

## О барьере Шоттки на контакте металла с карбидом кремния

© С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, С.К. Тихонов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 26 марта 1996 г. Принята к печати 20 октября 1996 г.)

Предлагается простая модель контакта металл-полупроводник. Предполагается, что барьер Шоттки формируется состояниями дефектов, локализованными на границе раздела. Проанализированы экспериментальные данные по системам <металл (Au, Cr, Mo и Al)>–<гексагональный карбид кремния (6H-SiC)>, где SiC имеет *n*-тип проводимости.

1. Изучение формирования барьера Шоттки на контакте металл-полупроводник является старой, но по-прежнему актуальной задачей физики полупроводников [1]. При этом важно понять, как характеристики контактирующих поверхностей и способ создания контакта влияют на параметры возникающего барьера. Несомненный интерес представляют поверхностно-барьерные структуры на основе карбида кремния [2]. В работе [3] исследовались диоды Шоттки, сформированные на контактах металлов (Au, Mo, Cr и Al) с *n*-6H-SiC. Экспериментально исследовалось влияние на высоту барьера концентрации некомпенсированной донорной примеси, плотности поверхностных состояний, работы выхода металла и параметров диэлектрического слоя на границе металл-полупроводник. Для анализа экспериментальных данных применялась обобщенная теория Бардина и Шоттки-Мотта [4]. Обнаружилось, в частности, что высота барьера Шоттки  $\Phi_b$  для всех исследованных металлических компонентов приблизительно одинакова и соответствует половине ширины запрещенной зоны  $E_g$  карбида кремния ( $E_g \cong 3$  эВ). Эти результаты находятся в противоречии с данными работ [5–7], где наблюдалась сравнительно сильная зависимость высоты барьера  $\Phi_b$  от работы выхода металла  $\Phi_m$ . Такая зависимость была объяснена в работе [8] в рамках модели наведенных металлическими атомами состояний. При этом считалось, что в области контакта отсутствуют состояния, образованные дефектами. Как показывает анализ литературных данных [1], а также обсуждение полученных результатов в работе [3], именно присутствие таких локализованных в области контакта состояний и приводит к слабой зависимости  $\Phi_b$  от  $\Phi_m$  (речь идет о стабилизации (пиннинге) уровня Ферми при энергиях, соответствующих состояниям дефектов). Недавно для описания барьеров Шоттки в системе металл-GaAs была предложена простая модель [9,10], учитывающая наличие дефектов в области контакта. В настоящей работе модифицированный вариант этой модели использован для описания системы металл-(карбид кремния).

2. Будем рассматривать взаимодействие состояния дефекта  $|i\rangle$ , локализованного на поверхности полупроводника с металлом. Энергия этого состояния  $E_i$  лежит в запрещенной зоне. Взаимодействие  $|i\rangle$  с металлом,

приведенным в контакт с полупроводником, может быть описано гамильтонианом вида

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k + E_i a_i^+ a_i + V \sum_k (c_k^+ a_i + \text{h.c.}), \quad (1)$$

где  $\varepsilon_k$  — энергия электронов в металле,  $V$  — энергия гибридизации металлических и локализованных состояний,  $c_k^+$  — оператор рождения электрона в состоянии  $|k\rangle$ ,  $a_i^+$  — аналогичный оператор для электрона в состоянии  $|i\rangle$ . Гамильтониан (1) является упрощенной версией гамильтониана Андерсона [11,12], где считается, что уровень  $E_i$  может быть заполнен не более чем одним электроном (это позволяет опустить корреляционный член и спиновые индексы). В предположении, что уровень локализованного состояния  $|i\rangle$  перекрывается с широкой зоной проводимости металла, легко найти его число заполнения  $n_i$ :

$$n_i = \frac{1}{\pi} \text{arccotg} \frac{E_i - E_F}{\Gamma}, \quad (2)$$

где  $\Gamma = \pi \rho V^2$  есть полуширина (на половине высоты) квазиуровня  $E_i$ ,  $\rho$  — плотность состояний металла, предполагаемая постоянной,  $E_F$  — уровень Ферми.

