

Моделирование гистерезиса структуры металл–сегнетоэлектрик–полупроводник

© Л.С. Берман

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

(Получена 16 июня 2000 г. Принята к печати 21 июня 2000 г.)

Выполнено моделирование гистерезиса зависимости поляризации P от электрического поля E для структуры металл–сегнетоэлектрик–полупроводник применительно к перовскитным материалам. Моделирование основано на анализе экспериментальной петли гистерезиса $P(E)$ для структуры металл–сегнетоэлектрик–металл, которая аппроксимируется гиперболическим тангенсом. Выполнено численное интегрирование уравнения Пуассона с учетом зависимости диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика от электрического поля. Показано, что деполяризующее действие полупроводника уменьшает остаточную поляризацию в несколько раз, причем эффект деполяризации сильнее в случае полупроводника с меньшей концентрацией примеси.

Введение. Постановка задачи

Использование полевых транзисторов (ПТ), изготовленных на основе структур металл–сегнетоэлектрик–полупроводник (МСЭП), было предложено еще в 60-е годы [1–5]; в настоящее время это направление быстро развивается в связи с растущей потребностью в элементах памяти и успехами технологии [6–12].

Одной из принципиальных трудностей создания МСЭП ПТ является деполяризация, т.е. ослабление поляризации в тонких слоях сегнетоэлектрика (СЭ). В полупроводнике заряд, экранирующий поляризацию СЭ, проникает в глубь полупроводника, что приводит к изгибу зон и к появлению поверхностного потенциала ψ_s , а следовательно, и деполяризующего поля E_f в СЭ [13–19]. Уменьшение деполяризации является весьма актуальной задачей, ее решению может помочь моделирование структур МСЭП, позволяющее прогнозировать параметры МСЭП ПТ. В работе [20] выполнено моделирование МСЭП ПТ, причем действие ПТ основано на образовании инверсионного слоя в полупроводнике. Однако сопряжение СЭ с кремнием представляет значительные технологические трудности (см., например, [11,21]).

В настоящее время при разработке МСЭП ПТ используются главным образом перовскитные полупроводники, технологически совместимые с СЭ [9–11,22,23]. В этих ПТ проводимость канала модулируется без образования инверсионного слоя в полупроводнике [9,10]. В работах [16–19] выполнено моделирование структур МСЭП и структур металл–сегнетоэлектрик–диэлектрик–полупроводник и вычислены их устойчивые состояния равновесия по минимуму зависимости $F(P)$, где F — свободная энергия, P — поляризация. Однако зависимости $F(P)$, используемые в этих работах, были разработаны для монодоменного СЭ [24,25], в то время как реальные СЭ (как керамика, так и пленки) являются, как правило, многодоменными поликристаллами.

В настоящей работе моделирование основано на анализе экспериментальной петли гистерезиса зависимости $P(E)$, где E — электрическое поле, для структуры металл–сегнетоэлектрик–металл (МСЭМ), т.е. на достоверной информации. Эта петля аппроксимируется гиперболическим тангенсом. Далее выполняется интегрирование уравнения Пуассона для структуры МСЭП, из которого определяются ее основные характеристики: зависимости величин ψ_s , Q_s , E_s , V_f и P от внешнего напряжения V (здесь ψ_s — потенциал поверхности полупроводника, Q_s — заряд в полупроводнике, E_s — электрическое поле на поверхности полупроводника, V_f — падение напряжения на сегнетоэлектрике). Принимается, что контакт к СЭ образует барьер Шоттки, контакт к полупроводнику — омический, а также что как СЭ, так и полупроводник легированы мелкими акцепторами. Принимается также, что ток через структуру МСЭП мал и не изменяет поляризации.

