

## Новый механизм реализации омических контактов

© А.В. Саченко, А.Е. Беляев, Р.В. Конакова

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева Национальной академии наук Украины,  
03028 Киев, Украина

E-mail: sach@isp.kiev.ua

(Получена 7 июня 2017 г. Принята к печати 8 июня 2017 г.)

Для контактов металл–полупроводник с диэлектрическим зазором выполнен анализ высоты барьера в контакте с учетом распределения поверхностных состояний по координате  $x$ , перпендикулярной границе раздела диэлектрик–полупроводник. Показано, что при достаточно больших уровнях легирования полупроводника учет пространственной зависимости плотности поверхностных состояний приводит к существенному уменьшению высоты барьера, что способствует реализации омических контактов. Установлено, что эффект понижения высоты барьера тем больше, чем меньше контактная разность потенциалов металл–полупроводник  $\varphi_{ms}$ . В случае, когда величина  $\varphi_{ms}$  отрицательна, данный эффект может приводить к перемене знака потенциала, т.е. к реализации в области пространственного заряда полупроводника слоя обогащения, даже при большой плотности поверхностных состояний. В свою очередь это способствует проявлению аномальной зависимости удельного контактного сопротивления от температуры, растущего с увеличением температуры.

DOI: 10.21883/FTP.2018.01.45333.8618

### 1. Введение

Получение омических контактов долгое время было сопряжено с большими трудностями, а механизмы их формирования уточняются до сих пор. В настоящей работе выполнен анализ одного из механизмов, способствующего реализации омических контактов, заключающийся в неполной экранировке заряда поверхностными состояниями при больших уровнях легирования. Речь идет о контакте металл–полупроводник с диэлектрическим зазором. К настоящему времени анализ механизмов токопрохождения в таком контакте был выполнен лишь при предположении, что закон распределения поверхностных состояний по координате, перпендикулярной поверхности, описывается  $\delta$ -функцией [1]. В то же время известно, что концентрация поверхностных состояний убывает в глубь полупроводника по экспоненциальному закону, с характерным параметром затухания  $l_s$  [2,3]. Согласно данным работ [4,5], типичное значение  $l_s$  в таких полупроводниках как кремний и арсенид галлия составляет  $10^{-7}$  см. Поэтому в случае, когда толщина области пространственного заряда (ОПЗ)  $w$  становится порядка или меньше  $l_s$ , следует ожидать, что приближение  $\delta$ -функции будет несправедливым, а уравнение Пуассона нужно решать с учетом распределения поверхностных состояний по координате  $x$ . Именно в таком приближении была решена задача в настоящей работе.

### 2. Постановка задачи

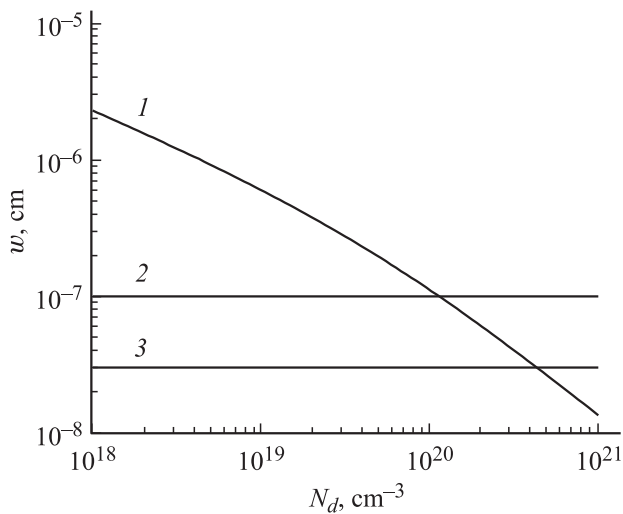
В случае, когда при больших уровнях легирования полупроводника имеет место неравенство  $\varphi_c > E_F/q$ , где  $\varphi_c$  — высота барьера, а  $E_F$  — энергия Ферми, при наличии диэлектрической прослойки величина барьера в контакте определяется из решения уравнения интеграль-

