

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ КОНТАКТА МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК

Моделирование работы субмикронных полупроводниковых приборов (в частности, полевых транзисторов с затвором Шоттки [1, 2]) – актуальная и нетривиальная задача. Достоверность описания контактов особенно актуальна для короткоканальных приборов, характеристики которых в значительной степени определяются свойствами контактов. Неотъемлемой частью моделирования полупроводниковых структур является построение численных моделей контактов металл-полупроводник (КМП). Обычно в численной модели прибора контакт учитывается с помощью аналитических или эмпирических соотношений, которые не учитывают всех его особенностей и не позволяют исследовать физические процессы, происходящие на контакте.

Для анализа свойств и характеристик контактов необходима модель, учитывающая токовые процессы в контакте металл-полупроводник и прохождение носителей заряда через потенциальный барьер контакта. Общий ток через контакт металл-полупроводник описывается двумя составляющими: током из полупроводника в металл и током из металла в полупроводник. Эти явления, происходящие с разных сторон барьера, можно рассматривать раздельно.

В общем случае переход электрона из полупроводника в металл описывается с помощью уравнения Больцмана. В рамках макрочастичного подхода [1] по уравнениям движения отслеживается траектория перемещения макрочастицы. При попадании на контакт макрочастица остается в полупроводнике или может уйти в металл, если потенциальный барьер либо отсутствует (антизапорный слой), либо очень узок (тонкий запирающий слой) и электроны могут сквозь него туннелировать. Такой КМП характеризуется коэффициентом прохождения носителей со стороны полупроводника. Обратный случай попадания электронов из металла в полупроводник зависит от разности работ выхода, следовательно, высоты барьера КМП и не может быть описан в рамках уравнения Больцмана. Для учета данного случая предлагается рассчитывать количество электронов, которые должны эмитировать с единицы площади контакта, и на каждом временном шаге проводить «впрыскивание» электронов в приконтактную область полупроводника.

Цель работы – создание и эксплуатация численной модели омического контакта металл-полупроводник и контакта с барьером Шоттки с использованием метода крупных частиц.

1. Теоретическая часть

Свойства контактов металл-полупроводник в первом приближении определяются разностью между работой выхода металла \hat{O}_j и электронным сродством полупроводника χ . Контакты металл-полупроводник делятся на два типа: омический контакт с линейной или близкой к ней зависимостью тока от напряжения и контакт с барьером Шоттки, обладающий выпрямляющими свойствами [3]. Омические контакты являются одним из основных элементов любого полупроводникового прибора. Основное требование, предъявляемое к омическим контактам, заключается в том, что они не должны влиять на работу транзистора. Вольт-амперная характеристика омического контакта должна быть близка к линейной, а сам контакт не должен вносить заметного дополнительного сопротивления. В качестве дополнительного требования выдвигается требование малости шума контакта.

Энергетические диаграммы контактов металл-полупроводник n -типа с зазором шириной δ приведены на рис.1. На рис.1, *a* приведена диаграмма омического контакта, на рис.1, *б* – барьера Шоттки в контакте металла с полупроводником n -типа. Обозначения на рис.1: E_0 – уровень вакуума, \hat{O}_j – работа выхода из металл, E_{fm} – уровень Ферми в металле, E_{j0} –

низший энергетический уровень в металле, χ – электронное сродство полупроводника, E_C – уровень дна зоны проводимости.

