

Нелинейная по концентрации поверхностных состояний модель барьера Шоттки и расчет вольт-амперных характеристик диодов на основе SiC и его твердых растворов в составной модели токопереноса

© В.И. Алтухов¹, А.В. Санкин¹, А.С. Сигов², Д.К. Сысоев¹,
Э.Г. Янукян¹, С.В. Филиппова³

¹ Северо-Кавказский федеральный университет,
355009 Ставрополь, Россия

² Московский институт радиоэлектроники и автоматики,
119454 Москва, Россия

³ Пятигорский медико-фармацевтический институт,
357500 Пятигорск, Россия

E-mail: altukhov@mail.ru

(Получена 10 апреля 2017 г. Принята к печати 22 апреля 2017 г.)

Предложена модифицированная нелинейная по концентрации поверхностных состояний модель барьера Шоттки, содержащая локальный квазиуровень Ферми на границе раздела, обусловленного избыточным поверхностным зарядом. Такой подход позволяет объяснить наблюдающееся подобие вольт-амперная характеристика диодов с барьером Шоттки $M/(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ и гетеропереходов на основе SiC и его твердых растворов с учетом $\Phi_g \approx \Phi_B$. Результаты расчетов высоты барьеров Шоттки согласуются с данными опытов, полученными по фототоку для металлов (M): Al, Ti, Cr, Ni. Вольт-амперные характеристики в составной — аддитивной модели токопереноса согласуются с данными экспериментов для систем n -M/ p -(SiC) $_{1-x}$ (AlN) $_x$ и n -6H-SiC/ p -(SiC) $_{0.85}$ (AlN) $_{0.15}$.

DOI: 10.21883/FTP.2018.03.45623.8587

1. Введение

Вопрос формирования и вычисления высоты потенциального барьера в гетеропереходах Φ_g (высота барьера в p - n -переходе) и барьера Шоттки Φ_B на контакте металл-полупроводник является актуальной задачей теории полупроводников [1–6]. Одним из важнейших вопросов до сих пор остается проблема построения обобщенной модели токопереноса через гетеропереход (ГП) типа n -SiC/ p -(SiC) $_{1-x}$ (AlN) $_x$ или через контакт металл-полупроводник с барьером Шоттки (БШ-M/SiC $_{1-x}$ (AlN) $_x$). В реальных ГП и контактах с БШ существует целый каскад механизмов токопереноса, часто одновременно действующих в разных, а иногда и в одном и том же интервале приложенных внешних напряжений U [3,4]. Поэтому ни одна из известных моделей (см. [4]) не дает возможности до конца правильно интерпретировать экспериментальные данные, в том числе зависимость $I(U)$ (ВАХ) от плотности поверхностных состояний вблизи границы раздела, от температуры, от состава x твердого раствора (SiC) $_{1-x}$ (AlN) $_x$.

В настоящей работе приведен расчет высоты потенциального барьера в области гетероперехода и ВАХ с резонансным квазиуровнем Ферми E_F ; с единых позиций, в рамках предложенной нами составной-аддитивной модели, объясняются особенности и сходство поведения ВАХ гетероструктур — диодов типа M/SiC $_{1-x}$ (AlN) $_x$ и n -SiC/ p -(SiC) $_{1-x}$ (AlN) $_x$. Составная-аддитивная по видам

токопереноса модель представляет собой справедливую в широкой области напряжений сумму токов, связанную с тремя известными механизмами токопереноса. Это термоэлектронная, полевая и термополевая эмиссии (см. [3] с. 91 формула (1.106), с. 96 — (1.109), с. 97 — (1.111)).

