Расчет барьера Шоттки и вольт-амперных характеристик структур металл-твердые растворы на основе карбида кремния

© В.И. Алтухов*, И.С. Касьяненко*, А.В. Санкин*, Б.А. Билалов+, А.С. Сигов•

* Институт сервиса, туризма и дизайна (филиал) ФГАОУ ВПО "Северо-Кавказский федеральный университет", 357500 Пятигорск, Россия

+ Дагестанский государственный технический университет,

• Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики,

119454 Москва, Россия

E-mail: altukhovv@mail.ru

(Получена 19 августа 2015 г. Принята к печати 1 марта 2016 г.)

Развита простая, но нелинейная по концентрации дефектов модель контакта металл-полупроводник, когда барьер Шоттки формируется поверхностными дефектными состояниями, локализованными на границе раздела. Показано, что учет нелинейной зависимости уровня Ферми от концентрации дефектов ведет при низких концентрациях дефектов к повышению барьера Шоттки на 15–25%. Рассчитанные значения высоты барьера используются для анализа вольт-амперных характеристик структур *n-M/p*-(SiC)_{1-x} (AlN)_x. Результаты расчета сопоставляются с экспериментальными данными.

1. Введение

Высота потенциального барьера Шоттки Ф_В на контакте металл-полупроводник является важнейшим параметром диодов Шоттки, полевых транзисторов и других элементов (приборов) силовой электроники с поверхностно-барьерными структурами. В том числе, это структуры металл (M: Al, Ti, Cr, Ni, Mo, Au)-твердый раствор карбида кремния $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$, в частности пленки структур $n-Al/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ [1,2]. Расчет высоты барьера $\Phi_{\rm B}$ для Al/n-(SiC)_{1-x}(AlN)_x по обобщенной теории Бардина и Шоттки-Мотта [3] не дал надежного согласия с экспериментами в области малых плотностей поверхностных состояний [2]. Однако ранее в работах [4,5] была предложена довольно простая модель контакта металл (М)-полупроводник (n-4H-SiC) с локализованными на границе раздела поверхностными состояниями дефектов E_i (БШ-1 модель). При этом вольт-амперные характеристики (ВАХ) диодов Ni/4*H*-SiC (x = 0) с барьером Шоттки (БШ) хорошо согласуются с данными экспериментов [1]. В настоящей работе развита модель БШ-1 [4-6], в которой учтены нелинейные по концентрации дефектов слагаемые [6-8] (БШ-2), приведены результаты моделирования и расчетов высоты барьера Шоттки на контакте металлтвердые растворы карбида кремния $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ различного состава х. Рассчитаны ВАХ диодов типа $n-M/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ как функции различных параметров теории (V — напряжения электрического поля, T абсолютной температуры, E_g^x — ширины запрещенной зоны, х — состава твердого раствора, N_i — плотности (концентрации) изолированных состояний дефектов на единицу поверхности, Е_i — энергии поверхностного локализованного состояния дефекта). Результаты расчетов сопоставляются с экспериментальными данными для пленок структур $n-M/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x$.

Модифицированная модель барьера Шоттки

Рассмотрим модель барьера Шоттки с локализованными в области контакта состояниями дефектов (БШ-1 [4,5]), но в более высоком (нелинейном) по концентрации дефектов ($N_i = c \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot 9\text{B}^{-1}$; c = 0-30, где удобный параметр — "концентрация" в единицах $10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot 9\text{B}^{-1}$) приближении. В этом подходе наряду с концентрацией дефектов N_i вводятся числа заполнения $n_x(c)$, определяемые видом гамильтониана системы. Такой подход дает более высокие значения барьера Шоттки и при малых N_i ($N_i < 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot 9\text{B}^{-1}$ [9,10]) ведет к лучшему, чем классическая формула Бардина, Шоттки-Мотта, согласию с данными опытов. В этой модели высота барьера Φ_B^x определяется формулой [4,6]

$$\Phi_{\rm B}^{\rm x}(c) = \Phi_m + \Delta \Phi_{\rm x}(c),$$

$$\Delta \Phi_{\rm x}(c) = 4\pi (e^2/4\pi\varepsilon_0\varepsilon)\lambda N_i n_{\rm x}(c). \tag{1}$$