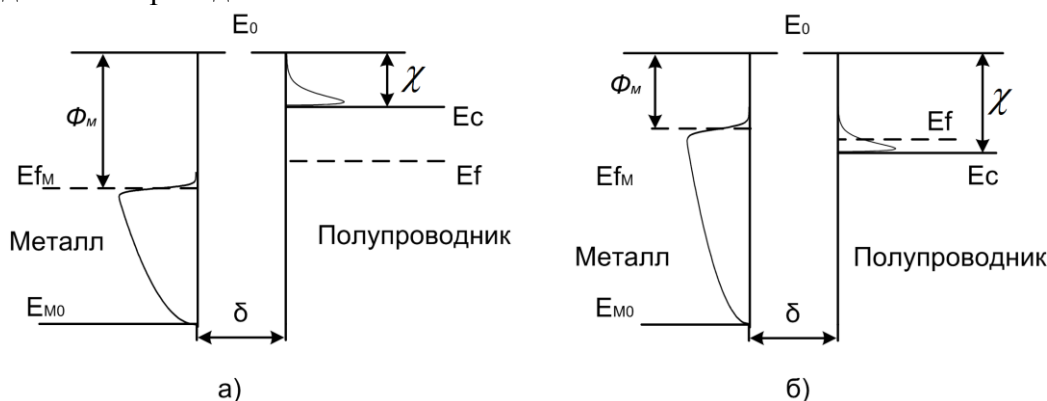


Рис.1

Если $\hat{O}_j > \chi$, то контакт металл-полупроводник будет обладать выпрямляющими свойствами, поскольку в зоне проводимости полупроводника существует барьер ($\hat{O}_j - \chi$). При прямом смещении полупроводник находится под отрицательным потенциалом по отношению к металлу и электроны движутся из полупроводника в металл [4].

1.1. Омические контакты с полупроводниками группы АІІВV

Омический контакт можно получить несколькими способами [5]:

- 1) понизить плотность поверхностных состояний;
- 2) уменьшить высоту потенциального барьера за счет изменения химического состава приконтактной области;
- 3) увеличить концентрацию носителей заряда в приконтактной области.

В настоящее время из материалов группы АІІВV широко используется в полупроводниковой микро- и наноэлектронике арсенид галлия - для получения СВЧ-приборов, светодиодов, лазеров и ряда других устройств. Для этого материала наиболее распространенным методом создания омических контактов является образование в приконтактной области сильно легированного приповерхностного слоя, который значительно сужает потенциальный барьер металл-полупроводник [5]. Этот же метод был выбран для построения численной модели омического контакта.

В области малых токов хорошим приближением для описания омических контактов является приближение равновесной плотности носителей в приконтактной области [6]. Контактные области рассматриваются как области полупроводника с той же концентрацией примесей, что и в приконтактных областях. Если количество макрочастиц вблизи контакта ниже равновесного, происходит «впрыскивание» макрочастицы в приконтактную область. Таким образом, ток через контакт определяется отклонением концентрации носителей в области контакта от равновесной концентрации.

Одним из основных критериев омических контактов транзисторов с высокой подвижностью электронов можно считать глубину фронта сплавления в полупроводнике [3]. Стандартные величины глубины фронта сплавления для СВЧ транзисторов составляют 50 – 90 нм. Для приборов малых размеров этот параметр может составлять достаточно большую величину (до трети глубины канала) и он определяет глубину моделируемой контактной области.

Такая модель представления омического контакта проста в реализации и эффективна с точки зрения вычислительных затрат, однако имеет существенные ограничения: она не может быть применена в случае больших токов и не учитывает зависимость сопротивления контакта от температуры. Для более точного описания омических контактов необходим учет процессов прохождения свободными носителями барьера на КМП.

1.2. Барьер Шоттки

Второй тип контакта – контакт с барьером Шоттки. Вследствие того, что работа выхода электрона из металла превышает электронное сродство полупроводника, следует, что электроны металла не в состоянии преодолеть барьер – их энергия меньше, чем энергия дна зоны проводимости полупроводника. Поэтому имеет место односторонний перенос заряда из полупроводника в металл и образуется обедненная электронами область со стороны полупроводника и электроотрицательный слой со стороны металла. В результате создается электрическое поле, которое является тормозящим для электронов полупроводника, и таким образом ток через контакт прекращается.

