

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ В БАРЬЕРЕ НА ФЛУКТУАЦИОННЫЙ ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК ЧЕРЕЗ КОНТАКТ МЕТАЛЛ—ПОЛУПРОВОДНИК

Райх М. Э., Рузин И. М., Шкловский Б. И.

Рассмотрено прохождение тока через контакт металл—полупроводник, в котором область объемного заряда является сильно компенсированной. Кроме того, предполагается, что в запрещенной зоне полупроводника имеются локализованные состояния. Сильная компенсация приводит к флуктуационным сужениям барьера, через которые протекает основной ток. Наличие локализованных состояний также облегчает подбарьерное движение электрона, поскольку оно может осуществляться короткими прыжками по этим состояниям. Рассмотрено совместное действие обоих механизмов и получено выражение для логарифма тока.

В работах [1, 2] исследовалось прохождение туннельного тока через p - n -переход, а также через контакт металл—полупроводник в случае, когда в области туннелирования имеется сильная компенсация: $N_D - N_A \ll N_D + N_A$, где N_D и N_A — концентрации доноров и акцепторов. Специфика этого случая состоит в том, что даже небольшие по сравнению с $(N_D + N_A)$ флуктуации концентрации заряженных примесей могут, если они превышают $N_D - N_A$, привести к сильному сужению туннельного барьера. В результате туннельный ток J через такие сужения оказывается экспоненциально больше рассчитанного без учета флуктуации. Для логарифма туннельного тока через контакт металл—полупроводник в [2] было получено выражение

$$\ln \left(\frac{J}{J_0} \right) = -\frac{1}{5} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{U_0}{E_B} \right)^{3/4} (N_D a_B^3)^{-1/2} = -Q_t, \quad (1)$$

где U_0 — высота барьера (см. рисунок), $E_B = me^2/2\hbar^2\kappa^2$ и $a_B = \hbar^2\kappa/me^2$ — боровские энергия и радиус электрона, m — эффективная масса электрона, κ — диэлектрическая проницаемость, J_0 — предэкспоненциальный множитель. Формула (1) справедлива для достаточно малых смещений, когда электрическое поле флуктуации значительно больше среднего электрического поля в барьере. Поэтому зависимость от смещения возникает только в поправочном члене к (1).

В [1, 2] предлагалось, что прохождение тока осуществляется путем прямого туннелирования электронов под барьером, форма которого определяется распределением флуктуационного заряда. Между тем, если в запрещенной зоне полупроводника в области флуктуации имеются локализованные состояния (ЛС), подбарьерное движение электрона может осуществляться прыжками по ЛС, что приводит к дополнительному увеличению прозрачности суженного барьера.

Цель настоящей статьи — понять, насколько влияние ЛС меняет результат (1). В принципе, ЛС способны изменить проводимость барьера и сами по себе, т. е. без флуктуационного сужения барьера. Как показано в [3], при достаточно больших смещениях ЛС могут полностью определять туннельный ток через контакт металл—полупроводник или p - n -переход. Однако при малых смещениях цепочки ЛС, которые определяют проводимость барьера, оказываются очень длинными и, следовательно, маловероятными. В результате они проигрывают по сравнению с флуктуационными сужениями барьера. Поэтому и представляет интерес изучение влияния на прозрачность барьера двухкомпо-

нентной флуктуации, состоящей из рассмотренного в [1, 2] флуктуационного сужения барьера и цепочки ЛС внутри него (см. рисунок). В этой флуктуации каждый компонент играет свою взаимодополняющую роль. В то время как плавная флуктуация сокращает полную длину подбарьерного пути, цепочка ЛС облегчает движение по нему, уменьшая длину каждого отдельного прыжка и, следовательно, увеличивая его вероятность.

Предположим, что плотность ЛС зависит от энергии ε , отсчитанной от дна зоны проводимости, следующим образом:

$$g(\varepsilon) = g_0 e^{-\nu(\varepsilon)}, \quad \varphi(\varepsilon) = (\varepsilon/E_0)^\nu, \quad (2)$$

где g_0 — предэкспоненциальный множитель, а энергия E_0 и показатель $\nu \sim 1$ — параметры, зависящие от происхождения ЛС.