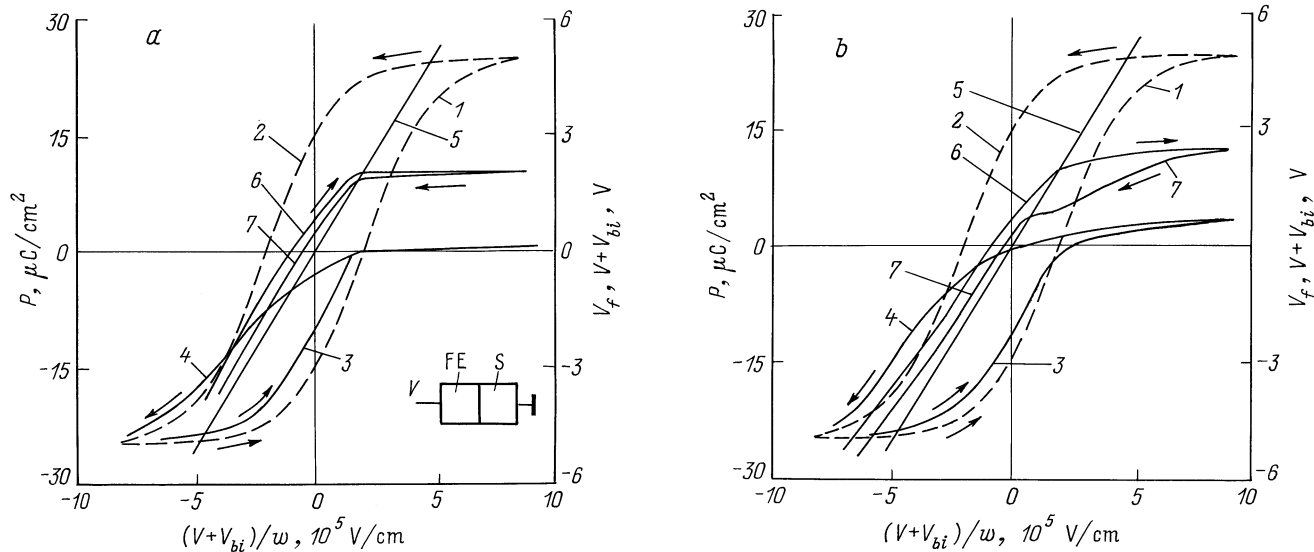
Основные уравнения

Для полупроводника решение уравнения Пуассона, а также формулы для E_s , Q_s и ψ_s хорошо известны (см., например, [26,27]) и поэтому здесь не приводятся. Заметим, что для вычисления концентрации электронов и (или) дырок использовались при обеднении статистика Больцмана, а при обогащении — статистика Ферми–Дирака.

Для СЭ уравнение Пуассона принимает вид (см., например, [28])

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{(\epsilon_0 + \frac{\partial P}{\partial E})}, \quad (1)$$

где ψ — потенциал, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, ρ — плотность объемного заряда.



Петли гистерезиса структур металл–сегнетоэлектрик–металл (МСЭМ) и металл–сегнетоэлектрик–полупроводник (МСЭП). Концентрация мелких акцепторов в полупроводнике $N_s, \text{см}^{-3}$: $a - 10^{15}$, $b - 10^{19}$; остальные параметры одинаковые, толщина сегнетоэлектрика $w = 0.1$ мкм, концентрация мелких акцепторов в сегнетоэлектрике $N_f = 10^{18} \text{см}^{-3}$, $\epsilon_s = 10$, $P_s = 25$ мкКл/см², $P_f = 15$ мкКл/см², $E_c = 2 \cdot 10^5$ В/см. 1, 2 — восходящая и нисходящая ветви петли гистерезиса структуры МСЭМ; 3, 4 — восходящая и нисходящая ветви петли гистерезиса структуры МСЭП; 5 — $V + V_{bi}$, 6 и 7 — V_f для восходящей и нисходящей ветвей соответственно. На вставке — структура МСЭП: FE — сегнетоэлектрик, S — полупроводник, V — напряжение, приложенное к структуре.

На границе раздела СЭ–полупроводник выполняется соотношение

$$\epsilon_0 \epsilon_s E_s + Q_{ss} = \epsilon_0 E_f + P. \quad (2)$$

Здесь ϵ_s — относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, Q_{ss} — заряд поверхностных состояний, E_f — электрическое поле в сегнетоэлектрике.

Зависимость поляризации от электрического поля $P(E)$ при различных начальных условиях аппроксимировалась формулами (19)–(23) из работы [29] и формулами (1)–(3) из работы [30]. Распределение электрического поля и потенциала в СЭ определялось численным интегрированием уравнения Пуассона. Расчеты были выполнены для структуры металл–(сегнетоэлектрик p -типа)–(полупроводник p -типа) при возрастании напряжения от значения, соответствующего $-P_s$ (обогащение поверхности полупроводника, P_s — спонтанная поляризация), до значений, соответствующих обеднению поверхности полупроводника, а также при обратном ходе напряжения.