Здесь Φ_m — работа выхода из металла, χ — электронное сродство, $\Delta \Phi_x(c)$ — потенциальный барьер на контакте за счет туннелирования электронов между металлом и локализованными квазиуровнями (состояниями E_i), λ — толщина двойного слоя с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_0 \varepsilon$, N_i — плотность изолированных состояний дефекта, $n_x(c)$ — число заполнения локализованного квазиуровня E_i с полушириной $\Gamma = \pi p U^2$ (U — энергия гибридизации металлических и локализованных состояний), p — постоянная, по предположению, плотность состояний металла, E_F — уровень (энергия) Ферми. Тогда полупроводник, находящийся в контакте с металлом, характеризуется поверхностными дефектными состояния ями $|d\rangle$, энергии которых E_i лежат в запрещенной зоне. Взаимодействие уровня $|d\rangle$ с металлом при этом может

³⁶⁷⁰¹⁵ Махачкала, Россия

быть описано гамильтонианом Андерсена, в наиболее простой версии имеющим следующий вид [4,6]:

$$H = \sum_{k} \varepsilon_k c_k^+ c_k + E_i d_i^+ d_i + U \sum_{k} (c_k^+ d_i + hc).$$
(2)

Здесь ε_k — энергия электронов в металле; U — матричный элемент гибридизации металлического $|k\rangle$ и дефектного $|d\rangle$ состояний; c_k^+ — оператор рождения электрона в состоянии $|k\rangle$; d_i^+ — оператор рождения электрона в состоянии $|d\rangle$. В предположении, что распределенное по Гауссу локализованное дефектное состояние E_i перекрывается, как правило, с широкой зоной проводимости металла в интервале $|E_0 - E| \leq \Gamma \approx E_0$ ($E_0 = E_i - E_F$), легко найти его числа заполнения $n_d = n_x(c)$ [4,11]:

$$n_d(c) = n_x(c) = \int_{-\infty}^{E_x} \rho_d(E) dE,$$
$$\rho_x(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_i)^2 + \Gamma^2},$$
$$n_x(c) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \frac{\Gamma dE}{(E - E_i)^2 + \Gamma^2} = \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{E_i - E_F}{\Gamma}\right).$$
(3)

Далее учтем, что положение $E_{\rm F}$ относительно потолка валентной зоны полупроводника, с запрещенной зоной $E_g^x \equiv E_g - ax + bx^2$ ($E_{xg} = 3.3$ эВ, a = 0.56, b = 3.86 [2,9]), определяется соотношением [4]

$$E_{\rm F} = \chi + E_g^x - \Phi_m - \Delta \Phi_x(c). \tag{4}$$

Для удобства введем следующее обозначение $(E_i - E_F)/\Gamma \equiv \delta_x(c)$. Тогда для состояний $E_i = E_g \xi_i$, $\xi_i = 0.3 \ (0.5, 0.7) \ [2,4]$ с учетом (4) получаем

$$\Gamma\delta_x(c) = (\Phi_m - \chi) - (1 - \xi_i)E_g^x + \Delta\Phi_x(c).$$
(5)

Если характерная ширина барьера $\lambda = 3\eta$ Å ($\eta = 0.5 - 2.0$ [4]), то потенциальный барьер $\Delta \Phi_x$ принимает вид

$$\Delta \Phi_x(c) = k\eta c 2n_x(c), \tag{6}$$

где k = 0.272 эВ, и для оправданных [4] значений $E_{\rm F}$ порядка $E_g/2$ ($E_{\rm F} \approx E_g/2$), при $E_i = E_{\rm F}$ ($\Gamma = 0.5 - 2.0$ эВ) величина $2n_{x0}(c) \approx 1$ в соответствии с расчетами в [4] и наилучшим согласием с данными опытов для $\Phi^{\rm x}_{\rm B}(c)$ [4,9,10].

