

# Деполяризация в структуре металл–*p*-сегнетоэлектрик–*n*-полупроводник

© Л.С. Берман

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

(Получена 5 июля 2004 г. Принята к печати 13 июля 2004 г.)

Выполнен расчет деполяризации в структуре металл–*p*-сегнетоэлектрик–*n*-полупроводник, основанный на анализе экспериментальных параметров петли гистерезиса структуры металл–сегнетоэлектрик–металл. Для полупроводника уравнение Пуассона решается известными методами, для сегнетоэлектрика — численным интегрированием. Рассмотрены два варианта параметров полупроводника. 1. Широкая *n*-область, за областью объемного заряда имеется область электрической нейтральности. 2. Тонкая *n*-область, электрическое поле проникает сквозь *n*-область. Показано, что деполяризация существенно уменьшает поляризацию сегнетоэлектрика, причем это уменьшение более значительно для полупроводника с меньшей концентрацией примеси. В случае, когда электрическое поле проходит через всю *n*-область, деполяризация уменьшается с уменьшением толщины *n*-области.

## 1. Введение

В настоящее время интенсивно разрабатываются элементы памяти на полевых транзисторах с подзатворным изолятором из сегнетоэлектрика (см. работы [1–5] и др.). Одной из основных трудностей создания таких полевых транзисторов является деполяризация, т.е. уменьшение поляризации *P* в сегнетоэлектрике вследствие образования встречного заряда в тонком слое полупроводника и падения напряжения в этом слое. Поэтому актуальной задачей являются анализ деполяризации в структурах металл–сегнетоэлектрик–полупроводник и поиски путей ее уменьшения. Этой задаче посвящен ряд работ [6–9]. В нашей предыдущей работе [10] выполнено моделирование гистерезиса в структуре металл–*p*-сегнетоэлектрик–*p*-полупроводник.

В данной работе выполнен теоретический анализ деполяризации и гистерезиса в структуре металл–*p*-сегнетоэлектрик–*n*-полупроводник. Такой является, например, структура  $\text{PbZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3\text{-SnO}_2\text{:Sb}$ , используемая в полевых транзисторах [11–13]. Преимуществом таких структур является наличие *p*–*n*-перехода, ограничивающего обратный ток, а также более высокая подвижность носителей тока по сравнению с перовскитными полупроводниками.

## 2. Постановка задачи

На сегнетоэлектрик нанесен слой золота, образующий барьер Шоттки; контакт к полупроводнику — омический. В сегнетоэлектрике  $\text{PbZrTiO}_3$  (PZT) под слоем золота возможно образование пассивного (блокирующего) слоя, толщина которого  $d_p$  много меньше толщины PZT [14,15].

Пренебрежем падением напряжения в пассивном слое, тогда выполняется соотношение

$$V + V_{bi} = \Psi_s + V_f, \quad (1)$$

где  $V$  — внешнее напряжение,  $V_{bi}$  — контактная разность потенциалов между контактом к сегнетоэлектрику

и контактом к полупроводнику,  $\Psi_s$  — потенциал поверхности полупроводника,  $V_f$  — падение напряжения в сегнетоэлектрике.

Неоднородность сегнетоэлектрика учитывалась путем использования параметров экспериментальной петли гистерезиса. Неоднородность полупроводника учитывалась путем использования средних значений концентрации доноров  $N_d$  и диэлектрической проницаемости  $\epsilon_s$ . Примем, что в сегнетоэлектрике и полупроводнике есть только мелкие акцепторы и доноры соответственно, а дефекты сосредоточены на границе раздела между сегнетоэлектриком и полупроводником (поверхностные состояния).

На границе раздела выполняется соотношение

$$-(Q_{sc} + Q_{ss}) = \epsilon_0 E_f + P(E_f), \quad (2)$$

где  $Q_{sc}$  — заряд в области объемного заряда полупроводника,  $Q_{ss}$  — заряд поверхностных состояний,  $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м — диэлектрическая проницаемость вакуума,  $E_f$  — электрическое поле в сегнетоэлектрике,  $P(E_f)$  — поляризация в сегнетоэлектрике при поле  $E_f$ .

Рассмотрим общий случай работы на насыщенную петле гистерезиса (рис. 1). Для этого зависимость  $P(E_f)$  была нами аппроксимирована следующими выражениями [16].