Традиционно, при расчете статических вольт-амперных характеристик барьера Шоттки, учитывается термоэлектронная эмиссия и туннелирование носителей сквозь запирающий слой (термополевая эмиссия) [7]. При расчете туннельного тока, коэффициент туннельного прохождения рассчитывается методом Венцеля–Крамерса–Бриллюэна [8], который учитывает только подбарьерное прохождение носителей, не рассматривая механизмы взаимодействия заряженной частицы с потенциалом, в частности с надбарьерной областью [9]. Как указывалось в [7, 9], это приводит к неточному описанию процесса рассеяния и ошибкам при расчете параметров прохождения барьера. Такой метод расчета не дает удовлетворительной точности в области обратных токов. На практике обратные токи, как правило, превышают расчетные значения, полученные этим методом [7]. Гораздо более точное описание можно получить, если учесть такие эффекты как понижение высоты барьера Шоттки за счет сил зеркального изображения и электростатическое понижение барьера. Однако описание барьера таким методом затруднительно в широком диапазоне смещений. Предложенный в работе [10] метод матрицы переноса позволяет достаточно точно вычислить коэффициент прохождения и время прохождения, характеризующие движение электронов через барьер произвольной формы, описанный кусочно-непрерывными потенциалами. В работах [7, 10] исследовался процесс взаимодействия электрона с потенциалом, сформированным контактом металл-полупроводник с барьером Шоттки, при одновременном учете туннелирования и надбарьерного прохождения и была предложена методика расчета статических ВАХ диодов с барьером Шоттки на GaAs.

Барьеру Шоттки посвящено достаточно много статей, но, по-прежнему, вопрос исследования режимов его работы остается открытым.

1.3. Туннелирование через потенциальный барьер П-образного вида

Для моделирования перехода электронов между металлом и полупроводником необходимо решить задачу туннелирования электрона через барьер, общий вид которого изображен на рис.2.

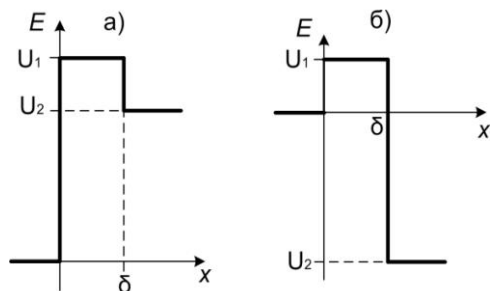


Рис.2

Электроны, движущиеся из металла в полупроводник, встречают потенциальный барьер, приведенный на рис. 2, а, где $U_2 = \Phi - \chi$.

Электроны, движущиеся из полупроводника в металл, приходят на этот барьер с другой стороны, что соответствует случаю, изображенному на рис. 2, б; здесь $U_2 = -(\Phi - \chi)$.

Решение стационарного уравнения Шредингера для электрона в поле барьеров, приведенных на рис.2, а и б, дает следующее выражение для коэффициента прохождения $D(E)$:

$$D = \begin{cases} \frac{4\mu^2\kappa^2\kappa_1^2}{(\kappa\kappa_1 + \mu^2)\sin^2(\mu a) + \mu^2(\kappa + \kappa_1)^2\cos^2(\mu a)}, & E > U_1; \\ \frac{16\kappa\kappa_1 \exp(-2\mu a)}{\kappa^2 + \kappa_1^2 + \mu^2 + \kappa_1^2\left(\frac{\kappa^2}{\mu^2}\right)}, & U_2 < E < U_1; \\ 0, & E < U_2, \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{где } \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \kappa_1 = \frac{\sqrt{2m(E-U_2)}}{\hbar}, \mu = \frac{\sqrt{2m|E-U_1|}}{\hbar}.$$

На рис. 3 приведен график зависимости коэффициента прохождения $D(E)$ от энергии частиц. При его расчете использовались следующие значения физических параметров: $\chi(GaAs) = 4,07 \text{ \AA}$; $\hat{O}_I(Al) = 3,6 \text{ \AA}$; $E_{fm} = 7,08 \text{ \AA}$ (относительно низшего энергетического уровня в металле); ширина контактного зазора равна 1 нм.

