линейная аппроксимация.

где S — площадь электрода. Отсюда легко получить

$$\frac{dV}{d(\ln J)} = SR_s J + \frac{nkT}{q}.$$
 (12)

Зависимость $dV/d(\ln J)$ от J имеет линейный участок при малых значениях напряжения смещения. Угловой коэффициент прямой, аппроксимирующей линейную зависимость, равен SR_s , а пересечение с осью ординат происходит при $dV/d(\ln J) = nkT/q$. Для определения высоты барьера рассматривается функция H(J):

$$H(J) = V - \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{J}{A^*T^2}\right).$$
 (13)

С другой стороны, согласно [28],

$$H(J) = SR_s J + n\varphi_e. \tag{14}$$

Пересечение прямой на графике зависимости H(J) с осью ординат дает значение $n\varphi_e$. Рассчитав с помощью выражения (12) величину *n*, можно найти высоту потенциального барьера. Наклон прямой на графике H(J)также позволяет определить значение R_s и проверить значение, полученное из (12). Данный метод применялся для сегнетоэлектриков в работах [29,30].

Зависимости $dV/d(\ln J)$ и H от J для тонких пленок ниобата лития и танталата лития представлены на рис. 6. Для тонкой пленки ниобата лития с помощью данного метода были получены следующие величины: $n \approx 3.06$, $\varphi_e \approx 0.80$ eV; R_s из выражения (12) примерно равно 25.19 MΩ, R_s из выражения (14) примерно равно 21.65 MΩ. Для МСП-структуры на основе танталата лития $n \approx 2.66$, $\varphi_e \approx 1.02$ eV; R_s из выражения (12) примерно равно 2.83 MΩ, R_s из выражения (14) примерно равно 2.62 MΩ. Величины потенциального барьера,



Рис. 7. Зависимости *F*(*V*, *γ*) при различных значениях *γ* для МСП-структур на основе ниобата лития (*a*) и танталата лития (*b*).

полученные данными методом, находятся в хорошем соответствии со значениями, найденными с использованием зависимости $\ln[J/\{1 - \exp(-qV/kT)\}]$ от V.

Иной способ определения R_s и φ_e был предложен в работе [31]. Для решения проблемы последовательного сопротивления в рассмотрение вводится функция

$$F(V) = \frac{V}{2} - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J(V)}{A^*T^2}\right),\tag{15}$$

где J(V) — плотность тока в зависимости от напряжения смещения. Зависимость F(V) имеет минимум при некотором значении $V = V_0$. Высота потенциального барьера может быть найдена из соотношения

$$\varphi_e = F(V_0) + \frac{V_0}{2} - \frac{kT}{q}.$$
 (16)

Величина последовательного сопротивления может быть найдена из выражения

$$R_s = \frac{kT}{qJ_ZS},\tag{17}$$

где J_Z — величина плотности тока при V_0 .

Видно, что данный метод не позволяет определить величину коэффициента идеальности n. Для нахождения n необходимо воспользоваться модифицированной версией этого метода [32]: в функцию F(V) вводится постоянная γ , имеющая произвольное значение, большее, чем n:

$$F(V,\gamma) = \frac{V}{\gamma} - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J(V)}{A^*T^2}\right).$$
 (18)

Задавая два различных значения γ , можно получить две системы уравнений

$$\varphi_{e1} = F(V_{01}, \gamma_1) + \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{\gamma_1}\right) V_{01} - \frac{(\gamma_1 - n)kT}{nq}, \quad (19)$$

$$\varphi_{e2} = F(V_{02}, \gamma_2) + \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{\gamma_2}\right) V_{02} - \frac{(\gamma_2 - n)kT}{nq}$$
(20)

И

$$R_{s1} = \frac{(\gamma_1 - n)kT}{aJ_{z1}S},$$
 (21)

$$R_{s2} = \frac{(\gamma_2 - n)kT}{qJ_{Z2}S}.$$
 (22)

Решая совместно уравнения (19) и (20), можно найти фактор идеальности

$$n_{V} = \left(V_{01} - V_{02} + \frac{\gamma_{2}kT}{q} - \frac{\gamma_{1}kT}{q} \right) / \left(F(V_{02}, \gamma_{2}) - F(V_{01}, \gamma_{1}) - \frac{V_{02}}{\gamma_{2}} + \frac{V_{01}}{\gamma_{1}} \right), \quad (23)$$