ной нейтральности с учетом зарядов, сосредоточенных на металле, на поверхностных состояниях и в полупроводнике вида

$$\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d k T}{q^2 d} \left( \frac{\varphi_{ms}}{k T} - y_c \right) - N_{sd} (1 - f_d(E)) + N_{sa} f_a(E) - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_s k T}{q^2 L_D} (y_c)^{0.5} = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon_d$  — диэлектрическая постоянная диэлектрика,  $d$  — его толщина,  $\varphi_{ms}$  — контактная разность потенциалов между металлом и полупроводником,  $y_c = q\varphi_c/kT$ ,  $f(E_i) = (1 + \exp(E_i/kT - y_c - N_d/n_i(E_g)))^{-1}$  — распределение Ферми в равновесном случае для поверхностного уровня с энергией  $E_i$ , энергия  $E_i$  отсчитывается от середины запрещенной зоны полупроводника на границе с диэлектриком,  $N_d$  — концентрация доноров,  $n_i(E_g)$  — концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике,  $L_D = (\varepsilon_0 \varepsilon_s k T / 2q^2 N_d)^{0.5}$  — дебаевская длина экранирования, величина  $\varphi_c$  отсчитывается от дна зоны проводимости в нейтральном объеме, остальные обозначения являются общепринятыми.

В выражении (1) предполагается, что на границе раздела полупроводника с диэлектриком находятся дискретные поверхностные уровни, а также считается, что распределение зарядов, локализованных на поверхностных состояниях, может быть описано  $\delta$ -функцией. Это означает, что толщина области локализации поверхностных состояний  $l_s$  значительно меньше толщины области пространственного заряда  $w$ , где  $w = 2L_D(y_c)^{0.5}$ . Данное условие выполняется в области не слишком больших уровней легирования полупроводника. Однако, как показывает расчет, указанное неравенство нарушается при больших уровнях легирования. На рис. 1 приведены зависимости для  $w$  от уровня легирования, построенные для параметров кремния, когда эффективная плотность



**Рис. 1.** Зависимость толщины области пространственного заряда в кремнии  $w$  от уровня легирования  $N_d$ .

состояний в зоне проводимости  $N_c = 2.8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $\varphi_{ms} = 0.5 \text{ В}$ ,  $\epsilon_s = 11.7$ ,  $d = 4 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ ,  $\epsilon_d = 2$  [1]. При этом считалось для простоты, что в полупроводнике имеются лишь акцепторные поверхностные состояния с концентрацией  $N_{sa} = 2.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ . Отметим, что согласно данным работы [1] в большинстве ковалентных полупроводников имеет место большой пик плотности поверхностных состояний с энергией на 1/3 ширины запрещенной зоны выше края валентной зоны. В соответствии с этим было принято, что в случае кремния  $E_a = -0.23 \text{ эВ}$ . Отметим, что такой подход можно использовать не только в случае дискретных поверхностных уровней, но и поверхностных зон. В работе [6] было показано, что в большинстве случаев энергетические характеристики поверхностных состояний, представляющих собой поверхностные зоны, могут быть описаны эффективными поверхностными уровнями.

Как видно из рисунка (см. кривую 1), в области умеренных уровней легирования выполнено неравенство  $w \gg l_s$  и при расчетах можно считать, что распределение поверхностных состояний хорошо описывается  $\delta$ -функцией. Однако при  $N_d > 1.42 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  толщина ОПЗ становится меньше  $l_s$ . Следует отметить, что кривые 2 и 3 на рис. 1 отвечают характерным толщинам области локализации поверхностных состояний, равным  $10^{-7}$  и  $3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . В этом случае распределение зарядов, локализованных на поверхностных состояниях, не может быть описано  $\delta$ -функцией, а должно определяться из решения уравнения Пуассона.

Согласно данным работы [7], поверхностные состояния на реальных поверхностях полупроводника возникают из-за наличия дефектов или чужеродных атомов. В соответствии с работой [3] волновая функция основного состояния электронного центра, локализованного на поверхности полупроводника, может быть записана в виде  $\psi(x) = Ax \exp(-x/l_{s1})$ . С учетом нормировки

волновой функции распределение поверхностных состояний по координате  $x$  и их заполнение электронами описывается законом

$$N_s(x) = \frac{N_s}{2l_s^3} x^2 \exp\left(-\frac{x}{l_s}\right) f(E_a, x) = N_{s0}(x) f(E_a, x), \quad (2)$$

где  $l_s = l_{s1}/2$ ,  $f(E_a, x) = (1 + \exp(E_a/kT - y(x) - N_a/n_i(E_g)))^{-1}$ ,  $y(x) = q\varphi(x)/kT$ ,  $\varphi(x)$  — зависимость безразмерного электростатического потенциала от координаты  $x$ .

