

SCHOTTKYJEVA BARIERA - MODERNI POGLEDI NA STAR PROBLEM (I. del)

Dean Korošak, Bruno Cviki, Fakulteta za gradbeništvo, Univerza v Mariboru, Maribor in Institut Jožef Stefan, Ljubljana

Schottky barrier – modern views on an old problem (Part I)

ABSTRACT

The description of the metal semiconductor contact in the framework of the general model incorporating the interfacial control layer between the metal and the ordered semiconductor is given. Special attention is given to the ICB Schottky structures for nonzero acceleration voltage featuring the disordered interfacial control layer characterized by the metal atoms incorporated into the semiconductor lattice and the DIGS continuum. The expression for the Schottky barrier height variation in ICB structures is given.

POVZETEK

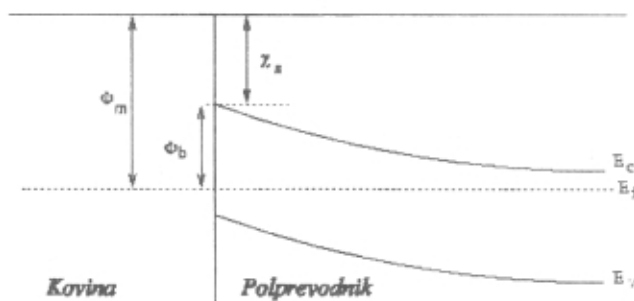
V prispevku je podan opis stika med kovino in polprevodnikom v okviru splošnega modela stika z vmesno kontrolno plastjo. Posebej so poudarjene lastnosti stika, narejenega po metodi CIS, kjer pride do nastanka neurejene kontrolne plasti, karakterizirane s kovinskimi atomi, vgrajenimi v kristalno mrežo polprevodnika in kontinuumom lokaliziranih elektronskih stanj, induciranih z neredom v kontrolni plasti. Podan je izraz za variacijo višine Schottkyjeve bariere v CIS-kontaktih.

1 UVOD

Problem Schottkyjevega stika oziroma nastanka potencialne bariere na stiku med kovino in polprevodnikom ostaja, kljub svoji več kot petdesetletni zgodovini, še danes nerešen in pomeni zelo aktivno področje osnovnih in aplikativnih raziskav v fiziki trdne snovi, površin in novih elektronskih materialov /1, 2/. Čeprav je uporaba stika med kovino in polprevodnikom izjemnega tehnološkega pomena za industrijo integriranih vezij in celotno mikro(nano)elektronsko industrijo, je presenetljivo, da je podrobna mikroskopska slika kontakta še v veliki meri nepojasnjena z mnogo odprtimi vprašanji. Namen tega prispevka je predstaviti nekaj novejših pogledov in načinov reševanja problema nastanka Schottkyjeve bariere, ki jih lahko zaznamo v zadnjem času, ter poudariti možnosti, ki jih za iskanje odgovorov daje raziskovanje lastnosti stika, narejenega po metodi curka ioniziranih skupkov (CIS) /3/. V prvem delu se omejimo na opis kontakta v termičnem ravnovesju, medtem ko opis transportnih lastnosti stika kovine in polprevodnika odložimo do drugega dela.

Najpomembnejša fizikalna količina, ki v največji meri definira stik kovine in polprevodnika, kakor tudi njegove transportne lastnosti, je višina potencialne bariere na meji oziroma Schottkyjeva bariera. Raziskovanje Schottkyjevega stika se navadno začne iz dveh smeri. Začetna stanja formiranja meje med kovino in polprevodnikom pri epitaksnosti rasti monoatomne plasti kovine na podlagi polprevodnika se raziskujejo z mikroskopskimi metodami površinske fizike (fotoelektronska spektroskopija, STM, BEEM), medtem ko se že stabilna plast kovine z debelino nekaj 100 nm raziskuje z analizo makroskopskih merjenj električnega toka skozi mejo in kapaciteto stika. Neujemanje lastnosti stika, dobljenih pri opisanih načinih, kaže na pomemben vpliv mikro-