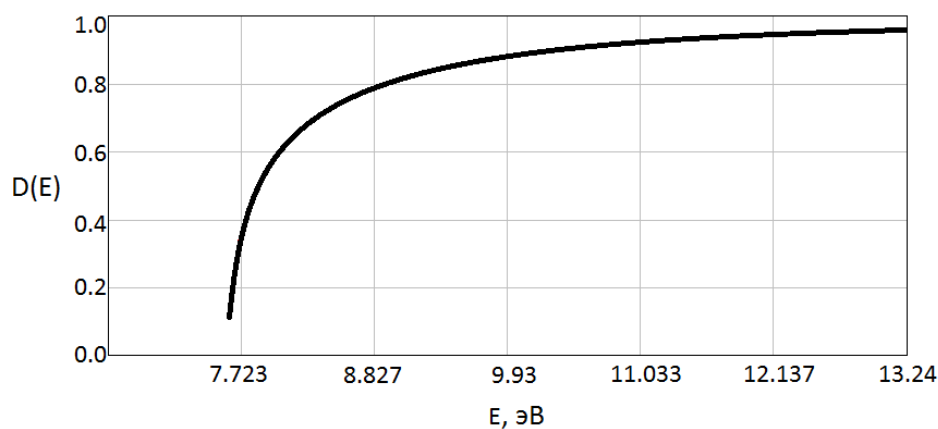


Рис. 3

Как следует из рисунка, с увеличением энергии электрона, налетающего на границу перехода металла и полупроводника, вероятность прохождения приближается к единице, т.е. через контакт проходят преимущественно высокоэнергетические электроны.

2. Модель контакта металл-полупроводник

Построение модели контакта металл-полупроводник можно разбить на три этапа:

- 1) моделирование рабочей области исследуемого полупроводникового образца;
- 2) расчет инжекции электронов из металла в полупроводник;
- 3) моделирование перехода электрона через потенциальный барьер П-образного вида.

2.1. Моделирование рабочей области полупроводника *n*-типа

При моделировании рабочей области полупроводника использовалась упрощенная версия численной модели, которая была разработана авторами ранее, и использовалась при исследовании полевых транзисторов с затвором Шоттки [1, 11]. Для построения достоверной модели процессов, происходящих в активной области полупроводника, необходимо промоделировать движение свободных электронов этой области. Данная задача является задачей о движении ансамбля взаимодействующих частиц в неоднородном поле и описывается кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \sum_i \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \frac{d\vec{p}_i}{dt} = S, \quad (2)$$

где f – функция распределения свободных носителей, S – столкновительный интеграл, \vec{r} и \vec{p} – координата и импульс свободных носителей.

Решение кинетического уравнения сводится к решению уравнений движения для носителей заряда в кристалле с учетом рассеяния:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon_k}{dk} \text{ и } \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\vec{F}}{m^*}, \quad (3)$$

где ε_k , m^* – энергия и эффективная масса носителя соответственно, \vec{F} – действующая на него внешняя сила.

Действие S учитывается благодаря реализации механизмов рассеяния. Для отработки основных положений модели контакта мы положили $S = 0$.

Для определения силы, действующей на носители заряда со стороны электрического поля, решается уравнение Пуассона (методом FACR):

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[\sum_i \int f_i d\vec{k} - N \right], \quad (4)$$

где $N = N(r)$ – распределение ионизированных атомов в решетке, ε – диэлектрическая проницаемость кристалла.

2.2. Моделирование инжекции электронов из металла в полупроводник

Для моделирования инжекции из металла в полупроводник необходимо рассчитать количество электронов, способных перейти в зону проводимости полупроводника, находящихся при этом в приконтактном объеме металла и способных преодолеть приконтактный барьер.

Функция распределения свободных электронов по энергиям в металле:

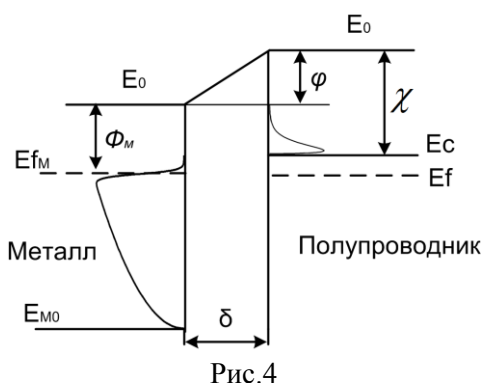
$$F(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}. \quad (5)$$