либо *п* определяется из выражений (21) и (22):

$$n_J = \frac{\gamma_1 J_{Z2} - \gamma_2 J_{Z1}}{J_{Z2} - J_{Z1}}.$$
 (24)

На рис. 7 представлены зависимости $F(V, \gamma)$ для немодифицированного метода ($\gamma = 2$) и для модифицированного метода. При использовании немодифицированного метода для гетероструктур на основе ниобата лития имеем $\varphi_e \approx 0.83$ eV, $R_s \approx 23.11$ MΩ, для гетероструктур на основе танталата лития — $\varphi_e \approx 1.33$ eV, $R_s \approx 13.38$ MΩ. В случае модифицированного метода величина γ варьировалась от 2.1 до 3.5. Для образца ниобата лития при различных сочетаниях γ_1 и γ_2 значения φ_e колеблются в пределах от 0.81 до 0.82 eV; значения n_V — от 1.17 до 2.56; значения n_J — от 1.04 до 2.57. Для LiTaO₃ при различных сочетаниях γ_1 и γ_2 величина φ_e принимает значения от 1.00 до 1.30 eV; значения n_V — от 1.23 до 3.36; значения n_J — от 1.11 до 3.33. Наилучшим образом величины, определенные



Рис. 8. Зонная диаграмма исследуемых МСП-структур: Φ_m — работа выхода металла, χ — энергия сродства к электрону, E_g — ширина запрещенной зоны, E_c — энергия, соответствующая дну зоны проводимости, E_v — энергия, соответствующая потолку валентной зоны.

данным методом, соотносятся с данными, полученными методами из [23,28]: при $\gamma_1 = 2.5$, $\gamma_2 = 3.1$ для LiNbO₃

$$\varphi_{e1}(n_V) \approx \varphi_{e2}(n_V) \approx \varphi_{e1}(n_J) \approx \varphi_{e2}(n_J) \approx 0.81 \,\mathrm{eV},$$

 $n_V \approx 1.69, \quad n_J \approx 1.73, \quad R_{s1}(n_V) \approx 22.83 \,\mathrm{M\Omega},$

 $R_{s2}(n_V) pprox 22.37 \,\mathrm{M\Omega}, \quad R_{s1}(n_J) pprox R_{s2}(n_J) pprox 21.79 \,\mathrm{M\Omega};$ при $\gamma_1 = 2.8, \, \gamma_2 = 3.4 \,$ для LiTaO $_3$

$$\begin{split} \varphi_{e1}(n_V) &\approx \varphi_{e2}(n_V) \approx 1.02 \text{ eV}, \\ \varphi_{e1}(n_J) &\approx \varphi_{e2}(n_J) \approx 1.01 \text{ eV}, \\ n_V &\approx 2.55, \quad n_J \approx 2.70, \quad R_{s1}(n_V) \approx 2.44 \text{ M}\Omega, \\ R_{s2}(n_V) &\approx 1.21 \text{ M}\Omega, \quad R_{s1}(n_J) \approx R_{s2}(n_J) \approx 1.00 \text{ M}\Omega. \end{split}$$

С целью анализа вольт-амперных характеристик рассмотрим зонную диаграмму гетероструктуры металлсегнетоэлектрик-*p*-Si, которая представлена на рис. 8. При построении диаграммы предполагалось, что при низких температурах преобладающими носителями заряда в ниобате лития и танталате лития являются электронные поляроны [33,34].

На контакте металл-сегнетоэлектрик образуется барьер типа Шоттки, величина которого определяется работой выхода металла, а также электронным сродством и положением уровня Ферми сегнетоэлектрика. Вблизи противоположной поверхности искривление зон в сегнетоэлектрике со стороны гетероперехода сегнетоэлектрик-*p*-Si обусловлено электронным сродством материалов и положением уровня Ферми до контакта. При контакте уровни Ферми в средах выравниваются и происходит инжекция носителей заряда в сегнетоэлектрик. Уровень Ферми в кремнии пересекает дно зоны проводимости, и в приконтактной области кремний будет представлять собой вырожденный полупроводник *n*-типа. Таким образом, кремниевую подложку со стороны сегнетоэлектрика можно рассматривать как материал с высокой электропроводностью близкой к металлической. На основе ВАХ можно сделать вывод, что основной вклад в величину энергетического барьера для носителей заряда будет вносить интерфейс металл– сегнетоэлектрик.