Решение (2) отвечает изолированному состоянию дефекта или, что эквивалентно, набору таких состояний, но не взаимодействующих между собой. Мы будем рассматривать именно последнюю ситуацию, считая, что плотность таких состояний (на единицу поверхности) равна  $N_i$ . Вследствие туннелирования электронов между металлом и квазиуровнями  $|i\rangle$  на контакте возникает потенциальный барьер

$$\Delta\Phi = -4\pi e^2 \lambda N_i q_i, \quad (3)$$

где  $\lambda$  — параметр толщины двойного слоя (см. далее),  $q_i$  — заряд, локализованный на состоянии  $|i\rangle$ . Если до контакта уровень  $|i\rangle$  был пуст, то  $q_i = -n_i$  и результирующая работа выхода из металла меняется от  $\Phi_m$  до  $\Phi_m + \Delta\Phi$ . Если же первоначально локализованный уровень был заполнен, то  $q_i = +(1 - n_i)$ . Положение уровня Ферми относительно потолка валентной зоны полупроводника определяется соотношением

$$E_F = I_{sc} - \Phi_m - \Delta\Phi. \quad (4)$$

Здесь  $I_{sc} = \chi + E_g$ , где  $\chi$  — электронное сродство. Высота барьера Шоттки  $\Phi_b$  для полупроводника  $p$ -типа равна  $E_F$ , для  $n$ -типа —  $(E_g - E_F)$ .

3. Рассмотрим общие свойства модели. Перепишем уравнения (2), (4) в виде

$$\operatorname{ctg} \pi n_i = \varepsilon_i - \Delta - A_i q_i, \quad (5)$$

$$\varepsilon_f = \Delta + A_i q_i, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= E_i/\Gamma, \quad \Delta = (I_{sc} - \Phi_m)/\Gamma, \\ A_i &= 4\pi e^2 \lambda N_i/\Gamma, \quad \varepsilon_f = E_F/\Gamma. \end{aligned} \quad (7)$$

Из выражений (5) и (6) можно получить следующие соотношения:

$$\frac{dn_i}{d\Delta} = \frac{\sin^2 \pi n_i}{\pi} R_i, \quad (8)$$

$$\frac{d\varepsilon_f}{d\Delta} = R_i, \quad (9)$$

где

$$R_i = \left( 1 + A_i \frac{\sin^2 \pi n_i}{\pi} \right)^{-1}. \quad (10)$$

Так как обе производные положительны, с ростом работы выхода металла  $\Phi_m$  как заселенность уровня  $N_i$ , так и энергия Ферми убывают. В отсутствие состояний, связанных с дефектами,  $dn_i/d\Delta = 0$  и  $d\varepsilon_f/d\Delta = 1$ . Последнее равенство соответствует случаю Шоттки–Мотта [1]. При  $N_i \rightarrow \infty$  имеем  $dn_i/d\Delta \rightarrow 0$  и  $d\varepsilon_f/d\Delta \rightarrow 1$ . Таким образом, при большой плотности состояний дефектов ни их заполнение, ни положение уровня Ферми (а следовательно, и высота барьера) от работы выхода контактирующего металла не зависят.

Теперь рассмотрим зависимости  $dn_i$  и  $\varepsilon_f$  от положения уровня дефекта  $\varepsilon_i$ . Для производных  $dn_i/d\Delta$  и  $d\varepsilon_f/d\Delta$  получаем выражения (8) и (9), но со знаком “\_” в правой части. Таким образом, изменение  $\varepsilon_i$  ведет к тем же последствиям, что и изменение  $\Phi_m$ . И наконец, зависимость чисел заполнения и фермиевского уровня от плотности состояний дефектов  $N_i$  имеет вид

$$\frac{dn_i}{dA_i} = q_i \frac{\sin^2 \pi n_i}{\pi} R_i, \quad (11)$$

$$\frac{d\varepsilon_f}{dA_i} = q_i R_i. \quad (12)$$

4. Проанализируем на основании предложенной модели результаты работы [3]. Положим для простоты  $E_i = E_g/2$ , что приблизительно соответствует рассматриваемой ситуации (см. также данные по другим контактам металл–полупроводник [1,13]). Тогда имеем

$$\operatorname{ctg} \pi n_i = \omega - A_i q_i, \quad (13)$$

$$\varepsilon_f = \frac{1}{2} \varepsilon_g - \omega + A_i q_i, \quad (14)$$

Значения  $\Phi_m$ ,  $\Phi_b^n$  и параметра  $R_i$  при  $E_i = E_F = E_g/2$

	Au	Cr	Mo	Al
$\Phi_m$ , эВ	5.10	4.58	4.30	4.25
$R_i$	0.66	0.54	0.50	0.49
$\Phi_b^n$ , эВ [3]	1.40	1.22	1.29	1.26