В общем (нелинейном) случае из разложения $n_{x0}(c)$ в ряд по $\delta_x(c)$

$$2n_x(c) = (2/\pi)[(\pi/2) - \delta_x(c) + \dots]$$

= 1 - \tau [p\Box[(1 - \xi)E_g^x + k\eta c 2n_{x0}] + \dots (7)

получаем $2n_{x0} \approx 1 - cv$, где v — коэффициент, принимающий значения от 0 до 1/30, и $|cv| \leq 1$, $\tau = 2/\pi\Gamma$, $p = \Phi_m - \chi$. Учитывая, что при $E_i = E_g/2$ значения $\delta_x(c) = 0$, $\arccos \delta_x(c) = (\pi/2)$ и $n_{x0} = 1/2$, получаем оценку для $\nu = \nu(c_0) = \tau [kn + (p\Box(l\Box\xi_i)E_g/c_0)] \approx 0.03$, при средних значениях концентрации c_0 порядка 10 или 15, $\tau \approx 0.5 - 2.0$ зВ⁻¹ и для A1 в SiC-AlN p = -0.15 зВ.

В итоге для потенциального барьера $\Delta \Phi_x$ по (6) находим $\Delta \Phi_x(c) \cong k \eta c (1 - c \nu)$, где ν — коэффициент в разложении $n_{x0}(c)$ по степеням c. Тогда для высоты потенциального барьера Шоттки Φ_B^x и $n_x(c)$ по (5), (3) и (1) получаем

$$\Gamma\delta_x(c) = p - (1 - \xi_i)E_g^x + k\eta c(1 - c\nu), \qquad (8)$$

$$n_x(c) = (1/\pi) \arccos \delta_x(c), \ \Phi_{\rm B}^x(c) = p + k\eta c 2n_x(c).$$
 (9)

Результаты расчетов по (8), (9) высоты барьера Шоттки как функции параметров нелинейной модели (БШ-2) ξ_i , *x* и *с* представлены на рис. 1–4. При $\nu = 0$ формулы (8), (9) дают результаты, близкие по значениям к линейной относительно *с* модели (БШ-1) [4,5], а при $c(1-c\nu) = 0$ в (8) модель БШ-2 совпадает с моделью БШ-1.

Расчет высоты барьера Шоттки Ф^x_B для структур на основе (SiC)_{1−x} (AIN)_x

Разложения (7), (8) позволяют сопоставить расчеты и выводы настоящей работы с результатами, полученными в рамках обобщенной теории Бардина и Шоттки—Мотта [3]. Анализ результатов данной работы по модели БШ-2 в целом согласуется с результатами, полученными в двух упомянутых выше моделях БШ-1 (локализованные дефекты [4,5]) и в обобщенной модели



Рис. 1. Барьер Шоттки и числа заполнения как функции концентрации дефектов для системы $n-\text{Al}/p-(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и для значения энергии дефектов $E_i \approx 0.5E_g^x$, при x = 0.2, 0.5, 0.7для кривых 1, 2 и 3 соответственно.



Рис. 2. Барьер Шоттки как функция концентрации поверхностных состояний дефектов для структур $n-M/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ с металлами: 1 — Al, 2 — Cr, 3 — Ti, 4 — Ni.

Бардина и Шоттки-Мотта [3], несмотря на разный подход к природе барьера Шоттки $\Phi_{\rm B}^x$ в пленках структур типа M/n-(SiC)_{1-x}(AlN)_x по БШ-1 [5,9] и обобщенной модели [2,3,12]. Переход от линейной итерации по c к квадратичной зависимости в $E_{\rm F}$ и нелинейной для $\Phi_{\rm B}^x$ и $n_x(c)$ ведет к повышению барьера Шоттки на 15–25%, возможно, за счет взаимного влияния поверхностных дефектов.