Были приняты следующие значения параметров.

а) Для СЭ: спонтанная поляризация $P_s = 25$ мкКл/см², остаточная поляризация $P_f = 15$ мкКл/см², коэрцитивное поле $E_c = 2 \cdot 10^5$ В/см, концентрация мелких акцепторов $N_f = 10^{18} \text{см}^{-3}$, толщина — 0.1 мкм.

б) Для полупроводника: относительная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_s = 10$, концентрация мелких акцепторов $N_s = 10^{15} \text{см}^{-3}$ и 10^{19}см^{-3} , заряд поверхностных состояний $Q_{ss} = 0$.

Результаты расчетов и их обсуждение

Основные результаты расчетов приведены на рисунке, a, b ; там же для сравнения приведена насыщенная петля гистерезиса (от $-P_s$ до P_s и обратно) для структуры МСЭМ с таким же СЭ, но при отсутствии примесей в СЭ ($N_f = 0$) — линии 1 и 2. На рисунке V_{bi} — контактная разность потенциалов между контактом к сегнетоэлектрику и полупроводником. Потенциал поверхности полупроводника ψ_s вычисляется как разность между зависимостями 5 ($V + V_{bi}$) и 6 (V_f для восходящей ветви) или зависимостями 5 и 7 (V_f для нисходящей ветви).

При обогащении поверхности полупроводника ($\psi_s < 0$) ее свойства приближаются к свойствам металла, поэтому восходящие ветви структур МСЭМ и МСЭП близки (линии 1 и 3 соответственно). Значения электрического поля на поверхности полупроводника E_s могут достигать нескольких единиц 10^7 В/см, однако такие сильные поля существуют лишь в очень тонком слое (порядка нескольких Å), что исключает возможность лавинного пробоя. Переход от обогащения поверхности полупроводника к ее обеднению происходит при $E \approx E_c$ (точка пересечений линий 5 и 6), где E_c — коэрцитивное поле.

При обеднении поверхности полупроводника ($\psi_s > 0$) возрастание напряжения V приводит к увеличению падения напряжения на полупроводнике ψ_s (разность между линиями 5 и 6); напряжение на СЭ V_f (а следовательно, и его поляризация) изменяется мало. Эта закономерность выражена более четко для полупроводников с

меньшей концентрацией примеси (ср. ход линий b на рисунке a и b). При $N_s = 10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и напряжении в несколько вольт значения поля на поверхности полупроводника E_s могут достигать нескольких единиц 10^6 В/см , т.е. в несколько раз превышать электрическое поле в кремнии при пробое [27]. Однако подвижность носителей тока в перовскитных полупроводниках много меньше, чем в кремнии. Поэтому есть основание предположить, что в перовскитных полупроводниках электроны (или дырки) на длине свободного пробега не приобретут энергии, достаточной для ударной ионизации.

Сравнение значений остаточной поляризации $-P_r$ и P_r на восходящей и нисходящей ветвях насыщенной петли гистерезиса структуры МСЭМ с соответствующими значениями остаточной поляризации структуры МСЭП показывает, что деполяризация под действием полупроводника существенно (в 2–3 раза) уменьшает остаточную поляризацию.

Петля гистерезиса структуры МСЭП, полученная в настоящей работе, качественно сходна с темновой экспериментальной петлей гистерезиса структуры $\text{Au}-(\text{triglycine sulfate})-p\text{-Si}$ из работы [17], что подтверждает правильность нашего метода моделирования. Однако наши результаты несколько отличаются от расчетной зависимости $P(E)$ из работы [16], в частности, на расчетных зависимостях $P(E)$ [16] имеют место скачкообразные изменения деполяризации при некоторых значениях поля. Это различие объясняется различными методами моделирования (см. выше).

Заключение

Выполнено моделирование гистерезиса структуры металл–сегнетоэлектрик–полупроводник, основанное на анализе экспериментальной петли гистерезиса структуры металл–сегнетоэлектрик–металл. Показано, что деполяризующее действие полупроводника уменьшает остаточную поляризацию в несколько раз, причем эффект деполяризации сильнее в случае полупроводника с меньшей концентрацией примеси.

Автор выражает признательность И.В. Грехову за постановку задачи и дискуссию по теме.

