

# Электрические свойства наноконтактов металл–полупроводник

© Н.В. Востоков<sup>¶</sup>, В.И. Шашкин

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

(Получена 7 июля 2003 г. Принята к печати 20 января 2004 г.)

Проведены расчеты потенциала в полупроводнике вокруг сферических и цилиндрических металлических наноконтактов. Проанализированы электрические свойства наноконтактов с малыми характерными размерами  $a \ll S$  ( $S$  — ширина обедненной области в плоской геометрии). Показано, что наноконтакты имеют слабую зависимость емкости от напряжения, большее, чем в плоском случае, снижение высоты барьера Шоттки за счет сил изображений, а также малую инерционность отклика до частот терагерцового диапазона.

## 1. Введение

Изучение свойств контактов металл–полупроводник малых размеров в настоящее время вызывает большой интерес [1]. Этот интерес связан с развитием зондовых методов исследования полупроводниковых структур, разработкой и изготовлением наноразмерных контактов Шоттки для микроволновых и терагерцовых применений и попытками формирования двух- или трехмерных массивов наноконтактов в качестве искусственной нелинейной среды [2–6]. При изготовлении эпитаксиальными методами такая среда представляет собой многослойную систему квантовых точек или металлических наночастиц, внедренных в полупроводниковую матрицу [7,8]. Широко известным примером такой среды является эпитаксиальный GaAs, выращенный при пониженной температуре и имеющий нанокластеры As [6,9].

В этих структурах интерфейс контакта металл–полупроводник не является плоским, а имеет отличную от нуля кривизну, электрическое поле распределено по другому и его величина вблизи границы с металлом может быть гораздо больше, чем в плоском случае. Такая же ситуация возникает в случае контактов малых размеров, когда нельзя пренебречь краевыми эффектами. Возникающее при этом распределение потенциала существенно меняется по сравнению со случаем большого плоского контакта.

Далее рассматриваются два варианта контактов: металлическая сфера радиуса  $a$  и металлический бесконечный цилиндр радиуса  $a$ , помещенные в однородный полупроводник (для определенности  $n$ -типа). Для нахождения распределения электростатического потенциала контакта  $\varphi$  решается уравнение Пуассона:

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi eN}{\varepsilon}, \quad (1)$$

где  $N$  — концентрация примеси в однородно легированном полупроводнике,  $\varepsilon$  — его диэлектрическая проницаемость,  $e$  — элементарный заряд. Используется приближение полного обеднения [10], приводящее к следующим граничным условиям на поверхности металла  $\Omega_1$  и на поверхности  $\Omega_2$ , ограничивающей область

полного обеднения полупроводника:

$$\varphi(r)|_{\Omega_1} = 0, \quad (2)$$

$$\varphi(r)|_{\Omega_2} = u_c - u. \quad (3)$$

Здесь  $u_c$  — контактная разность потенциалов,  $u$  — напряжение на контакте. Предполагаем, что  $u_c$  сохраняет свою величину независимо от размеров и формы контакта. На рис. 1,  $a$  изображено сечение наноконтакта, помещенного в полупроводник, либо в виде металлической сферы — плоскостью, проходящей через ее центр, либо в виде металлического цилиндра — плоскостью, перпендикулярной его оси симметрии. К граничным условиям добавляется условие для определения формы поверхности  $\Omega_2$ :

$$\nabla\varphi(r)|_{\Omega_2} = 0. \quad (4)$$

В такой постановке задачи удается с достаточной точностью рассчитать распределение потенциала вокруг наноконтакта, вычислить емкость контакта и ее зависимость от напряжения, а также определить величину понижения высоты барьера Шоттки за счет сил изображения.