На рис. 1 представлены результаты анализа зависимости значений барьера Шоттки $\Phi_{\rm B}^x$ и n_x от концентрации дефектов c, для значения $E_i \approx 0.5E_g^x$ [4], при составах x = 0.2, 0.5, 0.7. Зависимости высот барьера Шоттки как функции концентрации c, полученные по формулам (8), (9), для структур с металлами Al, Ti, Cr, Ni представлены на рис. 2.

4. Вольт-амперные характеристики структур n-Al/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x

Формулы (8) и (9) для различных значений параметров системы $n-\text{Al}/p-(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ $[T, E_q^x, E_i, \Phi_{B0}, n, c, x]$ использовались при расчете зависимости тока I(V) по классической диодной теории термоэлектронной эмиссии от напряжения V [1,13]. Выражение для тока в этой теории имеет вид

$$I(V) = sAT^{2} \exp\left(-\frac{\Phi_{\rm B}^{\rm x}(c)}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1\right]$$
$$= I_{0} \left[\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1\right], \quad A = \frac{qm_{n}^{*}k^{2}}{2\pi^{2}\hbar^{2}}, \quad (10)$$

где s — площадь контакта Шоттки, A — постоянная Ричардсона, численно равная $120(m_n^*/m_0) \text{ A/cm}^2 \cdot \text{K}^2$,

V — приложенное напряжение (положительное для прямого направления тока и отрицательное для обратного), k — постоянная Больцмана, n — коэффициент идеальности. Известно, что имеется качественное сходство характеристик диодов с БШ и обычных p-n-переходов. Однако более низкое падение напряжения в прямом направлении в диодах Шоттки делает их незаменимыми для создания экономичных сильноточных выпрямителей [13]. В классической теории высота барьера Шоттки считается неизменной и используется ее эффективное значение Ф_{В0}. В случае А1 имеем $\Phi_{\rm B0} = 1.26~[4]$ и вольт-амперные характеристики для трех значений температуры T = 418, 361 и 273 К и значений n = 1, 1.5 и 2 (1, 1', 1'') и n = 1, 1, 5 (2, 2', 3, 3')соответственно, которые приведены на рис. 3. Значения тока I(V) при n = 1 и 2 представлены на рис. 4. Там же приведены экспериментальные данные [2,9,12]. При малых напряжениях V < 0.5 В наблюдается довольно хорошее согласие данных экспериментов с результатами расчетов — кривые при n = 2. Заметное уменьшение экспериментальных значений при V > 0.5 B, очевидно, связано с другими, помимо термоэлектронной эмиссии, механизмами протекания носителей тока [13].

В теории Фаулера [3,18] зависимость квантового выхода *R* от энергии фотона *hv* выражается формулой

$$R \approx rac{T^2}{\sqrt{E_s - hv}}$$
 $imes \left[rac{x^2}{2} + rac{\pi^2}{6} - \left(e^{-x} - rac{e^{-3x}}{9} - \dots\right)
ight]$ при $b \ge 0,$ (11)

где $jv \equiv q\Phi_{\rm B}$ — высота барьера, E_s — сумма hv_0 и энергии Ферми, отсчитанной от дна зоны проводимости ме-



Рис. 3. Прямые ВАХ структур n-Al/x-(SiC)_{1-x}(AlN)_x ($\Phi_{B0} = 1.26$ эВ, $x \to 0$) при различных T и n: l, l', l'' - T = 418 К (n = 1, 1.5, 2); 2, 2' - T = 368 К (n = 1, 1.5); 3, 3' - T = 273 К.

Физика и техника полупроводников, 2016, том 50, вып. 9

талла, $x \equiv h(v - v_s)/kT$. При условии $E_s \gg hv$ и x > 3вместо выражения (11) можно использовать упрощенные выражения $R \approx (hv - hv_0)^2$ при $h(v - v_0) > 3kT$, или $\sqrt{R} \approx h(v - v_0)$. С использованием этой линейной зависимости, по данным экспериментов [10], для структур (пленок) с металлами Al, Ti, Cr, Ni соответственно получаются следующие значения барьера Шоттки: 1.78, 1.85, 1.98, 2.16, что хорошо согласуется с результатами расчетов при концентрациях $N_i = 6 \cdot 10^{13}$ см⁻² · эВ⁻¹ (c = 6) [14]. Действительно, для этих же металлов, со-



Рис. 4. Прямые ВАХ структур n-Al/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x при T = 293 К: кривая 1 - x = 0.10 (n = 1 -кривая a, n = 2 - b); кривая 2 - x = 0.15 (n = 2 - c); 1 и 2 — экспериментальные данные [2,9,12].