В работах [4,5] предполагалось, что пространственная зависимость распределения поверхностных состояний по координате  $x$  имеет вид  $(N_s/l_s) \exp(-x/l_s)$ . С учетом функции заполнения поверхностных состояний электронами

$$N_s(x) = \frac{N_s}{l_s} \exp\left(-\frac{x}{l_s}\right) f(E_a, x) = N_{s0}(x) f(E_a, x). \quad (3)$$

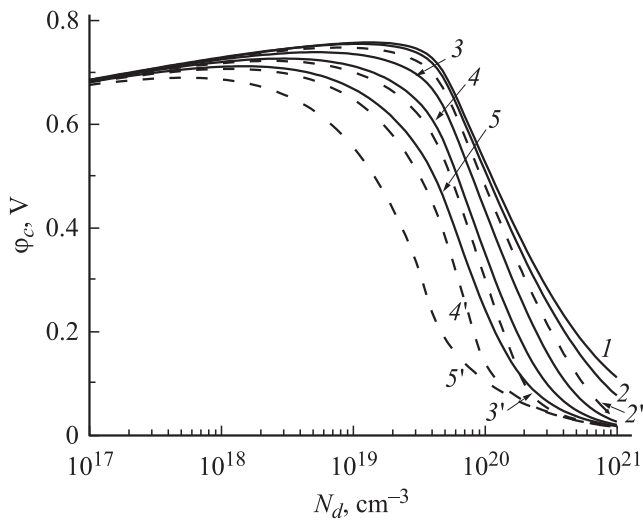
В рассматриваемых случаях можно получить выражение для  $\varphi_c$ , решая уравнение Пуассона для полупроводника при учете заряда поверхностных состояний. Используя условия: а) равенства величин электрического смещения на границе полупроводника и диэлектрика, б) непрерывности потенциалов, в) обращения в нуль напряженности электрического поля и электростатического потенциала в плоскости  $x = w$ , получаем систему из двух уравнений для нахождения величин  $w$  и  $\varphi_c$ . Ограничимся рассмотрением случая отсутствия вырождения носителей заряда в полупроводнике. При этом для толщины ОПЗ  $w$  и высоты барьера  $\varphi_c$  справедливы следующие уравнения:

$$\varphi_{ms} - \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} N_d w \left( \frac{w}{2} + \frac{\epsilon_s d}{\epsilon_d} \right) + \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} \left( w + \frac{\epsilon_s d}{\epsilon_d} \right) \times \int_0^w N_s(x) dx - \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_s} \int_0^w \int_0^x N_s(x') dx' dx = 0, \quad (4)$$

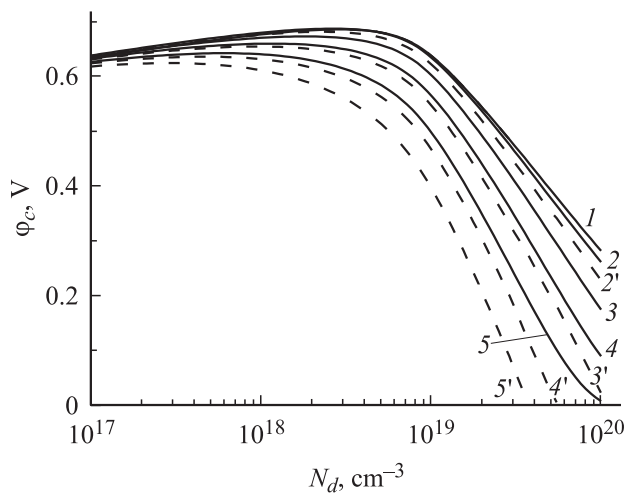
$$\varphi_c = \varphi_{ms} - \frac{qd}{\epsilon_0 \epsilon_d} \left( N_d w - \int_0^w N_s(x) dx \right). \quad (5)$$