где  $\omega = (\Phi_m - \chi - E_g/2)/\Gamma$ ,  $\varepsilon_g = E_g/\Gamma$ . По данным, приведенным в работе [3], для модификации карбида кремния  $6H$ -SiC ширина запрещенной зоны  $E_g = 3$  эВ и  $\chi = 4.4$  эВ. Работы выхода металлов приведены, например, в [14]. Величину параметра  $A_i$  рассчитать довольно трудно, так как мы, в принципе, ничего не знаем о природе пограничных дефектов в рассматриваемой системе. Оценки, приведенные в работах [9,10], также не представляются нам убедительными, так как мы считаем неприемлемым использование концепции диэлектрической проницаемости на атомных масштабах. На наш взгляд, при оценках  $\lambda$  и  $\Gamma$  следует пользоваться методами теории хемосорбции [15]. Вследствие того, что величины барьеров Шоттки в системе металл– $6H$ -SiC соответствуют приблизительно половине ширины запрещенной зоны, получаем в (14)  $\varepsilon_f = \varepsilon_g/2$ . Тогда из (13) и (14) найдем  $n_i = -q_i = 0.5$ , и, следовательно,

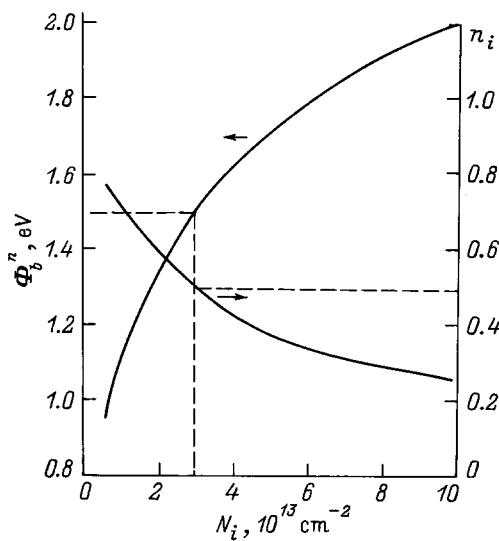
$$\chi = E_g/2 - \Phi_m = 2\pi e^2 \lambda N_i. \quad (15)$$

Отметим также, что формулы (13) и (14) показывают, что уровень дефекта изначально следует считать пустым.

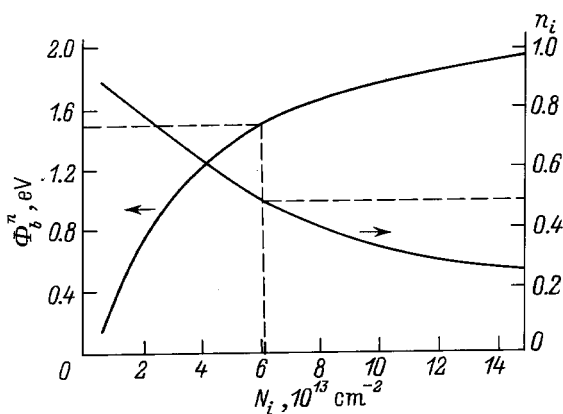
Считая  $\lambda$  величиной порядка постоянной решетки металла, т.е.  $\lambda \cong 3 \text{ \AA}$ , найдем соответствующие концентрации дефектов (в единицах  $10^{13} \text{ см}^{-2}$ ):  $N_i = 3.0, 5.9, 3.7, 6.1$  для Au, Mo, Cr и Al соответственно. Найденные результаты представляются вполне разумными.

Полагая ширину квазиуровня дефекта  $2\Gamma = 1$  эВ, найдем значения параметра  $R_i$  (см. таблицу). Так как  $d\Phi_b^n/d\Phi_m = d\varepsilon_f/d\Delta = R_i$ , мы можем рассчитать приращение высоты барьера Шоттки  $\Delta\Phi_b^n \cong R_i \Delta\Phi_m$ , взяв за основу параметры, соответствующие системе Al/ $n$ - $6H$ -SiC ( $\Phi_b^n = 1.26$  эВ,  $\Phi_m = 4.25$  эВ). Переходя к молибдену, имеем  $\Delta\Phi_m = 0.05$  эВ и, соответственно,  $\Phi_b^n \cong 1.29$  эВ, что хорошо соответствует эксперименту. Переходя от молибдена к хрому, получаем положительное приращение  $\Delta\Phi_b^n = 0.14$  эВ, что противоречит эксперименту ( $\Delta\Phi_b^n = -0.08$  эВ). Переход от хрома к золоту дает  $\Phi_b^n = 1.50$  эВ. За исключением хрома, который выпадает из общей тенденции, согласие с экспериментом следует признать вполне удовлетворительным. Результат для хрома может быть уточнен, если, например, сместить уровень дефекта  $E_i$  вверх ( $d\Phi_b^n/d\Phi_m = -d\Phi_b^n/d\varepsilon_i$ ).