Решение задачи (1)–(4) при  $N = 0$  остается верным для случая, когда металлическая сфера или цилиндр наполовину погружены в полупроводник, как это показано на рис. 1,  $b$ . Очевидно, что при  $N \neq 0$  и при том условии, что можно пренебречь приповерхностным изгибом зон полупроводника на границе с воздухом (вакуумом),

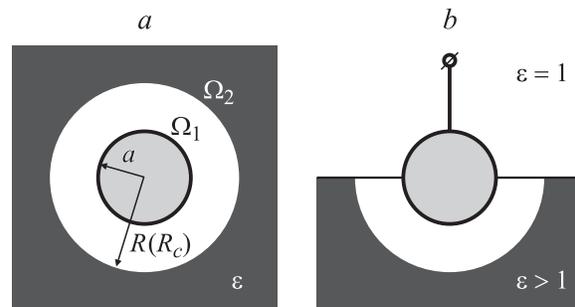


Рис. 1. Сечения наноконтактов в виде металлической сферы или металлического цилиндра с радиусами  $a$  в бесконечном полупроводнике ( $a$ ) и на границе полубесконечного полупроводника ( $b$ ).

<sup>¶</sup> E-mail: vostokov@ipm.sci-nnov.ru

решение задачи о наноконтакте, внедренном в объем полупроводника (рис. 1, *a*) в некотором приближении переносится на ситуацию, представленную рис. 1, *b*, т.е. предполагается, что полученные результаты грубо описывают электрические свойства металлических наноконтактов также и на поверхности полупроводника. Актуальным примером является контактная атомно-силовая микроскопия с одновременным измерением вольт-амперных характеристик через проводящий зонд и образец [5].

## 2. Распределение потенциала и свойства сферического контакта

Для металлической сферы радиуса  $a$  в полупроводнике будем решать уравнение (1) в сферической системе координат с началом координат в центре сферы, с условиями (2)–(4). В этом случае  $\Omega_1$  — сфера с радиусом  $r = a$ ;  $\Omega_2$ , в силу симметрии задачи, — тоже сфера с радиусом  $r = R$  (рис. 1, *a*). Решение легко найти в виде

$$\varphi(r) = (u_c - u) \left[ \frac{a^2}{3S^2} \left( 1 - \frac{r^2}{a^2} \right) + \frac{2R^3}{3aS^2} \left( 1 - \frac{a}{r} \right) \right]. \quad (5)$$

Здесь

$$S = \sqrt{\frac{\varepsilon(u_c - u)}{2\pi eN}}$$

— ширина области полного обеднения полупроводника для бесконечного плоского контакта, а величина  $R$  является решением уравнения

$$2R^3 - 3aR^2 - 3aS^2 + a^3 = 0. \quad (6)$$

Единственным действительным решением уравнения (6) является следующее:

$$R = \frac{a}{2} + \frac{a^2}{2(2\sqrt{3}\sqrt{3a^2S^4 - a^4S^2} + 6aS^2 - a^3)^{1/3}} + \frac{1}{2} \left( 2\sqrt{3}\sqrt{3a^2S^4 - a^4S^2} + 6aS^2 - a^3 \right)^{1/3}. \quad (7)$$

Удобно ввести ширину области полного обеднения полупроводника вокруг металлической сферы:  $l = R - a$ . В результате для величины  $l$  получаем уравнение

$$a = \frac{2}{3} \frac{l^3}{S^2 - l^2}. \quad (8)$$

Из выражения (8) следует, что если радиус сферы  $a \rightarrow \infty$ , то  $l \rightarrow S$ , что соответствует переходу к плоской задаче. При  $a \rightarrow 0$ ,  $l \rightarrow 0$  и, когда  $l$  становится много меньше  $S$ , имеем

$$l = \left( \frac{3}{2} aS^2 \right)^{1/3} \gg a. \quad (9)$$

Емкость контакта легко вычислить:

$$C(u) = \frac{dQ}{d(u_c - u)} = 4\pi eNR^2 \frac{dR}{d(u_c - u)}, \quad (10)$$

где  $Q$  — заряд обедненной области полупроводника. Используя (6), находим

$$C(u) = a\varepsilon \frac{R(u)}{R(u) - a} = a\varepsilon \left( 1 + \frac{a}{l(u)} \right). \quad (11)$$

При  $a \rightarrow \infty$ ,  $l \rightarrow S$  получаем

$$C(u) \rightarrow \frac{a^2\varepsilon}{S(u)} = \frac{\sigma\varepsilon}{4\pi S(u)} \propto (u_c - u)^{1/2},$$

где  $\sigma$  — площадь сферы радиуса  $a$ , т.е. получаем емкость плоского контакта Шоттки с площадью  $\sigma$ . Если  $a \ll l < S$ , то величина  $C \approx a\varepsilon$  становится емкостью сферы в диэлектрике и не зависит от приложенного напряжения.