Ясно, что наиболее благоприятной для прыжкового подбарьерного движения электрона является ситуация, когда цепочка ЛС вытянута вдоль оси флуктуации (см. рисунок). В этом случае для расчета проводимости флуктуации следует усреднить проводимость цепочки по всевозможным конфигурациям образующих ее ЛС. Аналогичная задача уже рассматривалась в [4], где изучалась поперечная прыжковая проводимость аморфной пленки. Полученное в [4] выражение для проводимости имеет вид

$$\ln\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) = -\left[8 \frac{x_t}{\lambda} \ln\left(\frac{H}{g}\right)\right]^{1/2}, \quad (3)$$

где x_t — толщина пленки, λ — радиус затухания волновой функции ЛС, g — плотность ЛС, которая предполагалась не зависящей от энергии, $H = (T\lambda x_t^2)^{-1}$, где T — температура.

В рассматриваемом нами случае плотность ЛС (2) экспоненциально мала, так что выражение (3) принимает вид

$$\ln\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) = -W \sim -\left[\frac{x_t \varphi}{\lambda}\right]^{1/2}, \quad (4)$$

где x_t — толщина барьера в области флуктуации (см. рисунок). Величину λ можно оценить как $\lambda \sim \hbar/(mU_0)^{1/2} \sim a_B (E_B/U_0)^{1/2}$, а для φ следует использовать формулу (2), подставив в нее $\varepsilon \sim U_0$. В результате получаем

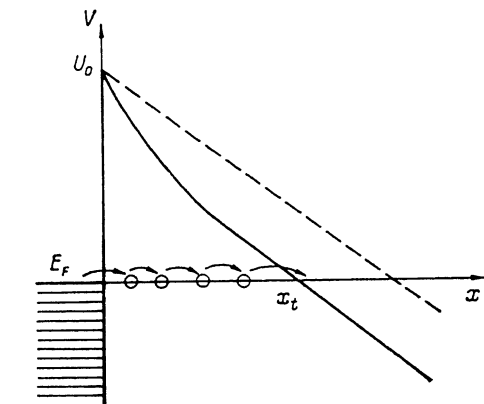
$$W = \frac{x_t^{1/2} U_0^{2+\nu}}{a_B^{1/2} E_0^{1/2} g^{1+\nu}}. \quad (5)$$

Численный коэффициент в этой формуле, не существенный для качественного рассмотрения, опущен. Величина x_t в формуле (5) определяется величиной флуктуации концентрации заряженных примесей N . Вероятность образования такой флуктуации, создающей на длине x_t изгиб зон на величину U_0 , обозначим через $\exp(-\Omega)$. Как мы увидим далее, существенными для нахождения тока через контакт оказываются флуктуации с $N \ll N_D$, и для расчета вероятности можно воспользоваться гауссовой статистикой

$$\Omega = N^2 x_t^2 / N_D. \quad (6)$$

Величины N и x_t связаны уравнением Пуассона: $U_0/x_t^2 = e^2 N/x$, так что выражение для Ω можно представить в виде

$$\Omega = \left(\frac{U_0}{E_B}\right)^2 (N_D x_t a_B^2)^{-1}. \quad (7)$$



Наибольший вклад в туннельный ток дают такие флуктуации, для которых произведение $\exp(-W) \exp(-\Omega)$ максимално. Этот максимум достигается при $x_i \sim x_0$, где

$$x_0 = a_B \frac{U_0^{1/3} E_0^{2/3}}{(N_D a_B^3)^{1/3} E_B^{1/3}}. \quad (8)$$

При этом флуктуационная концентрация примесей порядка

$$N_0 = N_D \frac{(N_D a_B^3)^{1/3} E_B^{1/3}}{U_0^{1/3} E_0^{2/3}}. \quad (9)$$

Легко видеть, что отношение $N_0/N_D \ll 1$. Подставляя выражение (8) в формулы (5), (7), для показателя экспоненты тока через контакт $\ln(J/J_0) = -Q_h = -(\Omega + W)$ получим $Q_h = \alpha Q_0$, где

$$Q_0 = \frac{U_0^{5/3} E_0^{-\nu/3}}{E_B^{5/3} E_0^{2/3} (N_D a_B^3)^{1/3}}, \quad (10)$$

а α — численный коэффициент. Отметим, что формула (1) (с точностью до численного коэффициента) получается из аналогичного рассмотрения, если в качестве величины W использовать выражение для логарифма туннельной прозрачности барьера $W \sim x_i/\lambda \sim (x_i/a_B)(U_0/E_B)^{1/2}$. Проведенный анализ не позволяет найти численный коэффициент α в выражении для логарифма тока Q_h . Этот коэффициент найден в следующем разделе. Он равен

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{6}{5+2\nu} \right)^{2/3}. \quad (11)$$