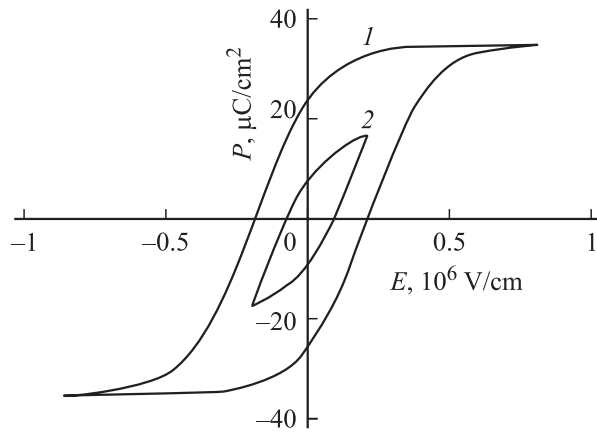
Для восходящей ветви

$$P(E_f) = P_s \text{th} \left( \frac{E_f - E_c}{2d} \right) + P_r(1 - a). \quad (3)$$

Для нисходящей ветви

$$P(E_f) = -P_s \text{th} \left( \frac{-E_f - E_c}{2d} \right) - P_r(1 - a), \quad (4)$$

где  $P_s$  — поляризация насыщения,  $P_r$  — остаточная поляризация,  $E_c$  — коэрцитивное поле, коэффициент  $a \leq 1$ . При  $a = 1$  выражения (3) и (4) переходят в формулы для насыщенной петли гистерезиса [17]. При расчете восходящей ветви используем, наряду с выражением (3), также выражения (1)–(3) из работы [18].



**Рис. 1.** Петли гистерезиса структуры металл-сегнетоэлектрик-металл: 1 — насыщенная,  $P_s = 35$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $P_r = 25$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $E_c = 2 \cdot 10^5$  В/см; 2 — ненасыщенная,  $a = 0.5$ .

Для полупроводника решение уравнения Пуассона хорошо известно (см., например, [19]). В сегнетоэлектрике уравнение Пуассона интегрируется численными методами.

Для расчетов были использованы следующие значения параметров сегнетоэлектрика:  $P_s = 35$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $P_r = 25$  мкКл/см<sup>2</sup>,  $E_c = 2 \cdot 10^5$  В/см,  $N_a = 10^{18}$  см<sup>-3</sup> — концентрация акцепторов,  $w_f = 1000$  Å — толщина сегнетоэлектрика. Для полупроводника примем  $\epsilon_s = 10$ , значение концентрации доноров  $N_d$  будем варьировать в пределах  $10^{17} - 10^{20}$  см<sup>-3</sup>.

Для оценки влияния поверхностных состояний на форму петли гистерезиса примем, что плотность поверхностных состояний постоянна по всей ширине запрещенной зоны. Постоянная времени термоэмиссии электронов с поверхностных состояний резко (по экспоненциальному закону) зависит от энергии ионизации (см., например, [19]). Поэтому примем, что заряд поверхностных состояний с энергией ионизации  $E$ , меньшей некоторого критического значения  $E_{cr}$ , успевает следовать за изменением внешнего напряжения, а с энергией, большей  $E_{cr}$ , — не успевает. Значение  $E_{cr}$  примем равным 0.7–0.8 эВ.

### 3. Результаты расчетов

Рассмотрим два возможных значения параметров полупроводника.

1. Толщина области объемного заряда  $h$  меньше толщины  $n$ -области  $W$ . Этот случай характерен для структуры PZT-SnO<sub>2</sub>.

2. Область объемного заряда проходит сквозь  $n$ -область до контакта к базе. Поле на контакте в общем случае не равно нулю. Этот случай может иметь место в структуре металл-*p*-PZT-металл при образовании  $n$ -области на *p*-PZT в ходе нанесения контактов [20,21].

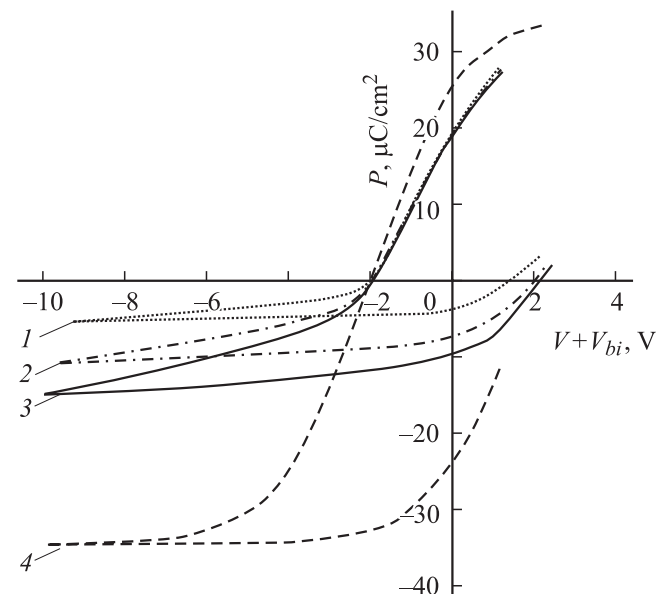
Рассмотрим последовательно оба этих случая.