Рис. 5. Прямые ВАХ как функции состава для концентрации дефектов c: 1, 2, 3, 4 (на оси слева) c = 4, 1', 2', 3', 4' c = 5 (на оси справа) и напряжений: a - 0.10, b - 0.15, c - 0.18, d - 0.20 В.

Физика и техника полупроводников, 2016, том 50, вып. 9



Рис. 6. Прямые ВАХ для Ni, Al, Mo, Au (и $\Phi_{B0} = 1.7$ эВ) для *n-M/p*-(SiC)_{1-x}(AlN)_x с Φ_{B0} : I - 1.1, 2 - 1.26, 3 - 1.29, 4 - 1.4, 5 - 1.7 эВ и $x \to 0$ соответственно.

гласно рис. 2, имеем $\Phi_B^x = 1.74, 1.9, 1.78, 2.24$. Значения для Cr выпадают из общего ряда по причине характерной исходной величины для его работы выхода [14,15].

В зависимости I(V) от состава *x* при *x* порядка 0.075 кривые прямого тока I(V, x) достигают максимума, очевидно связанного с поведением ширины запрещенной зоны как функции состава [9] (рис. 5).

На рис. 6 приведены ВАХ для $\Phi_{B0} = 1.1$, 1.26, 1.29, 1.4, что отвечает структурам на Ni, Al, Mo, Au, и для модельного значения $\Phi_{
m B0} = 1.7$: при x
ightarrow 0 кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответственно. Согласно рис. 1, b значения $\Phi_{\rm B0}$ возрастают с увеличением x и для Al при x = 0.6 и $N_i = 5.5 \cdot 10^{13} \, {\rm сm}^{-2} \cdot {\rm 3B}^{-1}$ составляют 1.70, что фактически совпадает со значением 1.78, полученным в работе [10]. Полученные значения величины барьера Шоттки 1.85, 1.98, 2.16 для структур с металлами Ті, Сr, Ni, также рассмотренные в работе [10], были найдены по данным зависимости фототока структур $Me/(SiC)_{0.4}(AlN)_{0.6}$ от энергии фотонов. Эти результаты также можно объяснить, исходя из предложенной в данной работе модели барьера Шоттки с привлечением формулы Фаулера для фототока соответствующих структур. В целом данные расчетов на рис. 1-4 согласуются с данными опытов [2,9,12] и результатами расчетов других авторов [2,4,5].

5. Заключение

Рассчитанная высота барьера Шоттки Φ_B^x в рамках предложенной модели БШ-2 с нелинейным по концентрации дефектов уровнем (энергией) Ферми E_F и Φ_B^x для структур *n-M/p*-(SiC)_{1-x} (AlN)_x согласуется с экспериментальными результатами [2,4,7,9]. Предложенная модель позволяет проанализировать поведение барьера

Шоттки и ВАХ структур $n-M/p-(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ как функций параметров системы: приложенного напряжения электрического поля (V), температуры (T), ширины запрещенной зоны твердого раствора SiC: AlN (E_{ρ}^{x}) , состава твердого раствора (x), концентрации изолированных состояний дефектов (N_i) и значения энергии поверхностного локализованного состояния (E_i) . Несмотря на долгую историю изучения барьера Шоттки, в настоящее время нет сколько-нибудь универсальной и общепринятой теории гетеропереходов металл-полупроводник. Предложенная нами модель способствует пониманию структур на основе карбида кремния с барьером Шоттки. Эта модель, возможно, за счет учета взаимного влияния дефектов (вклады c^2), дает более высокие значения барьера (на 15-20%) и обеспечивает лучшее, чем классическая формула Бардина, Шоттки-Мотта, согласие с опытом при $N_i < 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-2} \cdot \mathrm{3B}^{-1}$ [9,10]. Структуры на основе карбида кремния находят широкое применение в качестве светодиодов, детекторов и смесителей сигналов на микроволновых частотах, малоинерционных фотодетекторов модулированного света, полевых транзисторов, элементов приборов, работающих при высоких температурах.