Для того чтобы выяснить, при какой плотности ЛС рассмотренный выше механизм прохождения тока является определяющим, составим отношение Q_h/Q_t , где величина Q_t дается формулой (1):

$$\frac{Q_h}{Q_t} = \frac{15\pi^{1/3} (N_D a_B^3)^{1/3}}{2^{5/3} (5+2\nu)^{2/3}} \left(\frac{E_B}{U_0} \right)^{(5-\nu)/2} \left(\frac{E_0}{E_B} \right)^{\nu/3}. \quad (12)$$

Прыжки по ЛС оказываются выгодными, если $Q_h/Q_t < 1$. Как видно из (12), отношение Q_h/Q_t существенно зависит от параметров E_0 и ν . Если предположить, что ЛС формируется флуктуационными скоплениями доноров, создающими многозарядные водородоподобные атомы, то, как показано в [5],

$$g = g_0 e^{-(\varepsilon/E_0)^{1/2}}, \quad (13)$$

где $E_0 = E_B/\mathcal{L}^2$, а величина \mathcal{L} удовлетворяет уравнению

$$\mathcal{L} = \ln \left[\left(\frac{U_0}{E_B} \right)^2 \frac{\mathcal{L}^{3/2}}{N_D a_B^3} \right]. \quad (14)$$

Для типичных значений $U_0 = 0.9$ эВ, $E_B = 3$ мэВ имеем $U_0/E_B = 300$. Полагая в (14) $N_D a_B^3 \sim 1$, находим $\mathcal{L} = 8.24$. Отношение (12) при этом составляет 1.5, т. е. прыжковый механизм проигрывает прямому туннелированию. Происходит это по численным причинам, несмотря на то что отношение (12) пропорционально малому параметру $(E_B/U_0)^{1/4}$. При уменьшении ν отношение Q_h/Q_t уменьшается. Кроме того, ослабляется его зависимость от параметра E_0 . При $E_0 \simeq E_B$ условие $Q_h/Q_t < 1$ начинает выполняться при $\nu \lesssim 1/4$.

В принципе, возможна ситуация, когда плотность ЛС спадает с ростом энергии значительно медленнее, чем (13). Речь идет о ЛС, создаваемых парами доноров со значительными потенциалами центральной ячейки. Рассмотрим, например, примесь мышьяка в кремнии. Известно, что за счет потенциала центральной ячейки энергия его ионизации на 22 мэВ больше энергии $E_B = 31.3$ мэВ, которую дает метод эффективной массы для кулоновского потенциала. Это означает, что сам по себе (без кулоновского потенциала) потенциал центральной

ячейки способен создать мелкое (с энергией $\varepsilon_c \sim E_B$) состояние в запрещенной зоне. При этом величина потенциала в центральной ячейке U_c может быть порядка или даже больше ширины запрещенной зоны. Рассмотрим теперь основное состояние пары таких доноров, расположенных на расстоянии r . Ясно что при $r \ll a_B$ кулоновским потенциалом можно пренебречь. Тогда возникает задача о спектре системы двух δ -образных ям [6]. Энергия $\varepsilon(r)$ в такой задаче при $\varepsilon_c \ll \varepsilon(r) \ll U_c$ находится из уравнения

$$e^{-r/a(\varepsilon)} = r/a(\varepsilon), \quad (15)$$

где $a(\varepsilon) = \hbar/(2m\varepsilon)^{1/2}$. Решение (15) дает

$$\varepsilon(r) = 0.16\hbar^2/mr^2. \quad (16)$$

Если считать, что расположение доноров случайно, то для $g(\varepsilon)$ получаем

$$g(\varepsilon) = 4\pi r^2 \frac{dr}{d\varepsilon} \frac{N^2}{2} = 0.064\pi \frac{\hbar^3 N^2}{m^{3/2} \varepsilon^{3/2}}, \quad (17)$$

где N — концентрация доноров. Медленный степенной спад $g(\varepsilon)$, разумеется, приведет к тому, что двухкомпонентные флуктуации будут целиком определять прозрачность барьера.

Плотность ЛС, создаваемых парами доноров, окажется меньше, чем (17), в том случае, когда необходимо учитывать кулоновское отталкивание двух доноров в процессе приготовления образца [5]. В этом случае

$$g(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{e^2}{2r(\varepsilon)T_0}\right) = \exp\left(-\left(\frac{\varepsilon}{E_0'}\right)^{1/2}\right), \quad (18)$$

где $E_0' = 0.08 T_0^2/E_B$, T_0 — температура, при которой прекращается диффузия доноров в образце ($T_0 \geq 10^3$ K), а $r(\varepsilon)$ определяется формулой (16). Видно, что характерная энергия E_0' может быть значительно больше энергии E_0 , фигурирующей в формуле (13) для плотности ЛС, создаваемых многозарядными скоплениями доноров. В результате даже при использовании (18) отношение (12) может стать меньше единицы, т. е. прозрачность барьера будет определяться двухкомпонентными флуктуациями.

