ИЗМЕНЕНИЕ ВЫСОТЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА КОНТАКТОВ МЕТАЛЛ—КРЕМНИЙ В УСЛОВИЯХ ДЕФОРМАЦИИ

Фастыковский П. П., Канчуковский О. П.

Изучение влияния деформации на высоту потенциального барьера контактов металл—полупроводник, в частности широко используемых контактов металл—кремний, представляет интерес как с точки зрения физики таких контактов, так и для прикладных целей. Существующие модели, однако, позволяют лишь качественно описать зависимость высоты барьера φ_6 от прикладываемого давления P.

Для более адекватного описания процессов, происходящих с изменением высоты потенциального барьера контактов металл—кремний в условиях деформации, в работе использовалась модель контакта металл—полупроводник с промежуточным диэлектрическим слоем и поверхностными состояниями, содержащими в их спектре дискретный поверхностный уровень, близко расположенный к уровню электронейтральности поверхности. Кроме того, учитывалась возможность энергетического смещения уровня при деформировании контакта. Полученное аналитическое выражение для величины $\partial\varphi_6/\partial P$ подтверждено экспериментально на контактах молибден—кремний.

Исследование поведения высоты потенциального барьера контактов металл—полупроводник, в частности широко используемых контактов металл—кремний в условиях деформации, представляет интерес как с точки зрения физики таких контактов, так и для прикладных целей. Анализ имеющихся работ по этому вопросу, например [1-3], показывает, что при деформировании контактов (чаще всего одноосном сжатии) всегда происходит уменьшение высоты их потенциального барьера φ_6, что качественно связано с уменьшением ширины запрещенной зоны кремния E_g при различных видах деформации [4]. При этом часто величина $\partial\varphi_6/\partial P \gg \partial E_g/\partial P$, где P — производимое давление на контакт. Пытаясь объяснить этот факт, в работе [5], исходя из модели контакта с промежуточным диэлектрическим слоем и равномерно распределенной по ширине запрещенной зоны плотностью поверхностных состояний, а также полагая $\gamma \to 0$ (предел Бардина), где $\gamma=\varepsilon_0\varepsilon_i/(\varepsilon_0\varepsilon_i+q^2\delta D_s)$, ε_i — относительная диэлектрическая проницаемость промежуточного слоя, δ — его толщина, D_s — плотность поверхностных состояний в единичном интервале энергий (в эВ$^{-1}\cdot$см$^{-2}$), получили следующее соотношение для величины $\partial\varphi_6/\partial P$:

$$\left|\frac{\partial\varphi_6}{\partial P}\right| = \left|\frac{\partial E_g}{\partial P}\right| + \left|\frac{\partial\varphi_0}{\partial P}\right|, \tag{1}$$

где φ_0 — энергия уровня электронейтральности, отсчитываемая от потолка валентной зоны.

Из (1) следует, что при $\partial\varphi_0/\partial P \gg \partial E_g/\partial P$ $\partial\varphi_6/\partial P \gg \partial E_g/\partial P$. Однако, как отмечалось самими авторами работы [5], соотношение (1) лишь качественно объясняет экспериментальную зависимость φ_6 от P. Возможной причиной этого может быть некорректность использования исходной модели контакта применительно к реальным контактам. Действительно, известно, что для наиболее часто используемых контактов металл—кремний, изготовленных на травленой поверхности кремния, плотность поверхностных состояний имеет ярко выраженные максимумы, а величина γ может заметно отличаться от нуля [6, 7]. Кроме того, определение $\partial\varphi_6/\partial P$ по соотношению (1) затруднено из-за отсутствия достоверной информации о φ_0 и $\partial\varphi_0/\partial P$.

С целью получения аналитического выражения $\partial\varphi_б/\partial P$, более полно описывающего изменение высоты барьера реальных контактов металл—кремний в условиях деформации, можно воспользоваться моделью контакта с промежуточным диэлектрическим слоем и плотностью поверхностных состояний, имеющей на фоне равномерно распределенной по ширине запрещенной зоны плотности состояний ярко выраженный максимум при энергии E_s [6]. Если энергия E_s близка к φ_0, высота барьера, согласно этой модели, определяется как

$$\varphi_б = \gamma\,(\varphi_м - \chi_n - q\delta Q_s/\varepsilon_0\varepsilon_i) + (1-\gamma)\,(E_g - E_s), \tag{2}$$

где Q_s — плотность заряда уровня E_s (энергия уровня E_s отсчитывается от потолка валентной зоны полупроводника у поверхности), $\varphi_м$ — работа выхода металла, χ_n — электронное сродство полупроводника.