Список литературы

- [1] П.А. Иванов, И.В. Грехов, О.И. Коньков, А.С. Потапов, Т.П. Самсонова, Т.В. Семенов. ФТП, **45**, 1427 (2011).
- [2] М.К. Курбанов, Ш.М. Рамазанов, Б.З. Мехтиев. Тез. докл. Росс. конф. "Физическая электроника" (Махачкала, ДГУ, 2006) с. 175.
- [3] С. Зн. Физика полупроводниковых приборов (М., Мир, 1984).
- [4] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, С.К. Тихонов. ФТП, 31, 597 (1997).
- [5] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник, Ю.М. Таиров. ФТП, 35, 1437 (2001).
- [6] В.И. Алтухов, А.В. Санкин, М.Н. Дядюк, И.С. Касьяненко, О.А. Митюгова, С.В. Филиппова. Обозрение прикладной и промышленной математики, 19 (3), 423 (2012).
- [7] В.И. Алтухов, А.В. Санкин, О.А. Митюгова. Обозрение прикладной и промышленной математики, 17, 246 (2010).
- [8] R.H. Fowler. Phys. Rev., 38, 45 (1931).
- [9] М.К. Курбанов, Б.А. Билалов, Г.К. Сафаралиев, Ш.М. Рамазанов. Неорг. матер., 43, 1 (2007).
- [10] Г.К. Сафаралиев, Н.И. Каргин, М.К.Курбанов, Б.А. Билалов, Ш.М. Рамазанов, А.С. Гусев. Вестн. нац. исслед. ядерного ун-та "МИФИ", 3 (1), 63 (2014).
- [11] П.С. Киреев. *Физика полупроводников* (М., Высш. шк., 1975).
- [12] Н.П. Исмаилова, Н.В. Офицерова, Г.К. Сафаралиев. Мониторинг. Наука и технологии, **1**, 117 (2009).
- [13] А.И. Лебедев. Физика полупроводниковых приборов (М., Физматлит, 2008).
- [14] Г.К. Сафаралиев, Б.А. Билалов, М.К. Курбанов, Н.И. Каргин, Ш.М. Рамазанов, А.С. Гусев. Вестн. нац. исслед. ядерного ун-та "МИФИ", 2 (2), 273 (2013).

[15] V.I. Altukhov, B.A. Bilalov, I.S. Kasyanenko, A.V. Sankin, A.S. Sigov. 2nd Int. Sci. Conf. "European Applied Sciences: modern approaches in scientific researches" (Stuttgart, Germany) 1, 201 (2013).

Редактор Г.А. Оганесян

Calculation of the Schottky barrier and the current-voltage characteristics of metal-solid solutions based on silicon carbide

V.I. Altuhov*, I.S. Kasyanenko*, A.V. Sankin*, B.A. Bilalov⁺, A.S. Sigov[•]

* Institute of service, tourism and Design (Branch) FSAEI VPO "North Caucasian Federal University" in Pyatigorsk,
357500 Pyatigorsk, Russia
+ Dagestansky State Technical University,
367015 Makhachkala, Russia
• Moskovsky State Institute of Radio Engineering,
Electronics and Automation,
119454 Moscow, Russia

Abstract The development of simple, but non-linear model of the defect concentration metal-semiconductor Schottky barrier is formed when a surface defect states localized at the interface. It is shown that the inclusion of non-linear dependence of the Fermi level of the defect concentration leads to higher Schottky barrier by 15-25%. The calculated values of the barrier height is used for the analysis of the current-voltage characteristics of structures n-M/p-(SiC)_{1-x} (AlN). The calculation results are compared with experimental data.