skopskih mehanizmov pri nastajanju bariere na njeno končno, makroskopsko višino. Prvi fizikalni opisi dogajanja na meji med kovino in polprevodnikom /4, 5/ so bili usmerjeni v razumevanje anizotropnega prevajanja toka skozi stik z ostro mejo in nastanek področja, osiromašenega z nosilci naboja (depletirano področje) v polprevodniku. Višina bariere (Φ_b) je v takšnem idealnem, *Schottky-Mott*-modelu kontakta, enaka razliki izstopnega dela kovine (Φ_m) in elektronske afinitete polprevodnika (χ_s) na meji (slika 1) oziroma energijski razliki med robom energijskega pasu večinskih nosilcev v polprevodniku (E_c) in Fermijevim nivojem kovine (E_f):



Slika 1: Schottky-Mott model idealnega stika med kovino in polprevodnikom

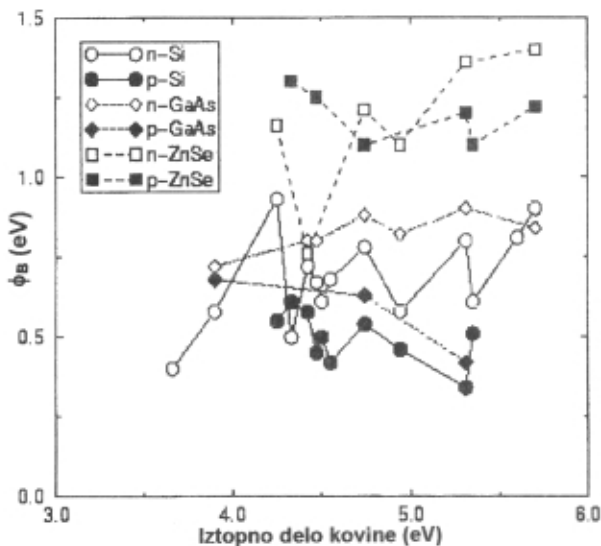
$$\Phi_b = \Phi_m - \chi_s \quad (1)$$

Izmerjene vrednosti višine bariere različnih kovin na isti podlagi polprevodnika so se razlikovale od predvidenega linearnega modela za idealni kontakt (1) in nakazovale na primarni vpliv polprevodnika na višino bariere (slika 2). Z drugimi besedami, Fermijev nivo v polprevodniku je stabiliziran ali vpet in določeno stanje v energijski reži polprevodnika, ne glede na vpliv kovine. Stabilizacijo Fermijevega nivoja se je poskušalo pojasniti z vplivom površinskih stanj in dodatnim nabojem na meji /6/.

Pri tem načinu so v primeru z majhno gostoto površinskih stanj na meji reproducirali Schottky-Mott-ovo limito, v primeru z veliko gostoto stanja na meji pa so dobili vpetje Fermijevega nivoja na stanje nevtralnosti naboja (charge neutrality level, E_{cni}) oziroma Bardeenovo limito:

$$\Phi_b = E_g - E_{cni} \quad (2)$$

kjer je E_g širina energijske reže polprevodnika. Opis stika z ostro mejo med kovino in polprevodnikom je



Slika 2: Izbrane izmerjene vrednosti višin Schottkyjeve bariere za različne sisteme kovine in polprevodnikov. Podatki iz [2].

oteževal podrobno analizo razmer, zato je v [7] obravnavan kontakt s tanko izolatorsko plastjo med kovino in polprevodnikom. S tem se naboj na površini kovine loči od naboja v stanjih na stiku in prostorskega naboja v depletiranem področju polprevodnika. Elektrostatska analiza da v tem primeru interpolacijsko zvezo med obema omenjenima limitama:

$$\Phi_b = (1-c)(\Phi_m - \chi_s) + c(E_g - E_{cni}) \quad (3)$$

c je funkcija gostote elektronskih stanj na stiku in debeline izolatorske plasti. Čeprav tovrstni način navidez uspešno rešuje problem vpetja Fermijevega nivoja, je primeren le za opise stika, kjer je plast izolatorja dovolj debela, da kovina in polprevodnik ne interagirata.