Количество электронов в интервале энергий от E до $E + dE$ в приконтактном объеме, способных за время dt пересечь границу металла, определяется по следующей формуле:

$$dN_\Phi(E) = F(E)V(E)D(E)dE. \quad (6)$$

Здесь $V(E) = S \cdot v(E) \cdot dt$ – объем приконтактной области, $D(E)$ – коэффициент прохождения барьера. Полное количество инжектируемых электронов определяется из соотношения:

$$N_\Phi(E) = \int_{E_C}^{E_M} F(E)V(E)D(E)dE. \quad (7)$$



По мере инжекции электронов из металла в полупроводник в приконтактном слое толщиной δ со стороны металла образуется положительный заряд поверхностной плотности σ , который создает электрическое поле $\xi = \frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0}$, препятствующее инжекции электронов. Результатом действия этого поля является уравнивание токов в омическом контакте.

Энергетическая диаграмма омического контакта с учетом поля $\xi = \varphi/\delta$ представлена на рис.4.

2.3. Моделирование перехода электрона через потенциальный барьер П-образного вида

Попадание частицы на потенциальный барьер П-образного вида происходит при эмиссии электронов из металла, либо при их переходе из полупроводника в металл. В обоих слу-

чаях вычисляется коэффициент прохождения $D(E)$ согласно формуле (1). 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, заносятся в список частиц полупроводниковой структуры с энергией $E = E_0 - E_f$, где E_0 – изначальная энергия частицы (энергия с которой частица налетает на барьер), получаемая из распределения Больцмана, E_f – энергия, затрачиваемая на преодоление поля в барьере.

3. Анализ результатов численных экспериментов

Для проверки модели контакта металл-полупроводник была проведена серия вычислительных экспериментов. В первую очередь проводились исследования достоверности модели омического контакта. В ходе численных экспериментов были проведены исследования с различными значениями временного шага, шага сетки, количества макрочастиц и других модельных параметров. При дальнейшем изложении показаны результаты, полученные с наиболее оптимальными по соотношению точность/время моделирования параметрами модели.

Для получения его вольтамперной характеристики моделировалась полупроводниковая

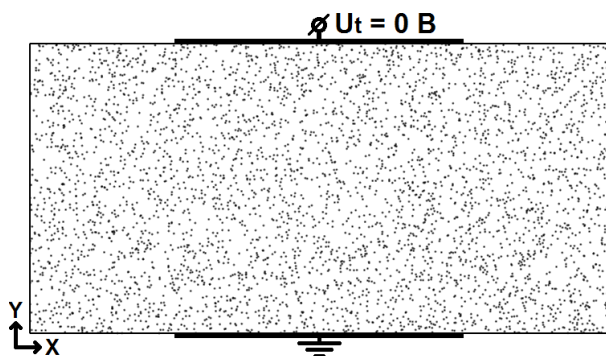


Рис.5

область на базе GaAs со следующими параметрами: количество макрочастиц – 4000; коэффициент укрупнения – 5000; временной шаг $dt = 10^{-15} c$; ширина $2 \cdot 10^{-6} i$; высота $10^{-6} i$; количество узлов сетки по оси OX/OY соответственно 100/65; слой $dz = 10^{-6} i$; длина контактов $10^{-6} i$; концентрация примеси $10^{25} i^{-3}$. В качестве материала металла для омических контактов использовался Al с $\hat{O}_f = 3,74 \hat{A}$ [4].

Начальное распределение носителей принималось равномерным по координатам и максвелловским по скоростям, как показано на рис.5. При проведении вычислительных экспериментов нижний контакт заземлялся, а на верхний – подавался потенциал U_t .

Получена ВАХ при изменении потенциала на верхнем контакте U_t в пределах $[-1,25 \hat{A} \dots 1,25 \hat{A}]$. Мгновенные значения тока снимались в течение $10 ns$, после чего производилась аппроксимация линейной функцией вида $I(t) = b - k * t$. Так как вариация трендовой функции крайне мала, значение b соответствует величине установившегося тока. По установившимся значениям тока при различной величине напряжения была построена вольт-амперная характеристика, приведенная на рис. 6.