2. Модифицированная модель барьера Шоттки

Рассмотрим модель барьера Шоттки с локализованными в области контакта состояниями дефектов (БШ [1-3]), но в более высоком (нелинейном) по концентрации дефектов ($N_i = c \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$, $c = 0-30$, где c — удобный параметр — „концентрация“ в единицах $10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) приближении. В этом подходе, наряду с концентрацией дефектов N_i , вводятся числа заполнения $n_x(c)$ локализованных на границе раздела поверхностных состояний. Эти состояния определяются видом гамильтониана системы. Такой подход дает более высокие значения барьера Шоттки и при малых N_i ($N_i < 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) ведет к лучшему (на 15–20%), чем классическая формула Бардина, Шоттки–Мотта, согласно с данными опытов. В предлагаемой модели высота барьера Φ_B^x определяется формулой [6,7]

$$\Phi_B^x(c) = p + \eta n c 2n_x(c). \quad (1)$$

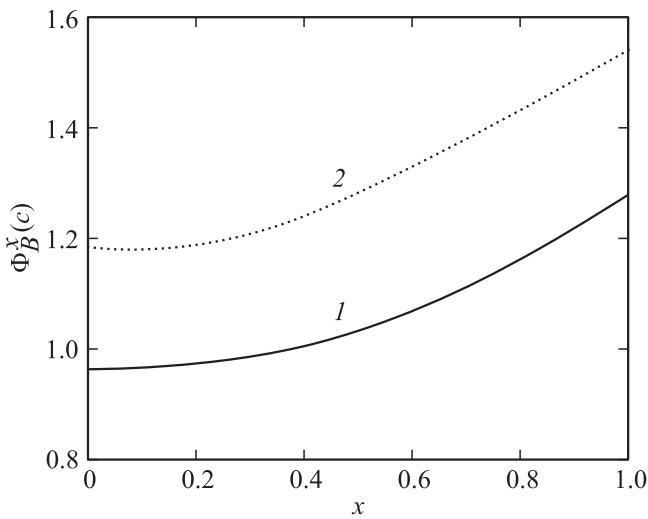


Рис. 1. Высота барьера Шоттки как функция состава x для модельной системы $n\text{-Al}/p\text{-(SiC)}_{1-x}\text{(AlN)}_x$ при $c = 4$; $E_1 = 0.3E_g$ (кривая 1) и $E_2 = 0.5E_g$ (кривая 2).

При этом для чисел заполнения локализованных состояний $n_x(c)$ получаем:

$$n_x(c) = (1/\pi) \operatorname{arccot} \delta_x(c), \quad (2)$$

$$\Gamma \delta_x(c) = p - (1 - \xi_i) E_g^x + k \eta c (1 - cv). \quad (3)$$

Здесь численный множитель $k = k(\lambda = 3 \text{ \AA}) = 0.272 \text{ эВ}$ [7], $p = \Phi_m - \chi$, Φ_m — работа выхода электрона из металла, χ — сродство к электрону; энергия поверхностных состояний $E_i = E_g^x \xi_i$, $\xi_i = 0.3$ (0.5; 0.7), Γ — ширина состояния E_i , E_g^x — ширина запрещенной зоны. Параметр ширины двойного слоя $\lambda = 3\eta \text{ \AA}$ (см. [1], с. 597). Значение $\lambda = 3 \text{ \AA}$ — оценка для контактов металл–карбид кремния [1]; $\eta = 0.5\text{--}2.0$ — учет возможного изменения λ в системах $M/(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$. При $E_i = E_g^x/2 = E_F$ имеем $\delta_x(c) = (E_i - E_F)/\Gamma = 0$ и $n_x(c) \approx n_0 = 1/2$. В приближении c^2 для барьера Шоттки $\Phi_B^x(c)$ имеем: $2n_x(c) \approx 1 - cv$ ($cv \leq 1$), где $v = 0\text{--}0.033$ — коэффициент разложения $n_x(c)$ по c в реальном интервале концентраций $c = 0\text{--}30$ (см. [6,7]). При этом для $\Gamma \delta_x(c)$ получаем (3) и для барьера Шоттки $\Phi_B^x(c)$ формулу (1). В первом порядке по c , согласно (1)–(3), получаем формулу для высоты барьера Шоттки по модели Давыдова–Лебедева–Тихонова [1].

Результаты расчетов высоты барьера Шоттки представлены на рис. 1 как функции состава x . По значениям фототока структур $M/(\text{SiC})_{0.4}(\text{AlN})_{0.6}$ на опыте была определена высота барьеров Шоттки для металлов (M): Al, Ti, Cr, Ni: 1.78, 1.85, 1.98, 2.16 эВ [8]. Эти значения согласуются с данными расчетов по модифицированной модели барьера Шоттки $\Phi_B^x(c)$: 1.74, 1.90, 1.78, 2.24 эВ [6,7] при концентрациях $N_i = 6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$ ($c = 6$). Значения для Cr выпадают из общего ряда по причине использованного в расчете известного значения его работы выхода [1].