Используя (5) и учитывая потенциал взаимодействия электрона со своим изображением в металлической сфере, получим для потенциальной энергии электрона

$$V(x) = e(u_c - u) \times \left[ \frac{a^2}{3S^2} \frac{x}{a} \left( 2 + \frac{x}{a} \right) - \frac{2R^3}{3aS^2} \frac{x}{x+a} - \frac{2c}{x(2 + \frac{x}{a})} \right]. \quad (12)$$

Здесь  $x = r - a$  — расстояние от поверхности металла,

$$c = \frac{e}{4\varepsilon(u_c - u)}$$

— параметр размерности длины, характеризующий масштаб потенциала сил изображений. При обратных и небольших прямых напряжениях для всех полупроводников  $c < 1$  нм. Третье слагаемое в квадратных скобках выражения (12) существенно только для  $x \leq c$ . Так как  $c \ll a$ , членом  $\frac{x}{a}$  в знаменателе можно пренебречь. Кроме того, если интересоваться формой потенциальной энергии только вблизи металлической сферы для значений  $x$ , меньших или порядка  $a$ , то при  $a \ll S$  в выражении (12) можно пренебречь первым слагаемым в квадратных скобках. Это означает, что вблизи достаточно маленькой металлической сферы всегда можно пренебречь электрическим полем, создаваемым пространственным зарядом полупроводника по сравнению с полем поверхностного заряда сферы. Таким образом, для значений  $x$ , меньших или порядка  $a$ , получим для потенциальной энергии электрона приближенное выражение

$$V(x) \approx -e(u_c - u) \left[ g \frac{x}{x+a} + \frac{c}{x} \right], \quad (13)$$

где введено обозначение

$$g = \frac{2R^3}{3aS^2}.$$

Используя (7), можно разложить параметр  $g$  по степеням  $a/S$ :

$$g = 1 + \left( \frac{3}{2} \frac{a}{S} \right)^{2/3} + \left( \frac{3}{2} \right)^{1/3} \left( \frac{a}{S} \right)^{4/3} + \dots, \quad (14)$$

откуда следует, что при  $a \ll S$ ,  $g \approx 1$  и слабо зависит от напряжения и концентрации примеси. В выражении для понижения высоты барьера за счет сил изображений

$$\Delta V = e(u_c - u) \left( 2\sqrt{\frac{cg}{a}} - \frac{c}{a} \right) \quad (15)$$

можно пренебречь малым членом  $c/a$ , так что

$$\Delta V \approx 2e(u_c - u) \sqrt{\frac{cg}{a}}. \quad (16)$$

Таким образом, если  $a \ll S$ , можно считать, что  $g = 1$  и не зависит от приложенного к контакту напряжения. Это эквивалентно пренебрежению пространственным зарядом полупроводника. В этом случае

$$\Delta V = 2e(u_c - u) \sqrt{\frac{c}{a}} = \sqrt{\frac{e^3(u_c - u)}{a\varepsilon}} \propto (u_c - u)^{1/2}, \quad (17)$$

что отличается от зависимости в плоском контакте Шоттки [11]:

$$\begin{aligned} \Delta V_p &= 2e(u_c - u) \sqrt{\frac{2c}{S}} \\ &= \left( \frac{8\pi N e^7 (u_c - u)}{\varepsilon^3} \right)^{1/4} \propto (u_c - u)^{1/4}. \end{aligned} \quad (18)$$

Сравнивая (17) и (18), видим, что в случае маленького сферического контакта снижение высоты барьера  $\Delta V$  больше, чем в плоском контакте:

$$\frac{\Delta V_p}{\Delta V} = \sqrt{\frac{2a}{S}} \ll 1,$$

сильнее зависит от напряжения и не зависит от концентрации примеси  $N$ .

Когда  $a$  меньше, но порядка  $S$ , вклад электрического поля пространственного заряда полупроводника в общее поле вблизи вершины потенциальной энергии становится заметным. Это выражается в том, что в разложении (14) нельзя пренебречь слагаемыми после 1. В результате величина  $g$  становится заметно большей 1 и начинает зависеть от напряжения и  $N$ .

