

Зависимость проводимости от толщины активной области в тонкопленочных диодах Шоттки на GaAs

© С.А. Зуев, Г.В. Килесса, Э.Э. Асанов, В.В. Старостенко, С.В. Покрова

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского,
295007 Симферополь, Россия

E-mail: sazuev@yandex.ru

(Получена 10 ноября 2015 г. Принята к печати 10 ноября 2015 г.)

Исследовались зависимости электрических характеристик тонкопленочных структур с барьером Шоттки на арсениде галлия. Исследования проводились с помощью численного моделирования методом Монте–Карло в кинетическом приближении с учетом основных механизмов рассеяния. Получены зависимости проводимости диода от напряжения и от толщины канала. Показано, что при малой толщине канала происходит изменение характера зависимости между напряжением и проводимостью диода, что объясняется вытеснением поля барьера в подложку.

1. Введение

Начиная со времени развития полупроводниковой электроники, изучению омических контактов и барьеров Шоттки уделялось не меньшее внимание, чем совершенствованию либо получению новых полупроводниковых материалов и структур [1–4]. Это обусловлено многообразием явлений в контактах и на границах раздела фаз, сложностью их расчетов и однозначной интерпретации.

Данное внимание не ослабевает и в настоящее время, в особенности с тенденцией к уменьшению размеров активных областей: поскольку современные полупроводниковые приборы изготавливаются преимущественно по планарной технологии, их активные области представляют собой тонкие легированные пленки, проводимость которых может меняться даже при незначительных внешних полях.

Особенный интерес представляет исследование проводимости тонкопленочной диодной структуры с барьером Шоттки, поскольку поле барьера в области полупроводника распространяется на расстояния, сравнимые с толщиной пленок современных приборов.

Цель работы состояла в изучении зависимости электрических характеристик структур с барьером Шоттки на основе арсенида галлия от геометрии контакта, уровней и профилей легирования методом моделирования на основе разработанных моделей, описанных в работах [5,6].

2. Методика моделирования

Теория и модели классических контактов для GaAs в обычных режимах достаточно хорошо разработаны, однако в связи с непрерывным стремлением к увеличению быстродействия приборов в силу вступают эффекты, требующие дополнительного рассмотрения.

Традиционно используемые классические методы моделирования не позволяют осуществлять исследование контактов в напряженных режимах работы. Для описания процессов, в том числе пробоя, в короткоканальных

приборах необходимо исследовать специфику рассеяния и разогрева носителей заряда в арсениде галлия, возможность перехода прибора в баллистический режим переноса зарядов, напряженные токовые и тепловые условия работы, что является актуальным для развития существующих моделей.

При моделировании короткоканальных приборов целесообразно использовать кинетическое приближение, в рамках которого процессы токопереноса в кристалле описываются с учетом рассеяний и сложной зонной структуры арсенида галлия. Для учета процессов теплопереноса данная система дополняется уравнением теплопроводности, связанным через источники тепловыделения с уравнением Больцмана.

При таком подходе транспорт электронов описывается уравнением Больцмана, которое записывается в следующем виде:

$$\partial f_i / \partial t + (\mathbf{v}_i \nabla_r f_i) + 1/\hbar (\mathbf{F}_i \nabla_k f_i) = (\partial f_i / \partial t)_s,$$

где f_i — функция распределения носителя заряда, i — его тип, \mathbf{v}_i — скорость его движения и \mathbf{F}_i — сила, действующая на носитель заряда со стороны электрических полей в приборе, $(\partial f_i / \partial t)_s$ — интегралы столкновений, описывающие взаимодействие носителей заряда с решеткой и друг с другом.

Сила \mathbf{F}_i , действующая на частицы, определялась методом СИС из распределения в приборе внешнего и внутреннего электрического поля, которое находилось из уравнения Пуассона:

$$\Delta \varphi = 4\pi e / \epsilon \epsilon_0 \left[\sum_i \int f_i d\mathbf{k} - N \right],$$

где N — концентрация ионов примеси в активной области прибора, ϵ — диэлектрическая проницаемость кристалла.

Обмен энергией между газом свободных носителей заряда и кристаллической решеткой учитывался через

уравнение теплопроводности:

$$c\rho \partial T/\partial t = \partial/\partial x[K(T)\partial T/\partial x] + \partial/\partial y[K(T)\partial T/\partial y] + q(x, y, t),$$

где c — удельная теплоемкость кристалла полупроводника, ρ — его плотность, $K(T)$ — коэффициент теплопроводности, $q(x, y, t)$ — плотность источников тепловыделения, роль которых играет фононный обмен с электронным газом.