4. Заключение

Изучена топография тонкопленочных МСП-гетероструктур на основе ниобата лития и танталата лития. Определено, что образцы имеют зернистую структуру. Исследована зависимость протекающего через структуру тока от приложенного напряжения смещения. Определено, что ВАХ МСП-структур на основе LiNbO3 и LiTaO₃ при малых напряжениях смещения подчиняются закону Ома. С увеличением напряжения наиболее вероятными механизмами проводимости в тонких пленках ниобата лития являются при прямом смещении ТОПЗ, при обратном смещении прыжковая проводимость и эмиссия Шоттки; в тонких пленках танталата лития при прямом смещении ТОПЗ, при обратном смещении прыжковая проводимость и ТОПЗ. ВАХ демонстрируют асимметричный характер, что может являться признаком наличия потенциального барьера на интерфейсах. С помощью методов, основанных на ВАХ, определена величина барьера: для тонкой пленки LN она составляет от 0.80 до 0.84 eV, для тонкой пленки LT от 1.01 до 1.02 eV. Анализ электропроводящих свойств рассматриваемых гетероструктур выполнен на основе энергетических диаграмм. Показано, что основной вклад в наблюдаемые эффекты вносит барьер на интерфейсе металл-сегнетоэлектрик.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-29-01102).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- V.Ya. Shur. Lithium niobate and lithium tantalate-based piezoelectric materials. In: Advanced Piezoelectric Materials / Ed. Kenji Uchino. Woodhead Publishing, Cambridge (2010). P. 204. https://doi.org/10.1533/9781845699758.1.204
- A. Bartasyte, S. Margueron, T. Baron, S. Oliveri,
 P. Boulet. Adv. Mater. Interfaces 4, 8, 1600998 (2017). https://doi.org/10.1002/admi.201600998
- [3] А.В. Яценко, М.Н. Палатников, Н.В. Сидоров, А.С. Притуленко, С.В. Евдокимов. ФТТ 57, 5, 932 (2015). https://doi.org/10.21883/FTT.2019.07.47836.379