### 3. Форма потенциала и свойства цилиндрического контакта

Для бесконечного металлического цилиндра радиуса  $a$  в полупроводнике будем решать уравнение (1) в цилиндрической системе координат (ось  $z$  является осью симметрии цилиндра), с условиями (2)–(4). Теперь  $\Omega_1$  — поверхность цилиндра с радиусом  $r = a$ ,  $\Omega_2$  — поверхность цилиндра с радиусом  $r = R_c$  (рис. 1,  $a$ ). Получим решение

$$\varphi(r) = (u_c - u) \left[ \frac{a^2}{2S^2} \left( 1 - \frac{r^2}{a^2} \right) + \frac{R_c^2}{S^2} \ln \left( \frac{r}{a} \right) \right], \quad (19)$$

где  $R_c$  и ширина области полного обеднения  $l_c$  определяются из уравнений

$$\frac{R_c^2}{S^2} \ln \left( \frac{R_c}{a} \right) = 1 - \frac{a^2}{2S^2} + \frac{R_c^2}{2S^2}, \quad (20)$$

$$\ln \left( 1 + \frac{l_c}{a} \right) = \frac{1}{2} + \frac{2S^2 - a^2}{2(l_c + a)^2}. \quad (21)$$

Из (21) следует, что если радиус цилиндра  $a \rightarrow \infty$ , то  $l_c \rightarrow S$ . При  $a \rightarrow 0$   $l_c$  стремится к 0 логарифмически медленно, так что  $l_c \approx S$  для любых физических разумных значений радиуса.

Действуя так же, как в сферическом случае, получим емкость на единицу длины цилиндра:

$$C(u) = \frac{\varepsilon}{2 \ln \left( 1 + \frac{l_c(u)}{a} \right)}. \quad (22)$$

При  $a \rightarrow \infty$   $l_c \rightarrow S$  и решение переходит в ответ для плоского контакта Шоттки. Если  $a \ll S$ , то

$$C(u) \approx \frac{\varepsilon}{2} \left[ \ln \frac{l_c(u)}{a} \right]^{-1}$$

и слабо зависит от напряжения.

Используя (19) и учитывая потенциал взаимодействия электрона со своим плоским изображением, получим потенциальную энергию электрона:

$$V(x) = e(u_c - u) \left[ \frac{a^2}{2S^2} \frac{x}{a} \left( 2 + \frac{x}{a} \right) - \frac{R_c^2}{S^2} \ln \left( 1 + \frac{x}{a} \right) - \frac{c}{x} \right]. \quad (23)$$

Если  $a \ll S$ , то для  $x$ , меньших или порядка  $a$ , получим

$$V(x) = -e(u_c - u) \left[ g_c \ln \left( 1 + \frac{x}{a} \right) + \frac{c}{x} \right], \quad (24)$$

где

$$g_c = \frac{R_c^2}{S^2}.$$

Понижение высоты барьера при учете сил взаимодействия изображений составляет

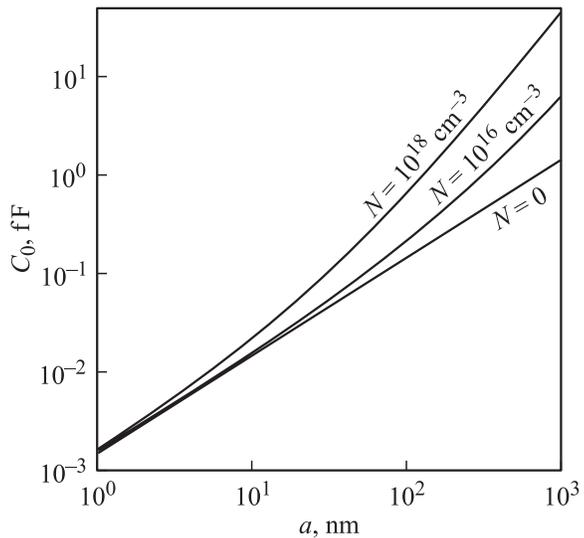
$$\Delta V_c \approx 2e(u_c - u) \sqrt{\frac{cg_c}{a}}. \quad (25)$$

Поскольку  $g_c < g$ , понижение высоты барьера для цилиндрического контакта меньше, чем для сферического.