Функция распределения свободных носителей в координатном и импульсном пространствах представляется ансамблем макрочастиц. Отношение заряда к массе соответствует такому же отношению для электрона проводимости. Поведение ансамбля макрочастиц с достаточной точностью описывает поведение реальных частиц [7].

Интеграл столкновений в уравнении Больцмана представлялся вероятностями рассеяния:

$$(\partial f_i/\partial t)_s = \sum \int \left\{ W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f(\mathbf{k}) \right\} \times \delta(E_{k'} - E_k)dk',$$

где суммирование проводится по всем типам столкновений; $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ — вероятность перехода носителя из состояния с квазиимпульсом \mathbf{k} в состояние с \mathbf{k}' . Вероятность перехода связана со временем между актами рассеяния на одинаковых центрах формулой $1/\tau_s(\mathbf{k}) = W_s(\mathbf{k})$, плотность вероятности рассеяния свободного электрона определялась как

$$p(\tau) = \lambda[k(\tau)] \exp\left\{-\int_0^\tau \lambda[k(t)]dt\right\},$$

где $\lambda[k(t)] = \sum_s W_s(k) = \Gamma(k)$ — сумма частот всех действующих механизмов рассеяния. При этом предполагалось, что импульс макрочастицы менялся в соответствии с гамильтонианом рассеяния. Применительно к структуре на GaAs рассмотрены следующие механизмы рассеяния: упругие рассеяния на дефектах решетки (точечные дефекты, дислокации, ионизированные и неионизированные примеси), рассеяние частица–частица, неупругие рассеяния на фононах (акустических полярных и деформационных, оптических полярных и деформационных) и неупругие рассеяния на фононах с междолинными ($\Gamma \rightarrow L$, $\Gamma \rightarrow X$, $L \rightarrow X$ и обратно) и внутримолиновыми ($L \rightarrow L$, $X \rightarrow X$) переходами.

Уравнение Больцмана решается методом крупных частиц, при этом правая часть уравнения учитывается с помощью метода Монте-Карло путем выбора и реализации механизмов рассеяния в соответствии с их плотностью вероятности, отсюда и происходит общее название метода решения уравнений модели — метод Монте-Карло [7,8]. Уравнения Пуассона и теплопроводности решаются на пространственной сетке в конечных разностях с половинным перешагиванием по времени.

Используемые в модели уравнения описывают в общем случае произвольные полупроводниковые структуры (ППС). Electroды определяют граничные условия и конкретизируют прибор. В рамках кинетического приближения уравнение Больцмана не позволяет описать с достаточной точностью явления переноса зарядов через контакты. Процессы переноса носителей через контакт металл–полупроводник, включая барьер Шоттки, описываются методом макрочастиц в рамках модели ППС и могут уточняться, используя экспериментально полученные вольт-амперные характеристики (ВАХ) реальных контактов.

Моделирование проводится для активной области. В качестве начальных условий для носителей зарядов задается равномерное распределение концентрации носителей в активной области прибора и максвелловское распределение по скоростям вблизи температуры кристаллической решетки. На каждом временном шаге решаются последовательно уравнения Пуассона, Больцмана, после чего — уравнение теплопроводности с источниками, характеристики которых определяются фононным обменом энергией между газом свободных электронов и кристаллической решеткой, моделируется эмиссия электронов с электродов и обрабатываются результаты данного временного шага. Начальная функция распределения не является истинной.

На первом этапе моделирования за время, необходимое для формирования барьеров, выравнивания диффузионных и дрейфовых токов и установления условия термодинамического равновесия, восстанавливается истинная функция распределения носителей, характерная для данной геометрии. Когда равновесие установилось, на электроды подается напряжение и идет процесс моделирования токовых режимов.