### 3. Анализ полученных результатов

Как видно из выражений (2)–(4), в общем случае при решении уравнения Пуассона необходимо учитывать не только пространственное распределение плотности поверхностных состояний, но и то, как будет зависеть от координаты  $x$  степень их заполнения. Как показывает анализ, по мере увеличения величины  $N_d$  вначале величина контактного потенциала  $\varphi_c$  возрастает, затем проходит через максимум, а потом уменьшается (см. рис. 2 и 3). В случае, когда выполнены следующие критерии: 1)  $w \gg l_s$  и 2)  $f(E_a, 0) \cong 1$  при  $w \leq l_s$ , при решении уравнений (4) и (5) можно пренебречь зависимостью



**Рис. 2.** Зависимости высоты барьера  $\varphi_c$  от уровня легирования  $N_d$  при  $\varphi_{ms} = 0.5$  В. Использованные параметры:  $l_s$ , см: 2, 2' —  $10^{-8}$ ; 3, 3' —  $5 \cdot 10^{-8}$ ; 4, 4' —  $1 \cdot 10^{-7}$ ; 5, 5' —  $2 \cdot 10^{-7}$ . Кривая 1 получена при использовании уравнения (1).



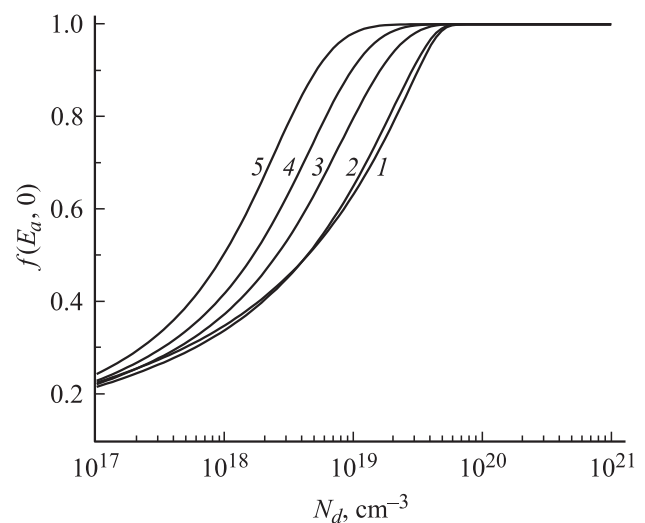
**Рис. 3.** Зависимости высоты барьера  $\varphi_c$  от уровня легирования  $N_d$  при  $\varphi_{ms} = 0$  В. Использованные параметры:  $l_s$ , см: 2, 2' —  $10^{-8}$ ; 3, 3' —  $5 \cdot 10^{-8}$ ; 4, 4' —  $1 \cdot 10^{-7}$ ; 5, 5' —  $2 \cdot 10^{-7}$ . Кривая 1 получена при использовании уравнения (1).

$f(E_a, x)$  от координаты  $x$ . Выполнение критерия 1) означает, что для распределения поверхностных состояний справедливо приближение  $\delta$ -функции, а выполнение критерия 2) свидетельствует о том, что если поверхностный уровень полностью заполнен при  $x = 0$ , то он будет полностью заполнен и при  $x \neq 0$ .

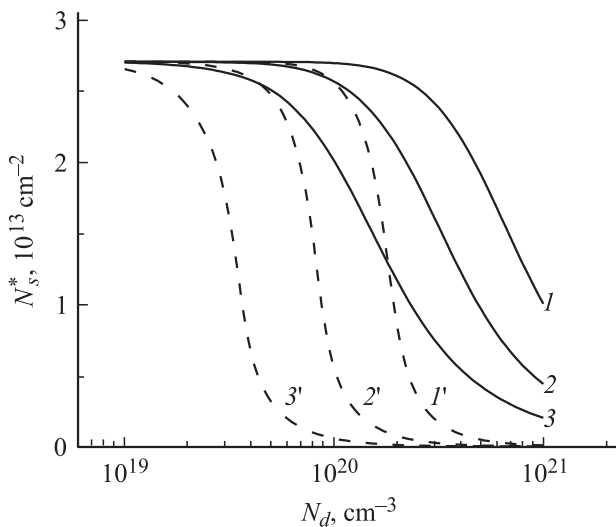
Как показывают оценки, при параметрах, использованных для расчета, критерий 1) выполняется при  $2 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ , а критерий 2) в зависимости от величины  $l_s$  выполняется в диапазоне  $N_d$  от  $1 \cdot 10^{19}$  до  $5 \cdot 10^{19}$  см $^{-3}$ . Это видно из рис. 4, на котором приведены зависимости степени заполнения поверхностного уровня с энергией  $-0.23$  эВ от уровня легирования  $N_d$ .