Можно отметить, что характеристика линейная при $|U| > 0,05 \hat{A}$, а вблизи нуля наблюдается скачок из-за наличия пространственного заряда, создающего потенциал в рабочей области ПП вплоть до $0,05 B$, при нулевых потенциалах на обоих контактах. На рис.7 приведены состояния моделируемой области при различных значениях потенциала U_t на момент завершения вычислительного эксперимента, т.е. при $t = 10 ns$. Из рис. 7, а и б видно, что распределение макрочастиц в моделируемой области симметрично относительно напряжений разной полярности.

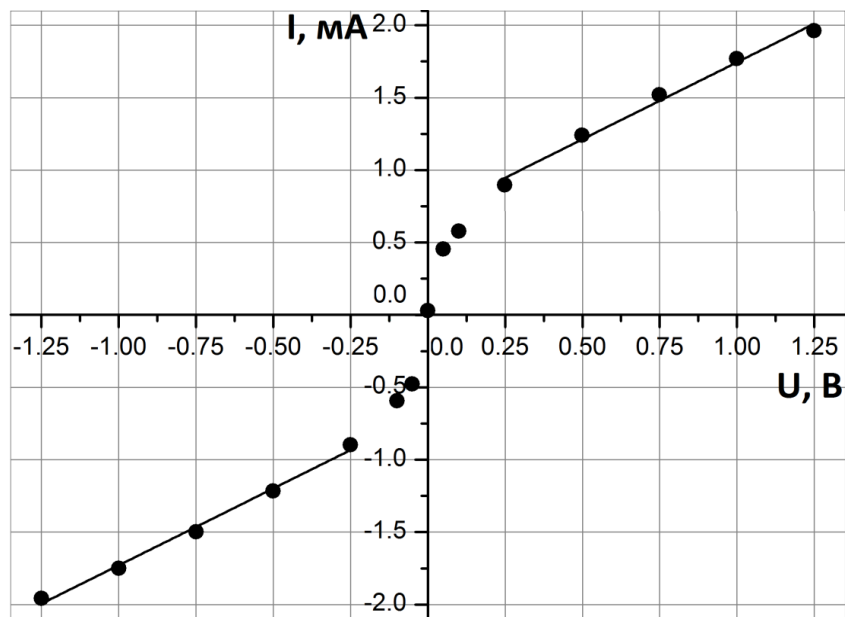


Рис. 6

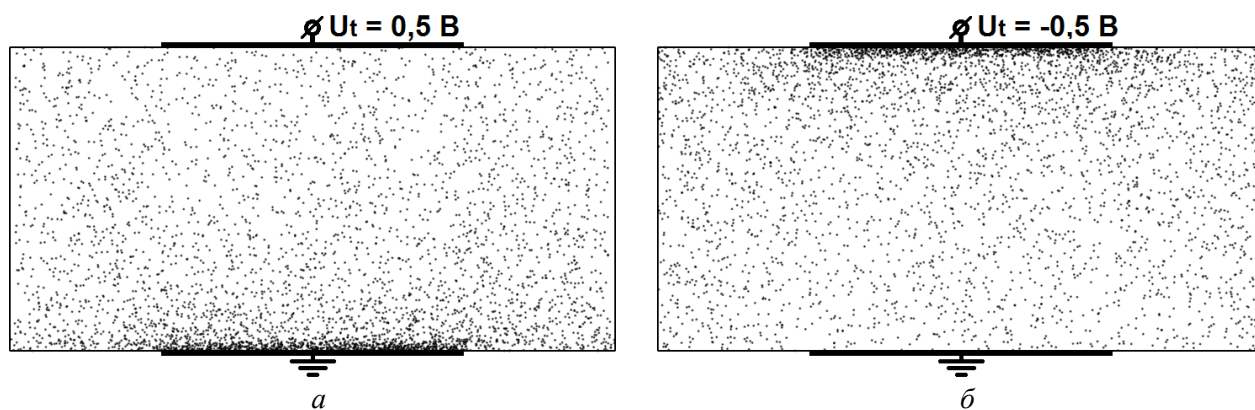


Рис. 7

Заключительным этапом верификации численной модели стал вычислительный эксперимент по проверке работоспособности контакта, обладающего выпрямляющими свойствами. При исследовании барьера Шоттки на базе GaAs (рис. 8) были изменены следующие параметры моделируемой структуры: количество макрочастиц – 40000; коэффициент укрупнения – 275; концентрация примеси в области $n_1 = 10^{25} \text{ i}^{-3}$; концентрация примеси в области $n^+ = 10^{24} \text{ i}^{-3}$.

Как и в случае омического контакта, вычислительный эксперимент длился 10 *нс*, но, в отличие от омического контакта, напряжение на барьер Шоттки подавалось только после того, как на контакте было установлено равновесное состояние. На рис.8 приведены состояния системы в момент времени $t = 10 \text{ нс}$, при подаче на них различных напряжений.

Вольт-амперная характеристика данного контакта была получена таким же методом, как и для случая омического контакта. Полученная зависимость приведена на рис. 10. Как видно из рисунка, при подаче отрицательного напряжения на выпрямляющий контакт, значение тока близко к нулю. Контакт открывается при подаче положительного потенциала $\varphi = 0,4 \text{ В}$, необходимого для компенсации результирующей барьерной разности потенциалов, которая складывается из контактной разности на барьере Шоттки $\varphi_b = 0,5 \text{ В}$ и разности потенциалов на переходе $n-n^+$ полупроводников $\varphi_{n-n^+} = -0,08 \text{ В}$. При дальнейшем повышении потенциала ток начинает линейно расти.