В результате моделирования находится общая функция распределения носителей в активной области прибора $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$. Она позволяет определить все необходимые физические и схемотехнические параметры, такие как плотность электронов проводимости $n(\mathbf{r}, t)$, плотность токов $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, плотность $K(\mathbf{r}, t)$ и поток $\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t)$ кинетической энергии:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3v f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int d^3v \mathbf{v} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t),$$

$$K(\mathbf{r}, t) = m/2 \int d^3v \mathbf{v}^2 f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) = m/2 \int d^3v \mathbf{v}^2 \mathbf{v} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t).$$

Как известно, контакт металл–полупроводник может быть выпрямляющим, если барьер Шоттки туннельно непрозрачен, или же омическим, если барьер туннельно прозрачен или отсутствует. В первом случае глубина

проникновения поля барьера в глубь полупроводника определяется следующим соотношением [1,9]:

$$L = \sqrt{2\varepsilon\varepsilon_0/en(\varphi - k_B T/e)},$$

где φ — величина барьера, n — концентрация свободных носителей заряда в приконтактной области. Для арсенида галлия при барьере $\varphi = 0.5$ В, $n = 10^{22}$ м⁻³ и температуре 300 К глубина проникновения поля составляет 270 нм. Туннелированием через барьер такой толщины можно пренебречь. Для сравнения, толщина барьера на омическом контакте с сильно легированной приконтактной областью ($n = 5 \cdot 10^{23}$ м⁻³) снижается до 40 нм.

Для моделирования инжекции электронов из металла в полупроводник в рамках представленной модели рассчитывается количество и распределение по энергиям электронов в приконтактной области металла, способных за временной шаг модели пересечь границу материалов:

$$n(E) = dN/dE = n_0 S f(E) D(E) v(E) \Delta t,$$

где S — площадь контакта, $f(E)$ — функция распределения Ферми-Дирака, $v(E)$ — скорость электронов, $D(E)$ — коэффициент прохождения электрона через барьер на границе материалов. При этом электроны металла должны попадать в зону проводимости полупроводника: $E > E_C$. Отсюда количество инжектируемых электронов равно

$$N = \int_{E_C}^{\infty} n(E) dE.$$

В случае барьера Шоттки $E_F < E_C$, поэтому ток инжекции электронов из металла в полупроводник пренебрежимо мал по сравнению с током электронов из полупроводника в металл.

Для моделирования перехода электрона через границу материалов была решена квантово-механическая задача туннелирования электрона через П-образный потенциальный барьер [1], в результате чего был получен коэффициент прохождения электрона D при различных энергиях E . Данный коэффициент прохождения использовался в начальный момент времени в условиях, когда истинная функция распределения носителей еще не сформировалась и поля еще не установились.

На рис. 1 приведен результат расчета коэффициента туннелирования при прохождении электрона через границу GaAs (электрическое сродство $\chi = 4.07$ эВ) и Au (уровень Ферми $\Phi_M = 4.58$ эВ, E_F — 7.61 эВ) для различных значений обратного смещения барьера.

Как следует из рис. 1, с увеличением энергии электрона, налетающего на границу перехода металла и полупроводника, вероятность прохождения приближается к единице. Таким образом, через контакт проходят преимущественно высокоэнергетические электроны.

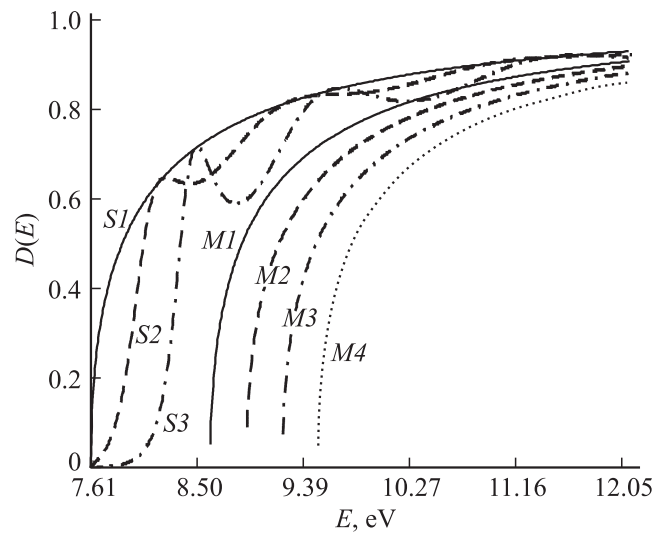


Рис. 1. Зависимость коэффициента прохождения D от энергии (относительно низшего энергетического уровня в металле) частицы, проходящей через границу GaAs и Au. Кривые $M1-M4$ — инжекция из металла в полупроводник, $S1-S3$ — из GaAs в Au. $M1$ — 0 В, $M2$ — 0.3 В, $M3$ — 0.6 В, $M4$ — 0.9 В; $S1$ — 0 В, $S2$ — 0.2 В, $S3$ — 0.5 В.