При промежуточных значениях  $N_d$  нужно учитывать как дисперсию плотности поверхностных состояний, так и зависимость заполнения плотности поверхностных состояний от координаты  $x$ . Однако при расчете более существенным оказывается учет дисперсии плотности поверхностных состояний.

На рис. 2 и 3 для кремния приведены зависимости контактного потенциала  $\varphi_c$  от уровня легирования полупроводника, полученные с использованием уравнения (1) (кривая 1), а также зависимости, полученные при включении заряда поверхностных состояний в уравнение Пуассона при использовании соотношений (2)–(5). При построении рис. 2 считалось, что контактная разность потенциалов  $\varphi_{ms} = 0.5$  В, а при построении рис. 3 величина  $\varphi_{ms}$  полагалась равной 0 В. При расчете этих и последующих рисунков считалось, что значения  $l_s$  соответственно равны  $10^{-8}$ ,  $5 \cdot 10^{-8}$ ,  $10^{-7}$  и  $2 \cdot 10^{-7}$  см. Кривые 2–5, полученные при использовании закона (3), сплошные, а кривые 2'–5', справедливые для реализации (2), — пунктирные. Как видно из рис. 2 и 3, зависимости  $\varphi_c(N_d)$ , приведенные на кривых 3–5, а также на кривых 3'–5', убывают по мере роста  $N_d$  от  $10^{17}$  до  $10^{21}$  см $^{-3}$  быстрее, чем зависимость, приведенная на кривой 1. В то же время зависимости, приведенные на кривых 2 и 2' для случая, когда  $l_s = 10^{-8}$  см, достаточно близки или совпадают с зависимостями, приведенными на кривой 1. Из рис. 2 видно, что при  $N_d = 10^{20}$  см $^{-3}$  значение  $\varphi_c$  для кривой 5 равно 0.1 В, в то время как значение  $\varphi_c$ , полученное в приближении  $\delta$ -функции, составляет 0.53 В. Еще больше разница между значениями  $\varphi_c$ , полученными в приближении  $\delta$ -функции и при использовании выражения (2) в случае, когда величина  $\varphi_{ms} = 0$  В, т.е. работы выхода из металла и кремния равны между собой (рис. 3). Следует отметить, что наи-



**Рис. 4.** Зависимости степени заполнения поверхностного уровня  $f(E_a, 0)$  с энергией  $-0.23$  эВ от уровня легирования  $N_d$  при  $\varphi_{ms} = 0.5$  В. Использованные параметры:  $l_s$ , см: 2 —  $10^{-8}$ ; 3 —  $5 \cdot 10^{-8}$ ; 4 —  $1 \cdot 10^{-7}$ ; 5 —  $2 \cdot 10^{-7}$ . Кривая 1 получена при использовании уравнения (1).



**Рис. 5.** Зависимости эффективной плотности поверхностных состояний  $N_s^*$  от уровня легирования  $N_d$  при  $\varphi_{ms} = 0.5$  В. Используемые параметры:  $l_s$ , см: 1, 1' —  $5 \cdot 10^{-8}$ ; 2, 2' —  $1 \cdot 10^{-7}$ ; 3, 3' —  $2 \cdot 10^{-7}$ .

большее уменьшение высоты барьера  $\varphi_c$  по сравнению со случаем, когда используется приближение  $\delta$ -функции, происходит в области  $N_d > 10^{19}$  см<sup>-3</sup>, когда степень заполнения поверхностных состояний электронами близка или равна 1.