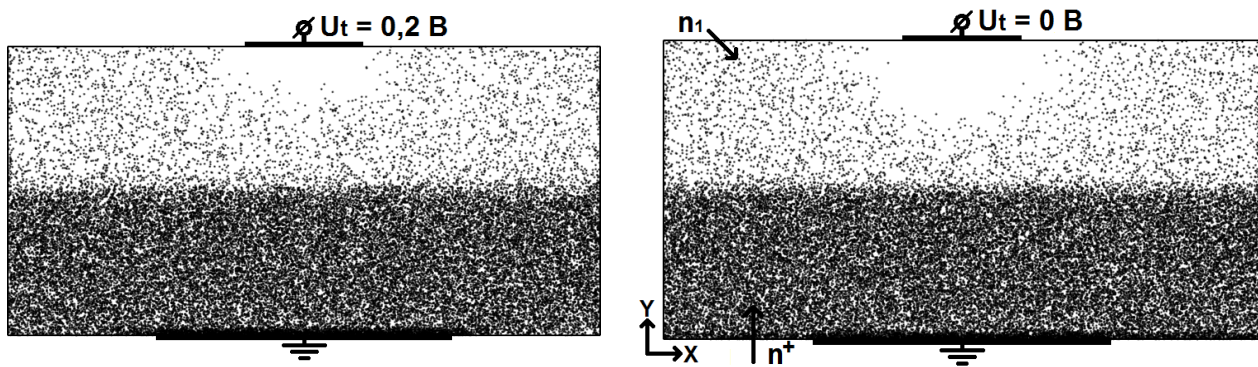


Рис. 8

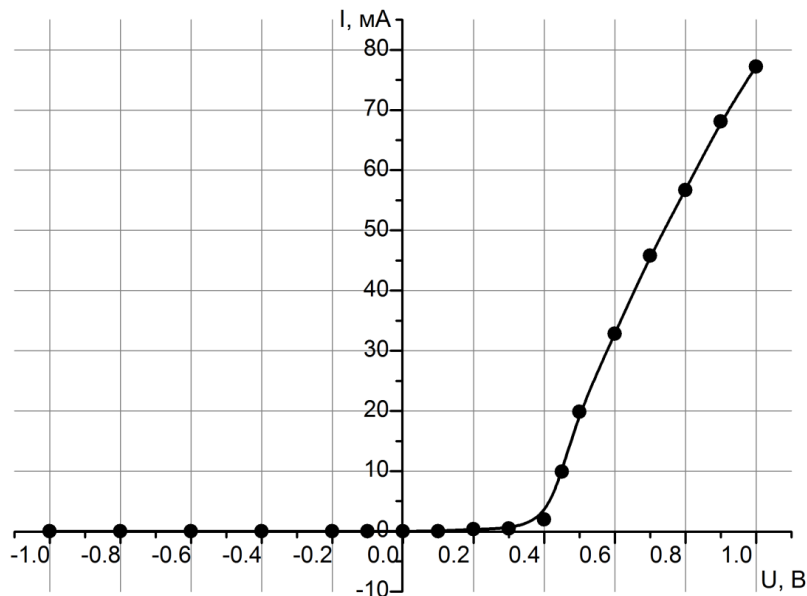


Рис. 10

Заключение

Представлена численная модель контакта металл-полупроводник двух типов:

- 1) контакта с сильно легированной приконтактной областью и линейной вольтамперной характеристикой (омический контакт);
- 2) контакта, обладающего выпрямляющими свойствами (барьер Шоттки).

Для верификации численной модели были проведены вычислительные эксперименты, в результате которых были получены вольтамперные характеристики омического контакта и барьера Шоттки. Полученные характеристики свидетельствуют о достоверной работе построенной численной модели контакта металл-полупроводник, и как следствие, она может быть использована при моделировании диодов Шоттки, ПТШ, светодиодов, полупроводниковых лазеров и других полупроводниковых устройств.

Авторы выражают благодарность В.В. Старостенко за участие в обсуждениях и ценные замечания по данной работе.

Список литературы: 1. Килесса, Г.В., Асанов, Э.Э., Зуев, С.А. Предельные частотные характеристики ПТШ на GaAs при заданной геометрии // 21-я Междунар. Крымская конф. «СВЧ-техника и телеком. технологии» (КрыМиКо'2011). Материалы конф. – Севастополь : Вебер, 2011. – Т.1. – С.244 -245. 2. Шалимова, К.В. Физика полупроводников. – М. : Энергоатомиздат, 1985. – 392 с. 3. Стриха, В.