3. Вольт-амперные характеристики диодов на основе карбида кремния

В гетеропереходах типа $n\text{-SiC}/p\text{-(SiC)}_{1-x}(\text{AlN})_x$ на границе перехода в области с высокой плотностью состояний носителей заряда появляется резонансный квазиуровень E_F . При этом носители тока проникают через барьер эффективно, как в металл, и токопрохождение через Φ_B^x будет носить характер термоэлектронной (te), полевой (p) или термополевой (tp) эмиссии в зависимости от напряжения U . Этим, как было отмечено, объясняется качественное сходство ВАХ диодов с барьером Шоттки и обычных $p\text{--}n$ -переходов [3]. В таких случаях для описания ВАХ диодов на основе SiC в широкой области напряжений ($0 < U < 5\text{--}15 \text{ В}$) нами предложено использовать составную-аддитивную по токам модель. В этой модели в области низких напряжений ($0 < U < 0.5 \text{ В}$) составляющая тока определяется термоэлектронной эмиссией. Составляющая полевой эмиссии проявляется в области напряжений $0.5 < U < 2.5 \text{ В}$. Термополевая эмиссия наблюдается в области напряжений $2.4 < U < 5 \text{ В}$ [3–5].

В области низких напряжений ($0 < U < 0.5 \text{ В}$) составляющая тока термоэлектронной эмиссии будет иметь вид [3]

$$I_{te}(U, x) = I_{ss}^x \left[\exp\left(\frac{qU}{nkT}\right) - 1 \right],$$

$$I_{ss}^x = sA^*T_i^2 \exp\left(-\frac{\Phi_B^x(c)}{mkT}\right), \quad (4)$$

где I_{ss}^x — предэкспоненциальный множитель, s — площадь контакта (порядка $2\text{--}5 \text{ мм}^2$), x — состав, A^* — постоянная Ричардсона, равная $120(m_e^*/m_e) \text{ А/см}^2 \cdot \text{К}^2$; q — электронный заряд, n и m — факторы идеальности.

Составляющую полевой эмиссии с учетом опытных данных [4,5], проявляющуюся в области напряжений $0.5 < U < 2.5 \text{ В}$, можно представить в виде [3–5]

$$I_p(U, x) = I_p^x \exp\left(\frac{qU}{n_1 E_{00}^x}\right),$$

$$I_p^x = sA_i^{**}T_i^2 \exp\left(-\frac{\Phi_B^x(c)}{E_{00}^*}\right). \quad (5)$$

Здесь n_1 — фактор идеальности для $I_p(U, x)$; A_i^{**} — коэффициент, связанный с постоянной Ричардсона A^* , сложно зависящий от параметров соответствующего исходного материала [3]; $E_{00}^* = m_1^i E_{00}$ ($E_{00} \approx 20 \text{ мэВ}$). Фактор идеальности m_1^i и характеристическую энергию заданного материала E_{00} можно определить по данным опытов.