Отметим, что более сильное уменьшение контактного потенциала для кривых 3–5, и 3'–5', представленных на рис. 2 и 3, фактически означает, что эффективная плотность поверхностных состояний, участвующая в экранировании заряда, уменьшается. Это иллюстрируют рис. 5 и 6, на которых приведены зависимости

$$N_s^* = \int_0^w N_{s0}(x) dx. \quad (6)$$

При построении рис. 5 и 6 были использованы те же значения  $l_s$ , что и при построении рис. 2 и 3. Как видно из рис. 5 и 6, эффективная плотность поверхностных состояний, участвующих в экранировке заряда, может весьма существенно уменьшаться в области достаточно больших уровней легирования (более чем на порядок).

Как показывают оценки в более общем приближении, выходящем за пределы реализации контакта Шоттки, при  $\varphi_{ms} < 0$  возможна перемена знака контактного потенциала. Чем больше величина  $\varphi_{ms}$  по модулю, тем при меньших значениях  $N_d$  происходит переход от случая контакта Шоттки к случаю реализации обогащающих изгибов зон. Эта ситуация напоминает случай теории Мотта для плотного контакта [8], когда неравенство  $\varphi_{ms} < 0$  автоматически означает реализацию обогащающих изгибов зон. Разница заключается в том, что в данном случае перемена знака контактного потенциала происходит тогда, когда эффективная плотность

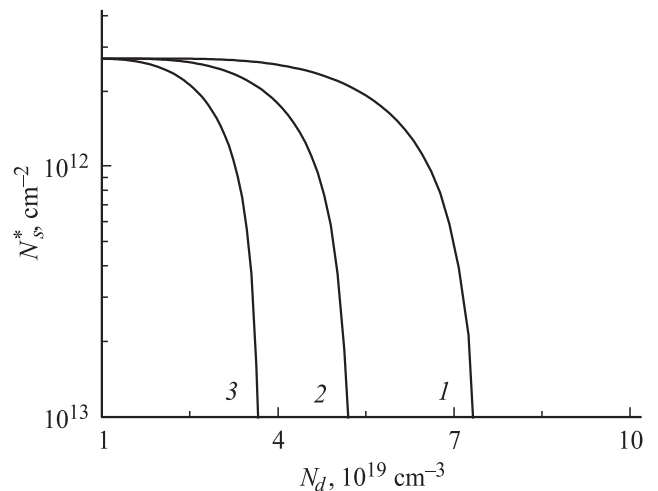
поверхностных состояний  $N_x^*$  уменьшается достаточно сильно. Следует также отметить, что чем меньше значение  $\varphi_{ms}$ , тем меньше величина  $l_s$ , при которой происходит достаточно сильное уменьшение величины  $\varphi_c$ , связанное с рассматриваемым механизмом (см. рис. 3, кривые 5, 5').

Следует отметить, что разница при использовании соотношений (2) и (3) для распределения поверхностных состояний по координате  $x$  не принципиальна, хотя в случае использования (2) уменьшение значений  $\varphi_c$  и  $N_s^*$  с ростом  $N_d$  больше, чем при использовании (3).

Наиболее существенным результатом, следующим из анализа, является возможность перемены знака контактного потенциала, т. е. реализация обогащающих изгибов зон вместо истожающих. По нашему мнению, указанный механизм был реализован в работе [9] для контактов кремния с вольфрамом в области  $N_d \sim 10^{20}$  см<sup>-3</sup>. Докладательством этого является растущее с увеличением температуры удельное контактное сопротивление, что возможно лишь в случае обогащающих изгибов зон.

Согласно работе [10], критерием омичности контакта является условие  $R_c < R_b$ , где  $R_c$  — контактное сопротивление, а  $R_b$  — сопротивление полупроводника. С ростом  $N_d$  величина  $R_b$  в актуальной области уровней легирования уменьшается как  $N_d^{-1}$ . В то же время при использованных значениях параметров  $\varphi_{ms} = 0$  и  $l_s = 10^{-7}$  или  $2 \cdot 10^{-7}$  см величина  $R_c$  уменьшается значительно быстрее. Поэтому при  $N_d \geq 1 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и  $d_s = 10$  мкм, где  $d_s$  — толщина полупроводника, в рассматриваемом случае контакт будет омическим.