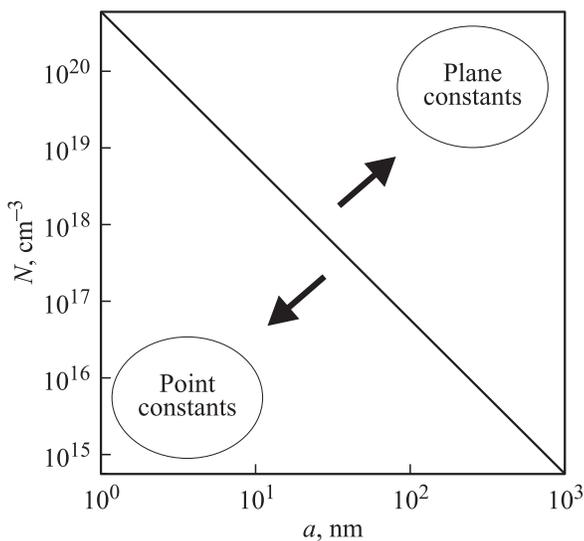
### 4. Обсуждение результатов

Очевидно, что эффекты, связанные с непланарностью или малыми размерами, более сильно проявляются в сферической геометрии контактов. Рассмотрим более подробно их характеристики.

На рис. 2 показаны зависимости емкости контакта  $C_0$  (при  $u = 0$ ) от радиуса металлической сферы  $a$  для различных концентраций примеси  $N$ . Зависимости



**Рис. 2.** Зависимости емкости сферического контакта  $C_0$  (при  $u = 0$ ,  $u_c = 0.7$  В,  $\epsilon = 13.1$ ) от радиуса  $a$  для различных концентраций примеси  $N$ .

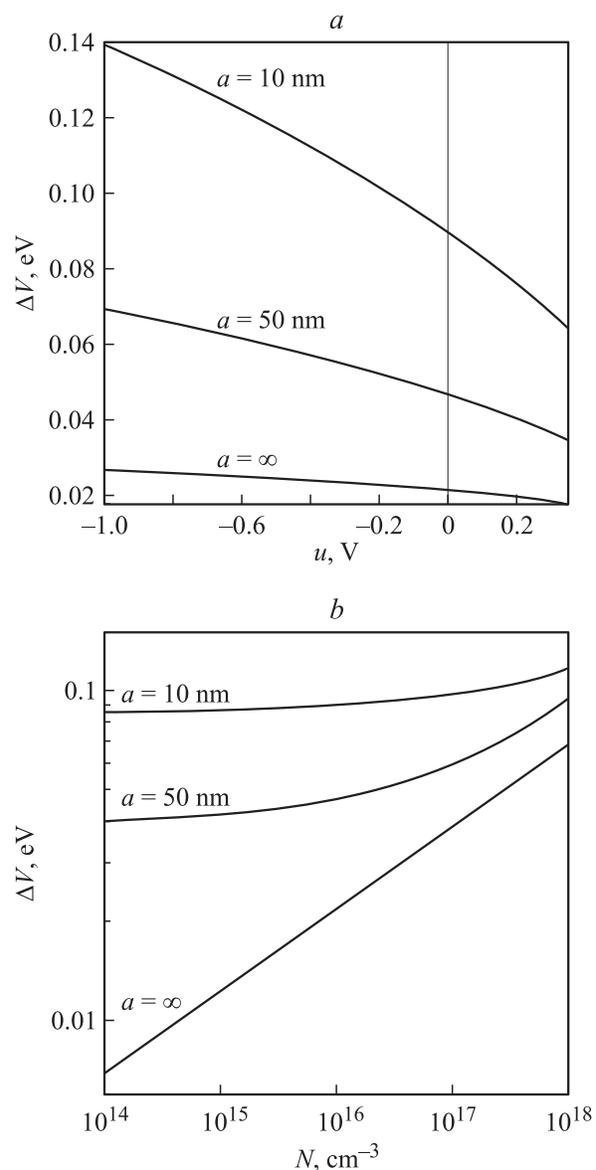


**Рис. 3.** Плоскость параметров  $N, a$ . Прямая линия соответствует равенству радиуса металлической сферы и ширины области обеднения вокруг нее ( $a = l$ ). Выше вдали от этой линии параметры соответствуют плоскому контакту, далеко внизу от линии  $a = l$  — точечному.