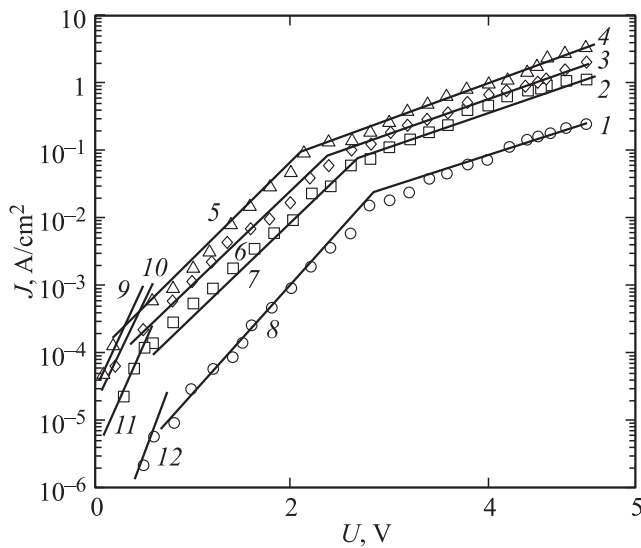


Рис. 2. Зависимость ВАХ — $J(U)$ для гетеропереходов n -6H-SiC/ p -(SiC) $_{0.85}$ (AlN) $_{0.15}$ при температурах $T_i = 77, 273, 361, 418$ К: точки — эксперимент [4,5,8]; прямые линии 1–12 — данные расчетов при $\Phi_B = 1.7$ эВ.

Для термополевой эмиссии в области $2.5 < U < 5$ В напряжений согласно [3,4] получаем:

$$I_{tp}(U, x) = I_{tp}^x \exp\left(\frac{qU}{n_2 E_0^*}\right),$$

$$I_{tp}^x = s B_i T_i^2 \exp\left(-\frac{\Phi_B^x(c)}{E_0^*}\right), \quad (6)$$

где n_2 и m_2^i — фактор идеальности для $I_{tp}(U, x)$; $E_0^* = m_2^i E_0$, $E_0 = E_{00} \text{cth}(E_{00}/kT)$; c — концентрация поверхностных дефектов; $i = 1, 2, 3, 4$ и E_0 — характеристическая энергия материала. Зависимость T_i^2 в (5) и (6) определена исходя из данных опытов [4,5].

Результаты расчетов по формулам (4)–(6) представлены на рис. 2: прямые линии 1–12 представляют собой расчетные значения ВАХ модели. Фигурными точками обозначены соответствующие экспериментальные данные. Значения параметров идеальности составной–аддитивной модели — $n, m; n_1, m_1^i, n_2, m_2^i$ приведены далее.

На рис. 2 представлены ВАХ для термоэлектронной (ss), полевой (p) и термополевой эмиссии (tp) при температурах: 1 — 77, 2 — 273, 3 — 361, 4 — 418 К. Прямые 1–4 — термополевая эмиссия (tp); 5–8 — полевая эмиссия (p); 9–12 — термоэлектронная эмиссия (ss). Согласно [3], I_{tp}^x — предэкспоненциальный множитель термополевого тока. В расчете для этого множителя использованы значения: $I_{tp}^x = 1, 3.3, 5, 7$ (10^{-3} А/см 2), соответствующие прямым 1, 2, 3, 4 на рис. 2. При $T_i = 77, 273, 361, 418$ К фактор идеальности термополевой эмиссии (tp) около qU [3] составляет $n_2 = 5$, а фактор идеальности около Φ_B составляет: $m_2^i = 8, 8.2, 8.4, 9$ для прямых 1, 2, 3, 4 соответственно. С учетом фактора

идеальности m_2^i характеристическая энергия $E_0^* = m_2^i E_0$, где $E_0 \cong 0.025$ эВ (см. [3]) — энергетическая характеристика материала. Для полевой эмиссии предэкспоненциальный множитель $I_p^x = 0.065, 1.4, 4.4, 9$ (10^{-5} А/см 2) для прямых 8, 7, 6, 5 соответственно. Фактор идеальности около qU составляет $n_1 = 3$ и около Φ_B фактор идеальности $m_1^i = 4.5, 5.1, 5.1, 5$. Параметр $E_{00}^* = m_1^i E_{00}$, где $E_{00} \cong 0.020$ эВ. В случае термоэлектронной эмиссии (ss) для предэкспоненциального множителя получаем: $I_{ss}^x = 28, 15, 3, 0.04$ (10^{-6} А/см 2) для прямых 9, 10, 11, 12. При этом факторы идеальности $n = 1.5$ и $m = 1$.