Как показывают оценки, диэлектрический зазор толщиной  $(4-5) \cdot 10^{-8}$  см для системы Si–SiO<sub>2</sub> имеет коэффициент туннельной прозрачности существенно меньше 1. При этом становится невозможным механизм создания отрицательного заряда в полупроводнике путем тунnelирования из металла, рассмотренный в рабо-



**Рис. 6.** Зависимости эффективной плотности поверхностных состояний  $N_s^*$  от уровня легирования  $N_d$  при  $\varphi_{ms} = 0$  В. Используемые параметры:  $l_s$ , см: 1 —  $5 \cdot 10^{-8}$ , 2 —  $1 \cdot 10^{-7}$ , 3 —  $2 \cdot 10^{-7}$ .

те [11]. Учет этого механизма не нужен, так как требуемое значение отрицательного заряда обеспечивают собственные поверхностные состояния полупроводника.

Вплоть до последнего времени эффект уменьшения контактного потенциала вследствие неполной экранировки заряда поверхностными состояниями при достаточно больших уровнях легирования не анализировался. Вместе с тем он может обеспечивать реализацию омических контактов, приписываемую обычно проявлению туннельного механизма токопрохождения при наличии ступеньки легирования [1]. Именно поэтому он нуждается в самом тщательном теоретическом и экспериментальном исследовании.

#### 4. Заключение

Получены и проанализированы зависимости контактного сопротивления и эффективной плотности экранирующих поверхностных состояний от уровня легирования полупроводника для контакта металл–полупроводник с диэлектрическим зазором с учетом пространственного распределения поверхностных состояний. Показано, что это приводит к более сильному уменьшению контактного потенциала с ростом уровня легирования, чем в приближении  $\delta$ -функции, а также обеспечивает уменьшение плотности экранирующих заряд поверхностных состояний. Эффект тем больше, чем больше характерный параметр затухания поверхностных состояний  $l_s$  и чем меньше контактная разность потенциалов  $\varphi_{ms}$ . Данный эффект способствует реализации омических контактов в условиях небольшого вырождения объема полупроводника, т. е. является конкурентом туннельного механизма токопрохождения, реализующегося при наличии ступеньки легирования.

#### Список литературы

- [1] S.M. Sze, K.K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd ed. (John Wiley and Sons, 2007).
- [2] И.М. Лифшиц, С.И. Пекар. УФН, **56** (4), 531 (1955).
- [3] М.Д. Глинчук, М.Ф. Дейген. ФТТ, **5** (2), 405 (1963).
- [4] J.M. Palau, M. Dumas. *Thin Sol. Films*, **191**, 21 (1990).
- [5] В.Г. Божков, С.Е. Зайцев. Изв. вузов. Физика, **10**, 77 (2005).
- [6] А.В. Саченко, О.В. Снитко. УФЖ, **12**, 578 (1967).
- [7] W.E. Spicer, I. Lindau, P. Skeath, C.Y. Si. *J. Vac. Sci. Technol.*, **17**, 1019 (1980).
- [8] N.F. Mott. *Proc. Cambr. Philos. Soc.*, **3** (4), 568 (1938).
- [9] S.E. Swirhun, R.M. Swanson. *IEEE Electron Dev. Lett.*, **EDL-7** (3), 155 (1986).
- [10] А.В. Саченко, А.Е. Беляев, Р.В. Конакова. ФТП, **50** (6), 777 (2016).
- [11] K. Shenai. *IEEE Electron Dev.*, **ED-34** (8), 164 (1987).

Редактор А.Н. Смирнов

#### A new mechanism for realization of ohmic contacts

A.V. Sachenko, A.E. Belyaev, R.V. Konakova

Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028 Kiev, Ukraine

**Abstract** For metal–semiconductor contacts with a dielectric gap, an analysis of barrier height in the contact is made with allowance for distribution of surface states over the coordinate  $x$  (perpendicular to the dielectric–semiconductor interface). It is shown that, at sufficiently high semiconductor doping levels, the spatial dependence of surface state density leads to a considerable reduction of the barrier height, thus promoting realization of ohmic contacts. It is established that the smaller is the metal–semiconductor contact potential difference  $\varphi_{ms}$ , the lower is the barrier height. At negative  $\varphi_{ms}$ , this effect may lead to reversal of potential, i. e. to realization of an accumulation layer in the semiconductor space charge region (even at a high density of surface states). This, in its turn, promotes occurrence of anomalous temperature dependence of contact resistivity (growth with temperature).