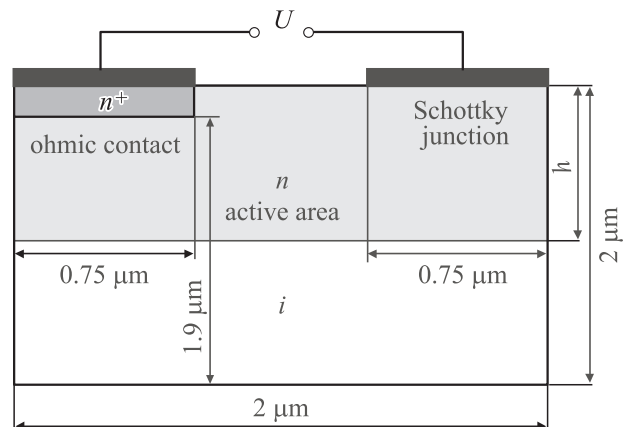


Рис. 2. Геометрия моделируемой структуры.

Попадание частицы на потенциальный барьер происходит при эмиссии электронов из металла, либо при их переходе из полупроводника в металл. В обоих случаях происходит определение коэффициента прохождения $D(E)$, затем по равновероятностному распределению генерируется случайное число $r \in (0, 1]$, и при выполнении условия $D(E) \leq r$ считается, что макрочастица прошла через барьер.

При расчете перехода через барьер эмиссионных электронов из металла те макрочастицы, которые преодолели барьер, появляются в полупроводниковой структуре с энергией $E = E_0 - E_n$, где E_0 — начальная энергия частицы (энергия, с которой частица налетает на барьер), получаемая из распределения Больцмана, E_n — энергия, затрачиваемая на преодоление поля в барьере.

Параметры моделируемой структуры и параметры модели

Количество макрочастиц	40000
Коэффициент укрупнения	10
Временной шаг dt (с)	10^{-15}
Продолжительность моделирования (с)	$3 \cdot 10^{-11}$
Количество узлов в сетке	100×65
Слой dz (м)	10^{-6}
Концентрация области n (м^{-3})	10^{22}
Концентрация области n^+ (м^{-3})	$5 \cdot 10^{23}$
Высота барьера Шоттки ϕ (В)	0.51
Глубина проникновения поля l (нм)	270

Вычислительный эксперимент представлял собой серию циклов симуляции работы прибора. Моделирование проводилось для планарной структуры с параметрами, представленными в таблице, и геометрией, приведенной на рис. 2. Толщина активной области варьировалась в пределах 0.1–2.0 мкм, напряжение — в пределах 0–2 В.

3. Результаты моделирования

В ходе проделанных вычислительных экспериментов из функций распределения активных носителей получен массив установившихся значений силы тока при различном напряжении и толщине канала. На основании этих данных построено семейство ВАХ диода с различной толщиной активной области (рис. 3).

Полученные характеристики свидетельствуют о том, что с уменьшением толщины активного слоя h , ВАХ смещается в сторону меньших токов. При этом напряжение активации диода U_a остается неизменным, равным ~ 0.4 В. Разность между величиной потенциального барьера $\phi = 0.5$ В и U_a объясняется наличием средней кинетической энергии электронной плазмы, равной ~ 0.1 В.

Для более детального рассмотрения была построена зависимость проводимости диода от внешнего напряжения.

Проводимость диода (рис. 4) при $U \leq U_a$ практически равна нулю, барьер Шоттки закрыт. В некотором диапазоне напряжений проводимость практически не зависит от напряжения $U_a < U < U_{cr}$ — данный промежуток соответствует линейному участку ВАХ. Дальнейший рост напряжения сопровождается снижением проводимости. Это объясняется связью между проводимостью и подвижностью носителей заряда, при $U_{cr} \approx 1$ В электрическое поле достигает значения, достаточного для перехода электронов Γ -долины GaAs в высшие энергетические долины, что приводит к уменьшению их подвижности.

На рис. 5 представлена зависимость проводимости активной области диода от толщины пленки.