- [4] A.R. Damodaran, J.C. Agar, S. Pandya, Z. Chen, L. Dedon, R. Xu, B. Apgar, S. Saremi, L.W. Martin. J. Phys.: Condens. Matter 28, 26, 263001 (2016). https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/26/263001
- M.P. Sumets, V.A. Dybov, V.M. Ievlev. Inorg. Mater. 53, 13, 1361 (2017). https://doi.org/10.1134/S0020168517130015
- [6] V. Stenger, M. Shnider, S. Sriram, D. Dooley, M. Stout. Proc. SPIE 8261, Terahertz Technology and Applications V, 82610Q (2012). https://doi.org/10.1117/12.908523
- [7] Z. Xi, J. Ruan, C. Li, C. Zheng, Z. Wen, J. Dai, A. Li, D. Wu. Nature Commun. 8, 1, 15217 (2017). https://doi.org/10.1038/ncomms15217
- [8] С.И. Гудков, К.Д. Бакланова, М.В. Каменщиков, А.В. Солнышкин, А.Н. Белов. ФТТ 60, 4, 739 (2018). https://doi.org/10.21883/FTT.2018.04.45685.09D
- [9] S.I. Gudkov, A.V. Solnyshkin, D.A. Kiselev, A.N. Belov. Cerâmica 66, 379, 291 (2020). https://doi.org/10.1590/0366-69132020663792885
- [10] B.L. Yang, P.T. Lai, H. Wong. Microelectron. Reliab. 44, 5, 709 (2004). https://doi.org/10.1016/j.microrel.2004.01.013
- [11] F.-C. Chiu. Adv. Mater. Sci. Eng. 2014, 578168 (2014). https://doi.org/10.1155/2014/578168
- [12] V. Mikhelashvili, G. Eisenstein. J. Appl. Phys. 89, 6, 3256 (2001). https://doi.org/10.1063/1.1349860
- [13] E. Lim, R. Ismail. Electronics 4, 3, 586 (2015). https://doi.org/10.3390/electronics4030586
- [14] V. Joshi, D. Roy, M.L. Mccartney. Integr. Ferroelectr. 6, 1–4, 321 (1995). https://doi.org/10.1080/10584589508019375
- [15] N. Easwaran, C. Balasubramanian, S.A.K. Narayandass, D. Mangalaraj. Phys. Status Solidi A **129**, *2*, 443 (1992). https://doi.org/10.1002/pssa.2211290214
- [16] F.-C. Chiu, H.-W. Chou, J.Y. Lee. J. Appl. Phys. 97, 10, 103503 (2005). https://doi.org/10.1063/1.1896435
- [17] D.S. Smith, H.D. Riccius, R.P. Edwin. Opt. Commun. 17, 3, 332 (1976). https://doi.org/10.1016/0030-4018(76)90273-X
- [18] D.F. Nelson, R.M. Mikulyak. J. Appl. Phys. 45, 8, 3688 (1974). https://doi.org/10.1063/1.1663839
- [19] W. Brütting, S. Berleb, A.G. Mückl. Synth. Met. 122, 1, 99 (2001). https://doi.org/10.1016/S0379-6779(00)01342-4
- [20] Y. Gu, L.J. Lauhon. Appl. Phys. Lett. 89, 14, 143102 (2006). https://doi.org/10.1063/1.2358316
- [21] V.G. Bozhkov, N.A. Torkhov, A.V. Shmargunov. J. Appl. Phys. 109, 7, 073714 (2011). https://doi.org/10.1063/1.3561372
- [22] V. Joshi, D. Roy, M.L. Mecartney. Appl. Phys. Lett. 63, 10, 1331 (1993). https://doi.org/10.1063/1.109721
- [23] Э.Х. Родерик. Контакт металл-полупроводник / Под ред. Г.В. Степанова. Радио и связь, М. (1982). 208 с.
- [24] Z. Çaldíran, A.R. Deniz, Ş. Aydoğan, A. Yesildag,
 D. Ekinci. Superlattices Microstruct. 56, 45 (2013). https://doi.org/10.1016/j.spmi.2012.12.004
- [25] B. Akkal, Z. Benamara, B. Gruzza, L. Bideux. Vacuum 57, 2, 219 (2000). https://doi.org/10.1016/S0042-207X(00)00131-7
- [26] D.Y. Wang. J. Am. Ceram. Soc. 77, 4, 897 (1994). https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1994.tb07245.x
- [27] J. Yang, J. Long, L. Yang. Phys. B: Condens. Matter 425, 12 (2013). https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.05.017
- [28] S.K. Cheung, N.W. Cheung. Appl. Phys. Lett. 49, 2, 85 (1986). https://doi.org/10.1063/1.97359
- [29] P. Durmus, S. Altindal. Int. J. Mod. Phys. B 31, 27, 1750197 (2017). https://doi.org/10.1142/S0217979217501971

- [30] A. Buyukbas-Ulusan, S. Altíndal-Yerişkin, A. Tataroğlu.
 J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 29, 19, 16740 (2018). https://doi.org/10.1007/s10854-018-9767-8
- [31] H. Norde. J. Appl. Phys. 50, 7, 5052 (1979). https://doi.org/10.1063/1.325607
- [32] K.E. Bohlin. J. Appl. Phys. **60**, *3*, 1223 (1986). https://doi.org/10.1063/1.337372
- [33] A.A. Esin, A.R. Akhmatkhanov, V.Ya. Shur. Ferroelectrics 496, 1, 102 (2016).

https://doi.org/10.1080/00150193.2016.1157438

[34] A. El-Bachiri, F. Bennani, M. Bousselamti. Spectrosc. Lett. 47, 5, 374 (2014). https://doi.org/10.1080/00387010.2013.857356

Редактор Е.Ю. Флегонтова