Вывод выражения для коэффициента α . Пусть $N(r)$ — флуктуация концентрации заряженных примесей, создающая изгиб зон U_0 . Вероятность образования такой флуктуации $\exp(-\Omega)$ определяется выражением

$$\Omega = \frac{1}{4N_D} \int d^3r N^2(r). \quad (19)$$

Для расчета проводимости в области флуктуации, осуществляемой туннельными прыжками электронов по ЛС, необходимо учесть, что плотность ЛС g , а также радиус затухания волновых функций λ зависят от положения ЛС на оси флуктуации x . Как показано в *Приложении*, выражение для проводимости в этом случае имеет вид $\sigma = \sigma_0 \exp(-W)$,

$$W = \left[8 \int_0^{x_i} dx \frac{\varphi(x)}{\lambda(x)} \right]^{1/2}, \quad (20)$$

где x_i — длина цепочки (см. рисунок), $\varphi(x) = -\ln(g(x)/g_0)$. Обозначим через $V(x)$ положение дна зоны проводимости на оси флуктуации ($V(0) = 0$). Тогда, как видно из формулы (2),

$$\varphi(x) = \left(\frac{U_0 + V(x)}{E_0} \right)^2, \quad (21)$$

а для $\lambda(x)$ имеем

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 + V(x))}} = a_B \sqrt{\frac{E_B}{U_0 + V(x)}}. \quad (22)$$

Оптимальное распределение концентраций примесей $N(r)$ находится из условия минимума суммы $Q = \Omega + W$. Эту сумму удобно переписать, перейдя в выражениях (19), (20) к безразмерным переменным $r' = r/x_0$, $v = V/U_0$, $n = N/N_0$, где величины x_0 и N_0 определяются формулами (8), (9). Тогда получим $Q = \alpha Q_0$, где α определяется выражением

$$\alpha = \frac{1}{4} \int d^3 r' n^2(r') + 2^{3/2} \left[\int_0^{x'_t} dx' (1 + v(x'))^{v+1/2} \right]^{1/2}, \quad (23)$$

а Q_0 дается формулой (10). Функции $v(x')$ и $n(r')$ связаны уравнением Пуассона

$$\Delta v = 8\pi n, \quad (24)$$

откуда для функции $v(x')$ получаем

$$v(x') = 8\pi \int d^3 r'_1 G(x', r'_1) n(r'_1), \quad (25)$$

где G — функция Грина уравнения Пуассона, удовлетворяющая уравнению

$$\Delta_{r'} G(r', r'_1) = \delta(r' - r'_1) \quad (26)$$

и граничным условиям $G(x'=0) = G(x'=\infty) = 0$. Варьируя функционал (23) по $n(r')$ и используя соотношение (25), получаем

$$n(r') = - \frac{8\sqrt{2}\pi(1+2v)}{\tau} \int_0^{x'_t} dx'_1 G(x'_1, r') (1+v(x'_1))^{v-1/2}, \quad (27)$$

где константа τ определяется выражением

$$\tau = \left[\int_0^{x'_t} dx' (1+v(x'))^{v+1/2} \right]^{1/2}. \quad (28)$$

Соотношение (27) фактически представляет собой уравнение для нахождения безразмерной флуктуационной концентрации примесей $n(r')$, поскольку фигурирующая в правой части функция $v(x')$ связана с $n(r')$ соотношением (25). Замкнутое уравнение для $v(x')$ получается, если подставить (27) в (25),

$$v(x') = - \frac{64\sqrt{2}\pi^2(1+2v)}{\tau} \int_0^{x'_t} dx'' R(x', x'') (1+v(x''))^{v-1/2}, \quad (29)$$

где функция $R(x', x'')$ определяется следующим образом:

$$R(x', x'') = \int d^3 r' G(x', r') G(r', x''). \quad (30)$$

Эта функция рассчитывалась в работе [7], где было показано, что $R(x', x'') = \min\{x', x''\}/4\pi$. Уравнение (29) может быть сведено к дифференциальному последовательным дифференцированием по x' :

$$\frac{dv}{dx'} = - \frac{16\sqrt{2}\pi(1+2v)}{\tau} \int_{x'}^{x'_t} dx'' (1+v(x''))^{v-1/2}, \quad (31)$$

$$\frac{d^2 v}{dx'^2} = \frac{16\sqrt{2}\pi(1+2v)}{\tau} (1+v(x'))^{v-1/2}. \quad (32)$$