И. Теоретические основы работы контакта металл-полупроводник. – К. : Наук. думка, 1974. – 263 с. 4. Милнс, А., Фойхт, Д. Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. – М. : Мир, 1975. – 432 с. 5. Бланк, Т.В., Гольдберг, Ю.А. Механизмы протекания тока в омических контактах металл-полупроводник // Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41, № 11. – С. 1281-1308. 6. Хокни, Р., Иствуд, Д. Численное моделирование методом частиц. – М. : Мир, 1987. – 638 с. 7. Торхов, Н.А.

Эффект баллистического переноса электронов в структурах металл-n-GaAs-n+-GaAs с барьером Шоттки // ФТП. – 2001. – Т.35, Вып.7. – С.823-830. 8. *Родерик, Э.Х.* Контакты металл – полупроводник : пер. с англ. / под ред. Г.В. Степанова. – М. : Радио и связь, 1982. – 280 с. 9. *Булярский, С.В., Жуков, А.В.* Анализ механизмов переноса тока, определяющих характер обратных вольт-амперных характеристик барьеров металл-GaAs // ФТП. – 2001. – Т.35, Вып.5. – С.560-563. 10. *Чуприков, Н.Л.* Роль пространственной локализации частицы в процессе туннелирования // ФТП. – 1996. – Т.30, Вып.3. – С.443-445. 11. *Zuev, S.A., Starostenko, V.V., Shadrin, A.A.* A Calculation Model for Submicron Field-Effect Transistors Based on GaAs // Telecommunications and Radio Engineering, – 2002. – № 58. – P. 90-98.

*Харьковский национальный
университет радиоэлектроники,
Таврический национальный университет
имени В.И.Вернадского*

Поступила в редколлегию 03.07.2012