4. Заключение

Полученные в ходе расчетов значения напряжений перехода от полевой к термополевой эмиссии $U_{The} = 2.10, 2.35, 2.60, 2.78$ согласуются с данными опытов [4] $U_{Exp} = 2.1, 2.4, 2.6, 2.8$ соответственно для температур $T_i = 77, 273, 361, 418$ К, как показано на рис. 2. По данным этого рисунка определен температурный предэкспоненциальный множитель T_i^2 . Большие значения факторов идеальности $n_1 = 3$ для случая полевой эмиссии и $n_2 = 5$ для термополевой эмиссии тем не менее не превосходят значения $n = 6$, например, для GaN/GaInN-диодов [9]. Основное предположение настоящей работы состоит в том, что при высокой плотности поверхностных состояний дефектов в зоне контакта формируется резонансный квазиуровень Ферми. Как следствие, в диодах на основе карбида кремния и его твердых растворов потенциальный барьер на гетеропереходе имеет значение порядка высоты барьера Шоттки для соответствующего контакта металл–полупроводник ($\Phi_g \approx \Phi_B$). Ясно, что высота потенциального барьера зависит не только от значений предэкспоненциального множителя I_{ss}, I_p и I_{tp} с факторами идеальности (m, m_1^i, m_2^i) и от характеристических энергий E_{00} и E_0 . Характер же поведения $I = I(U, x)$ (ВАХ) существенно зависит от факторов идеальности (n, n_1, n_2) для (ss), (p) и (tp) эмиссий соответственно. В итоге показано, что вольт-амперные характеристики прямых токов диодов на основе твердых растворов SiC, рассчитанные в составной–аддитивной (4)–(6) модели, хорошо согласуются с данными экспериментов.

Список литературы

- [1] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, С.К. Тихонов. ФТП, **31**, 597 (1997).
- [2] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник, Ю.М. Таиров. ФТП, **35**, 1437 (2001).
- [3] А.И. Лебедев. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Физматлит, 2008).
- [4] Н.П. Исмаилова, Н.В. Офицерова, Г.К. Сафаралиев. Мониторинг. Наука и технологии, **1**, 117 (2009).
- [5] Г.К. Сафаралиев. *Твердые растворы на основе карбида кремния* (М., Физматлит, 2011).

- [6] В.И. Алтухов, А.В. Санкин, М.Н. Дядюк, К.С. Касьяненко, О.А. Митюгова, С.В. Филипова. Обзорное прикладное и промышленной математики, **19** (3), 423 (2012).
- [7] В.И. Алтухов, И.С. Касьяненко, А.В. Санкин, Б.А. Билалов, А.С. Сигов. ФТП, **50** (9), 1190 (2015).
- [8] Г.К. Сафаралиев, Н.К. Каргин, М.К. Курбанов, Б.А.Билалов, Ш.М. Рамазанов, А.С. Гусев. Вест. Нац. исслед. ядерного ун-та „МИФИ“, **3** (1), 63 (2014).
- [9] Ф.Е. Шуберт. *Светодиоды* (М., Физматлит, 2008).

Редактор Г.А. Оганесян

Nonlinear by concentration model of surface state of the Schottky barrier and calculation of current-voltage characteristics of SiC-based diodes and its solid solutions in composite model of transfer electric current

V.I. Altukhov¹, A.V. Sankin¹, A.S. Sigov²,
D.K. Sysoev¹, E.G. Yanukyan¹, S.V. Filippova³

¹ North-Caucasian Federal University,
355009 Stavropol, Russia

² Moscow Institute of Radio Electronics and Automatics,
119454 Moscow, Russia

³ Pjatigorskij medico-pharmaceutical Institute,
357500 Pyatigorsk, Russia

Abstract Proposed modified nonlinear surface by concentration model of surface states of Schottky barrier model containing local quasi-level Fermi at the border section caused by excessive surface charge. Such approach allows to explain the observed similarity of current-voltage characteristics diodes Schottky barrier $M/(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ and on the hetero-transitions basis of SiC and its solid solutions, taking into account the $\Phi_g \approx \Phi_B$. The results of calculations of height Schottky barriers are consistent with those obtained by the photocurrent experiments for metals (M): Al, Ti, Cr, Ni. Current-voltage characteristics in composite-additive of transfer electric current model consistent with experiments for systems of $n\text{-Me}/p\text{-}(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ and $n\text{-6H-SiC}/p\text{-}(\text{SiC})_{0.85}(\text{AlN})_{0.15}$.