При сравнительно большой толщине канала $h \gg l$ удельная проводимость мало зависит от h , что естественно, так как весь поток электронов течет внутри

канала и ток определяется только напряжением. По мере уменьшения толщины пленки начинает проявляться зависимость проводимости от толщины, поскольку ток ограничивается сечением канала.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что при $h > l$ большим значениям напряжения соответствуют меньшие значения проводимости, в то время как при $h < l$ картина противоположная. Это может быть объяснено тем фактом, что при малой толщине активной области происходит вытеснение поля за область активного слоя. Другими словами, толщины n -области

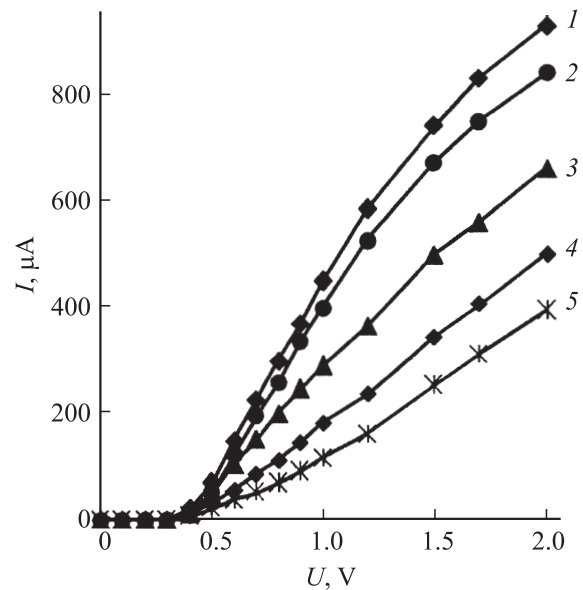


Рис. 3. ВАХ диода Шоттки при толщине активной области, мкм: 1 — 1.5, 2 — 1, 3 — 0.5, 4 — 0.2, 5 — 0.05.

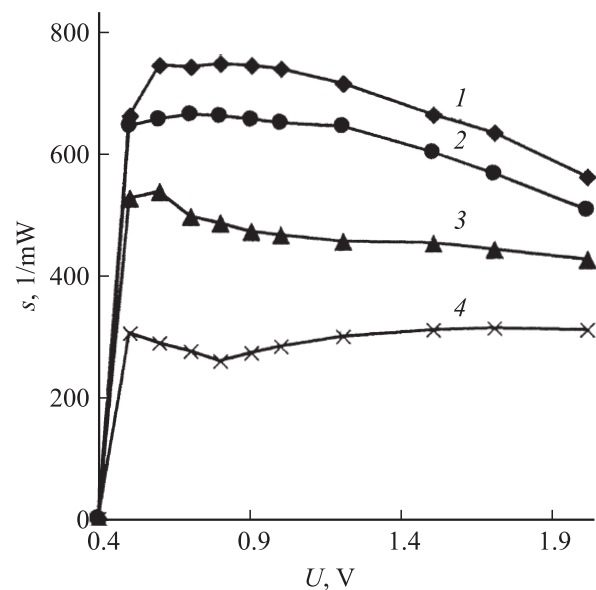


Рис. 4. Зависимость проводимости диода от напряжения при различной толщине активной области, мкм: 1 — 1.5, 2 — 1, 3 — 0.5, 4 — 0.2.

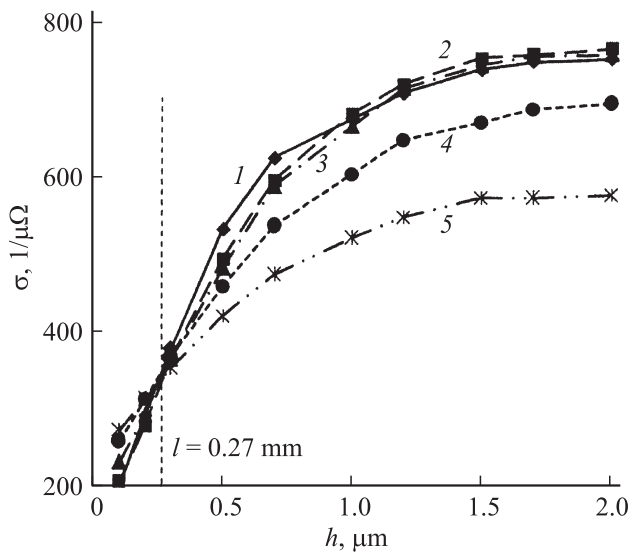


Рис. 5. Зависимость удельной проводимости диода от толщины активной области при различных напряжениях, В: 1 — 2, 2 — 1.5, 3 — 1, 4 — 0.8, 5 — 0.6.