На рис. 1 показана зависимость числа заполнения уровня дефектов  $n_i$  и высоты барьера Шоттки  $\Phi_b^n$  от плотности состояний дефектов  $N_i$  для системы Au/ $n$ - $6H$ -SiC. Штриховыми линиями отмечены значения  $\Phi_b^n = E_g/2 = 1.5$  эВ и  $n_i = 0.5$ , отвечающие значению  $N_i = 3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .



**Рис. 1.** Зависимости высоты барьера Шоттки  $\Phi_b^n$  и числа заполнения состояний дефектов  $n_i$  от концентрации пограничных дефектов  $N_i$  для системы Au/n-6H-SiC при  $E_i = E_g/2$ . Штриховыми линиями отмечены значения  $d\Phi_b^n = E_g/2 = 1.5$  эВ и  $n_i = 0.5$ , отвечающие значению  $N_i = 3 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>.



**Рис. 2.** Зависимости высоты барьера Шоттки  $\Phi_b^n$  и числа заполнения состояний дефектов  $n_i$  от концентрации  $N_i$  для системы Al/n-6H-SiC при  $E_i = E_g/2$ . Штриховыми линиями показано то же, что и на рис. 1, но при  $N_i = 6.1 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>.

На рис. 2 те же зависимости приведены для системы Al/n-6H-SiC. Сравнение результатов показывает, что высота барьера Шоттки для контакта с Al гораздо более резко увеличивается с ростом  $N_i$ , чем в системе Au/n-6H-SiC. Та же тенденция установлена в работе [3]. Таким образом, предлагаемая модель пригодна для описания барьеров Шоттки на карбиде кремния.

5. Итак, в настоящей работе сформулирована простая модель, позволяющая полуколичественно описать параметры барьера Шоттки для системы металл-SiC. При этом наиболее трудная задача состоит в адекватном определении параметров (главным образом  $N_i$  и  $\Gamma$ ), определяемых концентрацией пограничных дефектов и их природой. Дополнительную трудность вносит то

обстоятельство, что эти дефекты могут генерироваться в самом процессе создания контакта, что крайне усложняет их исследование. То обстоятельство, что в большинстве диодов Шоттки уровень Ферми закреплен приблизительно в середине запрещенной зоны, наводит на мысль, что концентрация дефектов близка к  $N_i$ . Здесь, однако, требуются дополнительные исследования.

Работа выполнена при частичной поддержке Аризонского университета (США).

**Список литературы**

- [1] W. Mönch. Rep. Progr. Phys., **53**, 221 (1990).
- [2] *Technical Digest of Int. Conf. on Silicon Carbide and Related Materials*, ICSCRM-95 (Kyoto, Japan, 1995).
- [3] А.Н. Андреев, А.А. Лебедев, М.Г. Растегаева, Ф.М. Снегов, А.Л. Сыркин, В.Е. Челноков, Л.Н. Шестопалова. ФТП, **29**, 1828 (1995).
- [4] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984).
- [5] J.R. Waldrop, R.W. Graut, J.C. Wang, R.F. Davis. J. Appl. Phys., **72**, 4757 (1992).
- [6] J.R. Waldrop, R.W. Graut. Appl. Phys. Lett., **62**, 2685 (1993).
- [7] J.R. Waldrop. J. Appl. Phys., **75**, 4558 (1994).
- [8] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. ФТТ, **37**, 2221 (1995).
- [9] R. Ludeke, G. Jezequel, A. Tabel-Ibrahimi. Phys. Rev. Lett., **61**, 601 (1988).
- [10] R. Ludeke. Phys. Rev. B, **40** (1989).
- [11] P.W. Anderson. Phys. Rev., **124**, 41 (1961).
- [12] Ч. Киттель. *Квантовая теория твердых тел* (М., Наука, 1967).
- [13] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990).
- [14] *Физические величины. Справочник*, под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [15] *Теория хемосорбции*, под ред. Дж. Смитга (М., Мир, 1983).

Редактор Т.А. Полянская

**On the Schottky barrier on the metal-silicon carbide contact**

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, S.K. Tikhonov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St.Petersburg, Russia

**Abstract** The simple model of the metal-semiconductor contact is presented. It is proposed that the Schottky barrier is formed by the defect states, localised on the interface. The experimental data for the system (metal (Au, Cr, Mo and Ni)/n-type hexagonal silicon carbide (6H-SiC)) have been analysed.