Решение уравнения (32), удовлетворяющее граничным условиям $v(0) = 0$, $dv(x'_t)/dx' = 0$ [второе условие следует из (31)], имеет вид

$$v(x') = -1 + \left(\frac{x'_i - x'}{x'_i} \right)^{4/(3-2\nu)}, \quad (33)$$

причем параметры x'_i и τ связаны соотношением

$$x'_i = \tau^{1/2} 2^{3/4} \pi^{1/2} (3 - 2\nu). \quad (34)$$

Подставляя (33), (34) в формулу (28), получаем уравнение для определения τ , решение которого есть

$$\tau = 2^{-3/2} \pi^{-1/2} (\nu + 5/2)^{-2/3}. \quad (35)$$

Интересующая нас величина α дается формулой (23). Для ее нахождения остается вычислить первый интеграл в (23). Домножая обе части соотношения (27) на $n(r')$ и интегрируя по d^3r' , с учетом (25) имеем

$$\int d^3r' n^2(r') = -\frac{\sqrt{2}}{\tau} (1 + 2\nu) \int_0^{x'_i} dx' v(x') (1 + v(x'))^{\nu-1/2} = \frac{2^{1/2} (3 - 2\nu) x'_i}{(5 + 2\nu)\tau}. \quad (36)$$

Подставляя (34), (35) в (36), а (36) в (23), получаем значение α , приведенное в предыдущем разделе.

Приложение

Пусть $p(x)$ — количество ЛС, приходящееся на единицу длины цепочки. Поскольку цепочка представляет собой последовательное соединение сопротивлений, ее полное сопротивление выражается через $p(x)$ следующим образом:

$$R = \frac{1}{\sigma_0} \int_0^{x_l} dx p(x) e^{2/\lambda(x)p(x)}, \quad (\text{П. 1})$$

где $\exp[-2/\lambda(x)p(x)]$ — вероятность туннелирования между двумя соседними ЛС. Если бы плотность ЛС была постоянной и равной g , то вероятность w образования цепочки из P звеньев была бы пропорциональна $g^P \propto \exp(-P\varphi)$. В случае, когда φ зависит от x , для w имеем

$$\ln w = - \int_0^{x_l} dx p(x) \varphi(x). \quad (\text{П. 2})$$

Вклад в проводимость цепочек с заданным распределением ЛС $p(x)$ равен $\exp(-W)$, где

$$W = -\ln w + \ln(R\tau_0). \quad (\text{П. 3})$$

Оптимальное распределение $p(x)$ определяется из условия минимума величины W . Варьируя (П. 3) по $p(x)$, получаем уравнение

$$e^{2/\lambda(x)p(x)} = \frac{\lambda(x)p(x)\varphi(x)}{2} \int_0^{x_l} dx' p(x') e^{2/\lambda(x')p(x')}. \quad (\text{П. 4})$$

Для решения этого уравнения следует учесть, что сопротивления всех звеньев цепочки экспоненциально велики, что соответствует условию $\lambda(x)p(x) \ll 1$. Поэтому уравнение (П. 4) можно решать последовательными приближениями. В результате получаем

$$p(x) = \frac{2}{\lambda(x)[u + \ln(\varphi(x)/u)]}, \quad (\text{П. 5})$$

где величина u определяется выражением

$$u = \left[2 \int_0^{x_f} \frac{dx \varphi(x)}{\lambda(x)} \right]^{1/2} \cdot \quad (\text{П. 6})$$

Подставляя (П. 5) в (П. 1) и (П. 2), легко убедиться в том, что $\ln(Rc_0) = -\ln w = -u$, откуда $W = 2u$, и мы приходим к формуле (20).

Л и т е р а т у р а

- [1] Райх М. Э., Рузин И. М. — ФТП, 1985, т. 19, в. 7, с. 1217—1225.
- [2] Райх М. Э., Рузин И. М. — ФТП, 1987, т. 21, в. 3, с. 456—460.
- [3] Левин Е. И., Рузин И. М., Шкловский Б. И. — ФТП, 1988, т. 22, в. 4, с. 642—653.
- [4] Тартаковский А. В., Фистуль М. В., Райх М. Э., Рузин И. М. — ФТП, 1987, т. 21, в. 4, с. 603—608.
- [5] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., 1979. 416 с.
- [6] Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971. 360 с.
- [7] Гусятников В. Н., Райх М. Э. — ФТП, 1984, т. 18, в. 6, с. 1077—1084.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 4.05.1988
Принята к печати 17.05.1988