#### 3.1. $h < W$

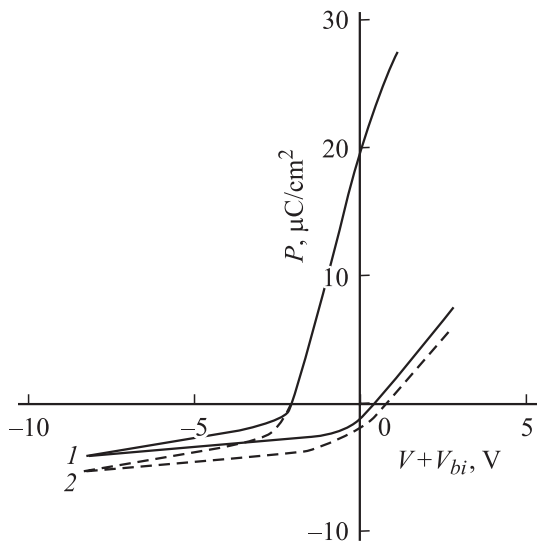
На рис. 2 приведены расчетные зависимости  $P = f(V + V_{bi})$  для  $N_{ss} = 0$  и трех значений  $N_d$  (линии 1–3). Для сравнения приведена также петля гистерезиса структуры металл-сегнетоэлектрик-металл с теми же параметрами сегнетоэлектрика, но без примесей в нем (линия 4).

При обогащении поверхности полупроводника ( $\Psi_s > 0$ ) ее свойства близки к свойствам металла, поэтому при  $\Psi_s > 0$  части нисходящих ветвей структур металл-сегнетоэлектрик-металл и металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник-металл близки.

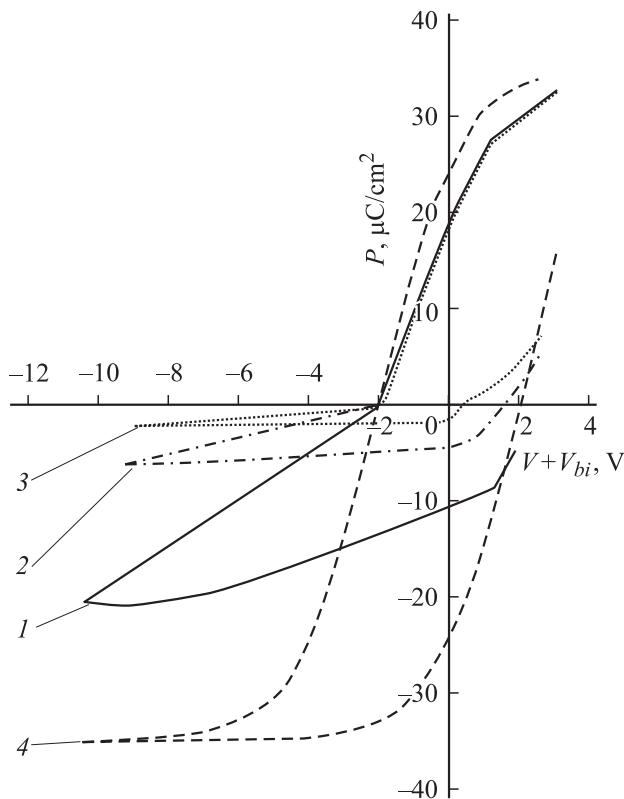
При обеднении поверхности полупроводника ( $\Psi_s < 0$ ) возрастание напряжения приводит к увеличению (по абсолютной величине) потенциала поверхности полупроводника, при этом мало изменяются напряжение на сегнетоэлектрике и его поляризация. Поэтому поляризация структуры металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник-металл существенно меньше поляризации структуры металл-сегнетоэлектрик-металл. Эта закономерность выражена более четко для полупроводников с меньшей концентрацией доноров (ср. ход линий 1–3 при отрицательных значениях поляризации). Зависимости  $P = f(V + V_{bi})$  для структур металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник-металл и металл-*p*-сегнетоэлектрик-*p*-полупроводник-металл симметричны; в обеих структурах значения остаточной поляризации (при прочих равных условиях) — одного порядка (ср. с ре-