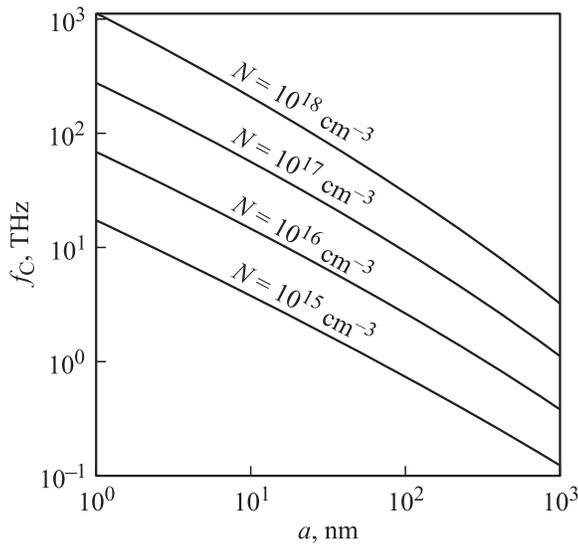
построены для GaAs ( $u_c = 0.7$  В,  $\epsilon = 13.1$ ) с использованием (7) и (11). Как видно из рисунка, для малых  $a \ll l$  емкость почти не зависит от уровня легирования и  $C_0 \propto a$ . В этом случае емкость  $C$  практически не зависит от напряжения, что следует из (11). При  $a/l \rightarrow \infty$  емкость  $C$  пропорциональна площади контакта, зависит от  $N$  и изменяется с напряжением, как в случае плоской геометрии,  $C(u) \propto (u_c - u)^{-1/2}$ . Промежуточной является ситуация, когда  $a \approx l$ . На рис. 3 изображена плоскость параметров  $N$  и  $a$ , разделенная на две части линией,

на которой  $a = l$  (при этом  $l = S\sqrt{\frac{3}{5}}$ ). При удалении от этой границы вниз (где  $a \ll l$ ) попадаем в область параметров, в которой концентрация примеси не важна. Наоборот, при уходе вверх (где  $a \gg l$ ) не важны кривизна контакта и краевые эффекты.

На рис. 4 показаны зависимости величины понижения высоты барьера  $\Delta V$  от приложенного напряжения (рис. 4, *a*) и от концентрации легирующей примеси (рис. 4, *b*) для различных радиусов сферы  $a$ . Зависимости построены для GaAs ( $u_c = 0.7$  В) с помощью соотношений (4), (14) и (16). На рис. 4, *a* концентрация примеси  $N = 10^{16}$  см<sup>-3</sup> [ $S(0) = 320$  нм], на рис. 4, *b* для всех кривых  $u = 0$ . Как видно из рис. 4, *a*, понижение высоты



**Рис. 4.** Зависимости величины понижения высоты барьера  $\Delta V$  для сферических контактов различных радиусов  $a$  от приложенного напряжения ( $N = 10^{16}$  см<sup>-3</sup>,  $u_c = 0.7$  В,  $\epsilon = 13.1$ ) (*a*) и от концентрации легирующей примеси ( $u = 0$ ,  $u_c = 0.7$  В,  $\epsilon = 13.1$ ) (*b*).



**Рис. 5.** Зависимости критической частоты  $f_c$  от радиуса сферы  $a$  при различном уровне легирования GaAs ( $u_c = 0.7$  В).

барьера в случае сфер малых радиусов гораздо больше по величине и более сильно зависит от напряжения, чем в плоском случае ( $a = \infty$ ). Зависимость  $\Delta V$  от концентрации легирующей примеси на рис. 4, *b* для сферических контактов остается слабой, пока ширина плоской области обеднения  $S$  не сравняется в величину  $a$ .