Полагая, что величины ε_i, δ, γ, $\varphi_м$ и χ_n в пределах упругих деформаций меняются незначительно [8], из выражения (2) можно определить $\partial\varphi_б/\partial P$:

$$\frac{\partial\varphi_б}{\partial P} = -\frac{q\gamma\delta}{\varepsilon_0\varepsilon_i}\frac{\partial Q_s}{\partial P} + (1-\gamma)\left(\frac{\partial E_g}{\partial P} - \frac{\partial E_s}{\partial P}\right). \tag{3}$$

Величину $\partial Q_s/\partial P$ можно определить, используя для акцепторного и донорного уровней соответственно следующие выражения: $Q_s^A = -qN_s f$ и $Q_s^D = qN_s(1-f)$, где f — функция распределения электронов на поверхностном уровне, N_s — плотность уровня (в см$^{-2}$). Тогда

$$\frac{\partial Q_s^A}{\partial P} = -q\left[\frac{\partial N_s}{\partial P} f + N_s\frac{\partial f}{\partial P}\right], \tag{4}$$

$$\frac{\partial Q_s^D}{\partial P} = q\left[\frac{\partial N_s}{\partial P}(1-f) - N_s\frac{\partial f}{\partial P}\right], \tag{5}$$

$$\frac{\partial f}{\partial P} = -\frac{2\exp\left[(E_s - E_F^s)/kT\right]}{kT\left\{2 + \exp\left[(E_s - E_F^s)/kT\right]\right\}^2}\left(\frac{\partial E_s}{\partial P} - \frac{\partial E_F^s}{\partial P}\right), \tag{6}$$

где E_F^s — энергетическое положение уровня Ферми полупроводника у поверхности, отсчитываемое от потолка валентной зоны.

Анализ выражений (4)—(6) показывает, что в общем случае изменение заряда уровня при деформации связано как с изменением плотности уровня, так и с его энергетическим смещением относительно уровня E_F^s.

Рассмотрим часто встречающуюся ситуацию в контактах металл—полупроводник, когда поверхностный уровень расположен вблизи уровня Ферми полупроводника у поверхности. Тогда вполне допустимо условие $N_s\partial f/\partial P > \partial N_s/\partial P$. Учитывая экспериментальные результаты работ [5, 9], допустим также, что при деформации энергия поверхностного уровня относительно дна зоны проводимости кремния уменьшается, т. е. $\partial E_s/\partial P > 0$, а $\partial E_s/\partial P > \partial E_F^s/\partial P$. Тогда из выражений (4), (5) следует, что величина $\partial Q_s/\partial P$ будет всегда положительна. А это означает, что первое слагаемое в выражении (3) всегда отрицательно, что соответствует уменьшению высоты потенциального барьера под давлением. Кроме того, учитывая, что в кремнии $\partial E_g/\partial P < 0$ [4], выражение (3) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial\varphi_б}{\partial P} = -\frac{q\gamma\delta}{\varepsilon_0\varepsilon_i}\frac{\partial Q_s}{\partial P} - (1-\gamma)\left(\left|\frac{\partial E_g}{\partial P}\right| + \left|\frac{\partial E_s}{\partial P}\right|\right). \tag{7}$$

Из полученного выражения, в частности, следует, что в кремниевых контактах высота потенциального барьера под давлением должна уменьшаться. Этот вывод соответствует всем имеющимся экспериментальным результатам. Кроме того, если $\partial E_s/\partial P \gg \partial E_g/\partial P$, то даже при $\partial Q_s/\partial P \to 0$ $\partial\varphi_б/\partial P \gg \partial E_g/\partial P$, что, как отмечалось выше, часто наблюдается экспериментально.

Из выражения (7) также следует, что если в запрещенной зоне кремния предполагаемый в исходной модели дискретный поверхностный уровень отсутствует либо присутствует, но практически не смещается под давлением относительно уровня Ферми у поверхности (например, вследствие пиннинга уровня Ферми этим уровнем, что характерно для выпрямляющих контактов с минимальной толщиной промежуточного слоя [6]), то это выражение может быть записано следующим образом:

$$\frac{\partial\varphi_б}{\partial P} = -(1-\gamma)\left|\frac{\partial E_g}{\partial P}\right|. \tag{8}$$

Один из этих вариантов, вероятно, реализовывался в тесных ($\delta \to 0$) контактах золото—кремний [10], где экспериментально было определено, что $|\partial\varphi_б/\partial P| \approx 2/3\, |\partial E_g/\partial P|$. Аналогичная ситуация может наблюдаться также в контактах металл—арсенид галлия, так как известно [11], что в этих контактах $\partial\varphi_б/\partial P \leqslant \partial E_g/\partial P$.

Для экспериментальной проверки полученного выражения (7) изготавливались выпрямляющие контакты на кремнии с ориентациями (100) и (111). Выпрямляющим электродом контактов с учетом требуемых механических характеристик служил молибден, который наносился термическим испарением в вакууме. Для того чтобы иметь возможность определять энергетические положения поверхностных уровней и их изменения под давлением, используя стандартные вольтфарадные методы, например [7, 12], в контактах перед нанесением молибдена с помощью термического окисления кремния создавался промежуточный окисный слой толщиной 50 Å; $\varphi_б$ и $\partial\varphi_б/\partial P$ определялись как из ВФХ, так и по ВАХ. Давление на контакты в диапазоне от 0 до $7\cdot10^7$ Па создавалось с помощью плоского индентора перпендикулярно их поверхности, $T=295$ К.