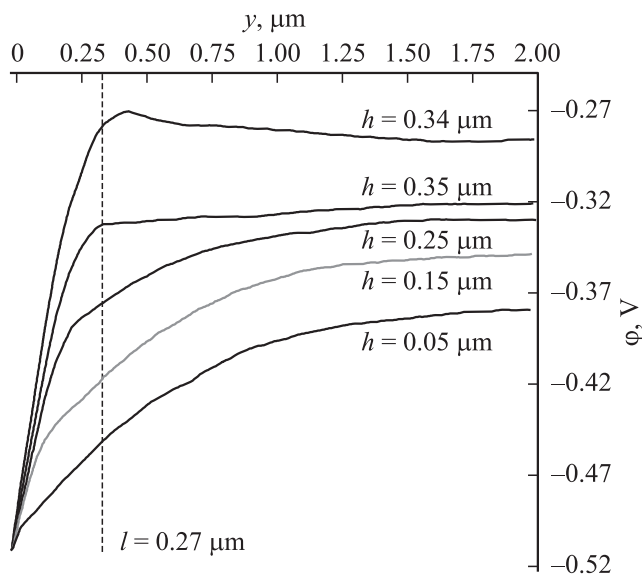


Рис. 6. Распределение потенциала под барьером Шоттки.

недостаточно для экранирования поля, что приводит к „расплыванию“ потенциала и проникновению поля в подложку. В результате этого падение напряжения в активной области уменьшается, что, в свою очередь, снижает вероятность перехода электронов Г-долины в высшие долины.

Для проверки этого предположения были изучены распределения потенциала под барьером Шоттки при различной толщине активной области (рис. 6).

Как видно из рис. 6, если толщина пленки оказывается меньше глубины проникновения поля (порядка 0.27 мкм), поле вытесняется в подложку и барьер не работает в полной мере, что и сказывается на ВАХ.

4. Заключение

Проводимость полупроводниковой структуры с барьером Шоттки при малой толщине канала h зависит от h и U , с увеличением напряжения проводимость падает.

При $h < 0.27$ мкм поле барьера вытесняется в подложку и характер зависимости проводимости канала меняется — с увеличением напряжения проводимость растет.

Список литературы

- [1] В.И. Стриха. *Теоретические основы работы контакта металл–полупроводник* (Киев, Наук. думка, 1974).
- [2] А.П. Вяткин, Н.К. Максимова, Н.Г. Филонов. *Вестн. Томск. гос. ун-та*, **285**, 121 (2005).
- [3] А.В. Вишняков, М.Д. Ефремов. *ФТП*, **44** (9), 1290 (2010).
- [4] А.В. Саченко, А.Е. Беляев, Н.С. Болговец, Р.В. Конакова, Л.М. Капитанчук, В.Н. Шеремет, Ю.Н. Свешников, А.С. Пилпчук. *ФТП*, **48** (10), 1344 (2014).
- [5] E.E. Asanov, S.A. Zuev, G.V. Kilessa, M.I. Slipchenko. *TelecomRadEng.*, **72** (17), 1575 (2013).
- [6] G.V. Kilessa, E.E. Asanov, S.A. Zuev, V.V. Starostenko, M.I. Slipchenko. *TelecomRadEng.*, **73** (14), 1273 (2014).
- [7] Р. Хокни, Д. Иствуд. *Численное моделирование методом частиц* (М., Мир, 1987).
- [8] G.U. Jensen, B. Lund, T.A. Fjeldly, M. Shur. *Comput. Phys. Commun.*, **67**, 1 (1991).
- [9] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984) т. 1.

Редактор А.Н. Смирнов

The conductivity dependence of the thin film thickness in an active region of a GaAs Schottky diodes

S.A. Zuev, G.V. Kilessa, E.E. Asanov, V.V. Starostenko, S.V. Pokrova

V.I. Vernadsky Crimean Federal University, 295007 Simferopol, Russia

Abstract The dependence of the electrical characteristics of thin-film structures with Schottky barrier on gallium arsenide was investigated. The studies were conducted by numerical simulation using the Monte Carlo method in the kinetic approximation with the main scattering mechanisms. The dependences of the conductivity of the diode voltage and the thickness of the channel were obtained. It is shown that for small thickness of the channel changes the nature of the relationship between voltage and conductance of the diode, which is explained by the displacement field in the barrier substrate.