Наконец, можно оценить быстродействие отклика наноконтакта металл–полупроводник. Вычислим величину критической частоты

$$f_c = \frac{1}{2\pi r_s C_0}$$

в зависимости от радиуса сферы  $a$  для различных уровней легирования [10]. Здесь  $r_s$  — сопротивление растекания полупроводника за пределами области обеднения, равное

$$r_s = \frac{\rho}{4\pi R(0)},$$

где  $\rho$  — удельное сопротивление полупроводника. При  $a \rightarrow 0$   $f_c \propto a^{-2/3}$ , при  $a \rightarrow \infty$   $f_c \propto a^{-1}$ . На рис. 5 приведены результаты расчетов для GaAs. Видно, что критическая частота сильно зависит от  $a$  и достигает частот терагерцового диапазона даже при относительно невысоком уровне легирования  $\sim 10^{15} - 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

## 5. Заключение

Проведены расчеты распределения потенциала в полупроводнике вокруг сферических и цилиндрических наноконтактов. Использовалось приближение полного обеднения. Проанализированы электрические свойства наноконтактов с малыми характерными размерами  $a \ll S$  ( $S$  — ширина обедненной области в плоской геометрии).

В результате расчетов показано, что ширина области обеднения вокруг наночастицы  $l \gg a$ , что обеспечивает малую емкость контакта и слабую ее зависимость от напряжения и концентрации легирующей примеси.

Большая, чем в плоском случае, величина электрического поля вблизи металлической наночастицы обеспечивает большее понижение высоты потенциального барьера из-за сил изображений и более сильную зависимость понижения высоты барьера от приложенного напряжения по сравнению с плоским случаем. При этом форма потенциала вблизи металла определяется главным образом полем зарядов на границе металл–полупроводник, а поле пространственного заряда примеси в полупроводнике не существенно, что приводит к слабой зависимости понижения высоты барьера от уровня легирования.

Величина критической частоты наноконтакта Шоттки достигает терагерцового диапазона даже при относительно невысоком уровне легирования  $\sim 10^{15} - 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , что свидетельствует о малой инерционности отклика.

## Список литературы

- [1] Takhee Lee, Jia Liu, Nien-Po Chen, R.P. Andres, D.B. Janes, R. Reifenberger. *J. Nanoparticle Res.*, **2**, 345 (2000).
- [2] G.D.J. Smit, S. Rogge, T.M. Klapwijk. *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 3852 (2002).
- [3] G.D.J. Smit, M.G. Flokstra, S. Rogge, T.M. Klapwijk. *Microelectron. Eng.*, **64**, 429 (2002).
- [4] Hideki Hasegawa, Taketomo Sato, Chinami Kaneshiro. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **17** (4), 1856 (1999).
- [5] I. Tanaka, I. Kamiya, H. Sakaki. *J. Cryst. Growth*, **201/202**, 1194 (1999).
- [6] Kian-Giap Gan, Jin-Wie Shi, Yen-Hung Chen, Chi-Kuang Sun, Yi-Jen Chiu, J.E. Bowers. *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 4054 (2002).
- [7] I. Aberg, K. Deppert, M.H. Magnusson, I. Pietzonka, W. Seifert, L.-E. Wernersson, L. Samuelson. *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 2976 (2002).
- [8] Н.В. Востоков, В.М. Данильцев, М.Н. Дроздов, Ю.Н. Дроздов, А.В. Мурель, В.И. Шашкин. *Матер. совещ. „Нанофотоника“* (Н. Новгород, Россия, март 2003) с. 363.
- [9] A.C. Warren, J.M. Woodall, J.L. Freeout, D. Grischkowsky, D.T. McInturff, M.R. Melloch, N. Otsuka. *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 1331 (1990).
- [10] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984).
- [11] Е.Н. Rhoderick, R.H. Williams. *Metal-Semiconductor Contacts* (Clarendon Press, Oxford, 1988).

Редактор Т.А. Полянская

## Electrical properties of metal–semiconductor nanocontacts

*N.V. Vostokov, V.I. Shashkin*

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

**Abstract** Calculations of the potential in a semiconductor have been carried out about spherical and cylindrical metallic nanocontacts. An analysis of electric properties of nanocontacts of small characteristic dimensions  $a \ll S$  ( $S$  being the width of depletion region in the planar geometry) has been made. Nanocontacts exhibit a weak capacitance dependence on the voltage and the fast response up to THz region, as well as more pronounced lowering of the Schottky barrier height due to the image forces as compared to the case of the planar geometry.