Проведенные исследования показали, что изготовленные контакты содержат в энергетическом спектре поверхностных состояний дискретные уровни акцепторного типа, в отсутствие смещения близко расположенные к уровню Ферми кремния. При деформировании контактов наблюдалось уменьшение энергии этих уровней относительно дна зоны проводимости кремния, причем $\partial E_s/\partial P > \partial E_F^s/\partial P$, что, с одной стороны, соответствовало результатам работ [5, 9], а с другой — подтверждало справедливость сделанных выше допущений.

Si	γ^*	$D_s\cdot10^{-12}$, $см^{-2}\cdot эВ^{-1}$	$N_s\cdot10^{-12}$, $см^{-2}$	$\partial N_s/\partial P\cdot10^{-2}$, $см^{-2}\cdot Па^{-1}$	$\partial E_g^*/\partial P\cdot10^{11}$, эВ/Па	E_s, эВ	$\partial E_s/\partial P\cdot10^{10}$, эВ/Па
(100)	0.9	0.5	2.0	4.3	—5.2	0.38	4.3
(111)	0.69	2.0	0.6	2.9	—3.8	0.38	5.7

Продолжение

$\partial E_F^s/\partial P\cdot10^{10}$, эВ/Па	f^*	$\partial f^*/\partial P\cdot10^{10}$, $Па^{-1}$	$\partial Q_s^*/\partial P\cdot10^{8}$, $Кл/см^2\cdot Па$	$\varphi_Б$, эВ	$\partial\varphi_Б/\partial P\cdot10^{10}$, эВ/Па	$\partial\varphi_Б^*/\partial P\cdot10^{10}$, эВ/Па
2.9	0.77	—6.5	1.6	0.71	—2.9	—2.5
2.9	0.92	—4.8	0.05	0.68	—2.9	—2.0

Экспериментальные и расчетные (отмечены звездочкой) величины, входящие в выражение (7), представлены в таблице. Значения $\partial E_g/\partial P$ приведены из работы [4], а ε_i принималась равной 4.0, что для использованной в контактах толщины окисла согласуется с результатами работ [13, 14]. Сравнение экспериментально определенных величин $\partial\varphi_б/\partial P$ с рассчитанными по выражению (7) показывает, что эти величины находятся в удовлетворительном соответствии.

Таким образом, использование модели контакта металл—полупроводник с промежуточным диэлектрическим слоем и поверхностными состояниями, содержащими в их спектре дискретный поверхностный уровень, близко расположенный к уровню электронейтральности поверхности, а также учет возможности энергетического смещения уровня при деформировании контакта позволяют более адекватно описывать процессы, происходящие с изменением высоты потенциального барьера контактов металл—кремний в условиях деформации. Полученное выражение для величины $\partial\varphi_б/\partial P$ подтверждено экспериментально на контактах молибден—кремний.

Список литературы

[1] Kikuchi M., Saito M., Okushi H. // Sol. St. Commun. 1969. V. 7. N 5. P. 463—465.
[2] Елинсон М. И., Покалякин В. И., Полякова А. Л. // Радиотехн. и электрон. 1970. Т. 15. В. 1. С. 210—212.
[3] Макаревич А. Б., Покалякин В. И., Полякова А. Л. // Акуст. журн. 1974. Т. 20. В. 3. С. 443—448.
[4] Полякова А. Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. М., 1979. 168 с.
[5] Канчуковский О. П., Мороз Л. В., Садова Н. Н., Преснов В. А. // Изв. вузов СССР. Физика. 1984. № 5. С. 6—9.
[6] Родерик Э. Х. Контакты металл—полупроводник. М., 1982. 208 с.
[7] Стриха В. И., Бузанева Е. В., Радзиевский И. А. Полупроводниковые приборы с барьером Шоттки. М., 1974. 248 с.
[8] Fonash S. J. // J. Appl. Phys. 1973. V. 44. N 10. P. 4607—4615.
[9] Канчуковский О. П., Преснов В. А., Фастыковский П. П., Шенкевич А. Л. // Изв. вузов СССР. Физика. 1988. № 9. С. 65—69.
[10] Кауфман М. С., Покалякин В. И., Степанов Г. В. // Радиотехн. и электрон. 1976. Т. 21. В. 11. С. 2446—2448.
[11] Вяткин А. П., Максимова Н. К., Филонов Н. Г. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 7. С. 1384—1387.
[12] Terman L. M. // Sol. St. Electron. 1962. V. 5. N 3. P. 285—297.
[13] Ковчавцев А. П., Французов А. А. // Науч. тр. ИФП СО АН СССР «Физические процессы в структурах МДП». Новосибирск, 1978. С. 37—44.
[14] Монахов В. В., Романов О. В., Кириллов С. Н. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 3. С. 477—480.

Одесский государственный университет
им. И. И. Мечникова

Получена 2.06.1989
Принята к печати 16.10.1989