**Рис. 2.** Насыщенные петли гистерезиса для структур металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник при различных концентрациях доноров ( $N_{ss} = 0$ )  $N_d$ , см<sup>-3</sup>: 1 —  $10^{19}$ , 2 —  $5 \cdot 10^{19}$ , 3 —  $10^{20}$ , 4 — сегнетоэлектрик с теми же параметрами, но без примесей в нем, структура металл-сегнетоэлектрик-металл;  $w_f = 1000$  Å.



**Рис. 3.** Насыщенные петли гистерезиса структуры металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник при различной плотности поверхностных состояний  $N_{ss}, \text{см}^{-2}\text{эВ}^{-1}$ : 1 — 0, 2 —  $10^{13}$ .  $N_d = 10^{19} \text{см}^{-3}$ ,  $w_f = 1000 \text{Å}$ .



**Рис. 4.** Насыщенные петли гистерезиса при  $N_{ss} = 0$ ,  $w_f = 1000 \text{Å}$  и  $N_d = 10^{17} \text{см}^{-3}$ .  $W, \text{Å}$ : 1 — 30, 2 — 100; 3 — область объемного заряда не проходит сквозь всю *n*-область (для линии 3 отрицательные значения поляризации увеличены в 5 раз); 4 — сегнетоэлектрик с теми же параметрами, но без примесей и без *n*-слоя.

зультатами [10]). Петли гистерезиса структуры металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник-металл качественно сходны с экспериментальной петлей гистерезиса для структуры металл-*p*-сульфат триглицина-*n*-Si-металл в работе [9], что подтверждает правильность нашего метода.

Был выполнен расчет петель гистерезиса для двух значений плотности поверхностных состояний:  $N_{ss} = 0$  и  $N_{ss} = 10^{13} \text{см}^{-2}\text{эВ}^{-1}$  (при  $N_d = 10^{19} \text{см}^{-3}$ ) (см. рис. 3). При  $h = 100 \text{Å}$  плотность поверхностных состояний  $N_{ss} = 10^{13} \text{см}^{-2}\text{эВ}^{-1}$  соответствует концентрации ловушек в области объемного заряда  $N_t = N_{ss} E_{cr} / h = 0.8 \cdot 10^{19} \text{см}^{-3}$ . Из результата расчета видно, что при  $N_t < N_d$  поверхностные состояния мало влияют на параметры петли гистерезиса.

### 3.2. $h = W$

Область объемного заряда проходит сквозь *n*-область. В этом случае  $w_f$  — толщина сегнетоэлектрика без *n*-слоя. На рис. 4 приведены расчетные зависимости  $P = f(V + V_{bi})$  при  $N_{ss} = 0$  и  $N_d = 10^{17} \text{см}^{-3}$  для значений  $W = 30, 100 \text{Å}$ . Для сравнения показана также зависимость  $P = f(V + V_{bi})$  для случая, когда область объемного заряда не проходит сквозь всю *n*-область (линия 3 на рис. 4, см. раздел 3.1).

При обогащении поверхности полупроводника зависимости  $P = f(V + V_{bi})$  близки для трех значений  $W$ , так как концентрация электронов на границе раздела приближается к концентрации электронов в металле.

При обеднении поверхности полупроводника с уменьшением толщины *n*-слоя параметры структуры приближаются к параметрам структуры металл-сегнетоэлектрик-металл без *n*-слоя. Поэтому при уменьшении толщины *n*-слоя уменьшается и деполяризация (ср. линии 1–3 на рис. 4).

## 4. Заключение

Выполнен анализ деполяризации для структуры металл-*p*-сегнетоэлектрик-*n*-полупроводник, основанный на использовании экспериментальных параметров петель гистерезиса структуры металл-сегнетоэлектрик-металл при варьировании параметров полупроводника.

Для полупроводника уравнение Пуассона решается известными методами, а для сегнетоэлектрика — численным интегрированием.

Рассмотрены два варианта параметров полупроводника.