Список литературы

- [1] J. Moll, Y. Tarui. IEEE Trans. Electron. Dev., **ED-10**, 338 (1963).
- [2] R. Zuleeg, H.H. Wider. Sol. St. Electron., **9**, 657 (1966).
- [3] S.Y. Wu. IEEE Trans. Electron. Dev., **ED-21**, 499 (1974).
- [4] K. Sugibuchi, Y. Kurogi, N. Endo. J. Appl. Phys., **46**, 2877 (1975).
- [5] S.Y. Wu. Ferroelectrics, **11**, 379 (1976).
- [6] Y. Higuma, Y. Matsui, M. Okuyama, Y. Nakagawa, Y. Hamakagava. Japan. J. Appl. Phys., **17**, Suppl. 17-1, 209 (1978).
- [7] J.F. Scott, D.A. Araujo. Science, **246**, 1400 (1989).
- [8] J.T. Evans, R. Womack. IEEE J. Sol. St. Circuits, **23**, 1171 (1988).
- [9] Y. Watanabe. Appl. Phys. Lett., **66**, 1770 (1995).
- [10] Y. Watanabe, M. Tanamura, Y. Matsumoto. Japan. J. Appl. Phys., **35**, Pt 1, 1564 (1996).
- [11] Y. Watanabe. Phys. Rev. B, **59**, 11 257 (1999).
- [12] Y. Watanabe, M. Tanamura, Y. Matsumoto, H. Asami. Appl. Phys. Lett., **66**, 299 (1995).
- [13] Б.М. Вул, Г.М. Гуро, И.И. Иванчик. ФТП, **4**, 162 (1970).
- [14] Б.В. Сандомирский, Ш.С. Хохлов, Е.В. Ченский. ФТП, **16**, 440 (1982).
- [15] R.R. Mehta, B.D. Silverman, J.T. Jacobs. J. Appl. Phys., **44**, 3379 (1973).
- [16] I.P. Batra, P. Wurfel. Phys. Rev. B, **8**, 3257 (1973).
- [17] P. Wurfel, I.P. Batra. Phys. Rev. B, **8**, 5126 (1973).
- [18] Y. Watanabe. J. Appl. Phys., **83**, 2179 (1988).
- [19] Y. Watanabe. Phys. Rev. B, **57**, 789 (1998).
- [20] S.L. Miller, P.J. Mc Whorter. J. Appl. Phys., **72**, 5999 (1992).
- [21] E. Tokumitsu, K. Itani, B.-K. Moon, H. Ishiwara. Japan. J. Appl. Phys., **34**, Pt 1, 5202 (1995).
- [22] Y. Watanabe, Y. Matsumoto, M. Tanamura. Japan. J. Appl. Phys., **34**, Pt 1. 5254 (1995).
- [23] Y. Watanabe. Appl. Phys. Lett., **66**, 28 (1995).
- [24] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика* (М., Наука, 1995) ч. 1.
- [25] В.М. Фридкин. *Фотосегнетоэлектрики* (М., Наука, 1979).
- [26] И.Е. Тамм. *Основы теории электричества* (М., Наука, 1989).
- [27] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1981) т. 1.
- [28] P.W.M. Bloom, R.M. Wolf, J.F.M. Cilessen, M.P.C.M. Krijn. Phys. Rev. Lett., **73**, 2107 (1994).
- [29] S.L. Miller, J.R. Schwank, R.D. Nasby, M.S. Rodgers. J. Appl. Phys., **68**, 6463 (1990).
- [30] S.L. Miller, J.R. Schwank, R.D. Nasby, M.S. Rodgers. J. Appl. Phys., **70**, 2849 (1991).

Редактор Т.А. Полянская

Hysteresis modelling of a metal–ferroelectric–semiconductor structure

L.S. Berman

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

Abstract Hysteresis loop of the polarization dependence on the electric field of a metal–ferroelectric–semiconductor structure has been modeled in application to perovskite materials. Modelling is based on the analysis of experimental hysteresis loop of the metal–ferroelectric–metal structures, which is approximated by the hyperbolic tangent. Poisson’s equation is integrated numerically, taking into account the dependence of ferroelectric permittivity on electric field. We conclude that the depolarisation field due to the semiconductor reduces the remanent polarisation by several times. The depolarisation is stronger in semiconductors with a low concentration of impurities.