1. Толстая *n*-область, за областью объемного заряда находится область электрической нейтральности. В этом случае деполяризующее действие полупроводника значительно уменьшает поляризацию сегнетоэлектрика, причем это уменьшение больше для высокоомного полупроводника. По петле гистерезиса при обеднении можно оценить порядок концентрации доноров в полупроводнике.

2. Тонкая *n*-область, электрическое поле проходит сквозь *n*-область до контакта к ней. В этом случае деполаризация уменьшается при уменьшении толщины *n*-области. По петле гистерезиса при обеднении можно оценить толщину *n*-области.

Работа выполнена при поддержке РФФИ и программы ОФН РАН.

Автор выражает признательность И.В. Грехову за постановку задачи и обсуждение результатов.

## Список литературы

- [1] J.F. Scott, D.A. Araujo. *Science*, **246**, 1400 (1989).
- [2] Y. Watanabe, Y. Matsumoto, M. Tanamura. *Jap. J. Appl. Phys.*, pt 1, **34**, 5254 (1995).
- [3] Y. Watanabe. *Phys. Rev. B*, **59**, 11 257 (1999).
- [4] W. Wu, K.H. Wong, C.L. Mak et al. *J. Appl. Phys.*, **88**, 2068 (2000).
- [5] Y.T. Kim, D.S. Shin. *Appl. Phys. Lett.*, **71**, 3507 (1997).
- [6] Б.М. Вул, Г.М. Гуро, И.И. Иванчик. *ФТП*, **4**, 162 (1970).
- [7] R.R. Mehta, B.D. Silverman, J.T. Jacobs. *J. Appl. Phys.*, **44**, 3379 (1973).
- [8] I.P. Batra, P. Wurfel. *Phys. Rev. B*, **8**, 3257 (1973).
- [9] P. Wurfel, I.P. Batra. *Phys. Rev. B*, **8**, 5126 (1973).
- [10] Л.С. Берман. *ФТП*, **35**, 200 (2001).
- [11] M.W. Prins, K.O. Grosse-Holz, G. Muller et al. *Appl. Phys. Lett.*, **68**, 3650 (1996).
- [12] M.W. Prins, S.E. Zinnemers, J.F.M. Cillessen et al. *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 458 (1997).
- [13] M.W. Prins, K.O. Grosse-Holz, J.F.M. Cillessen et al. *J. Appl. Phys.*, **83**, 888 (1998).
- [14] J.M. Benedetto, R.A. Moore, McLean. *J. Appl. Phys.*, **75**, 460 (1994).
- [15] P.K. Larsen, G.J.M. Dormans, D.J. Taylor, P.J. van Veldhoven. *J. Appl. Phys.*, **76**, 2405 (1994).
- [16] Л.С. Берман, И.Е. Титков. *ФТП*, **38** (6), 69 (2004).
- [17] S.L. Miller, J.P. Schwank, R.D. Nasby, M.S. Rodgers. *J. Appl. Phys.*, **68**, 6463 (1990).
- [18] S.L. Miller, J.R. Schwank, R.D. Nasby, M.S. Rodgers. *J. Appl. Phys.*, **70**, 2849 (1991).
- [19] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1981) т. 1.
- [20] J.F.M. Cillessen, M.W.J. Prins, R.M. Wolf. *J. Appl. Phys.*, **81**, 2778 (1997).
- [21] V.P. Afanasjev, A.A. Petrov, I.P. Pronin, E.A. Tarakanov. *J. Phys.: Condens. Mater.*, **39** (13), 138 (2001).

Редактор Т.А. Полянская

## Depolarization in metal–*p*-type ferroelectric–*n*-type semiconductor structure

L.S. Berman

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

**Abstract** Calculations of depolarization in metal–*n*-type ferroelectric–*n*-type semiconductor are made. These calculations are based on the use of experimental parameters of ferroelectric hysteresis loop and on modified semiconductor parameters. For a semiconductor the Poisson's equation is solved by known methods and for ferroelectric — by a numerical integration. Two kinds of semiconductor parameters are considered. 1). The thick *n*-region with a space charge region and electrical neutrality region. Depolarizing influence of semiconductor decreases appreciably ferroelectric polarization, this decrease being greater for high resistivity semiconductor. Hysteresis loop enables to evaluate the order of donor concentration. 2). The thin *n*-region, an electrical field penetrates through the *n*-region. Depolarization decreases with the *n*-region thickness reduction. Hysteresis loop enables to evaluate the thickness of *n*-region.