Ne glede na nejasne podrobnosti in nepopolnost mikroskopske slike vzroka vpetja Fermijevega nivoja je jasno, da višina bariere v realnih sistemih kovine in polprevodnika pade v določen interval za izbrani polprevodnik, medtem ko je tehnološko zaželeno, da je višina bariere na stiku *kontrolabilna* z eksperimentalnimi parametri.

2 MODEL STIKA KOVINA - POLPREVODNIK

Makroskopsko bi lahko vzrok za neuspešni opis stika kovine in polprevodnika v okviru modela Schottky-Mott lahko pripisali linearni formi izraza (1), ki je približek v prvem redu. Vpetje Fermijevega nivoja bi zato lahko bilo posledica členov višjih redov v razvoju:

$$\Phi_b = \Phi_m - \chi_s + a(\Phi_m - \chi_s)^2 + b(\Phi_m - \chi_s)^3 + \dots \quad (4)$$

kjer so a, b, \dots neznane funkcije parametrov stika. Vendar se zaradi nejasne narave in izvora takšnega opisa

predlaga drugačen model (ne)idealnega stika kovine in polprevodnika. V modelu se privzame, da je stik sestavljen iz *treh* različnih in fizikalno dobro definiranih delov: plast kovine na eni strani, polprevodnik (področje s fiksnim prostorskim nabojem) na drugi in mikroskopska plast med njima. Predpostavlja se, da ravno mikroskopska plast med kovino in polprevodnikom, značilno široka nekaj nm, odločujoče vpliva na lastnosti stika in uravnava višino bariere. Fizikalne lastnosti mikroskopske kontrolne plasti in posledično tudi lastnosti celotnega stika so v veliki meri določene z načinom izdelave stika. Če gre za počasen, epitaksn nanos kovine (MBE), potem bodo spremembe strukture polprevodnika na meji minimalne. Meja med kovino in polprevodnikom bo ostra z nekaj desetimi nm široko kontrolno plastjo. Takšno kontrolno plastjo lahko imenujemo *urejeno*, ker je struktura plasti v bistvu identična strukturi polprevodnika. Spremembe v elektronski strukturi pa zaradi ostre meje kljub temu ostanejo. Če je tehnika nanosa kovine na podlago takšna, da povzroča strukturne spremembe v polprevodniški plasti, debeli nekaj nm (denimo CIS), je vmesna kontrolna plast *neurejena*.

Neurejena kontrolna plast (DIDL - Disordered Interface Control Layer) je v predstavljenem modelu stika kovine in polprevodnika del stika z bistveno drugačnimi strukturnimi in elektronskimi lastnostmi. V makroskopskem opisu kontakta je mogoče vpliv DIDL na višino bariere podati z induciranim dipolom ΔV_i na meji:

$$\Phi_b = \Phi_m - \chi_s - \Delta V_i \quad (5)$$

kjer je

$$\Delta V_i = c((\Phi_m - \chi_s) - (E_g - E_{cni})) \quad (6)$$

Z gornjim izrazom sledi iz (5), navedena zveza (3), ki je bila izpeljana s predpostavko o vmesni *izolatorski* plasti med kovino in polprevodnikom.

Bistveno vprašanje problema stika med kovino in polprevodnikom je torej karakterizacija in opis vmesne kontrolne plasti in njenega vpliva na višino bariere ter predvsem razumevanje nastanka novih elektronskih stanj na stiku, ki odločajo o vpetosti Fermijevega nivoja. Izvir dodatnega naboja na mejni plasti stika je podoben naboju zaradi elektronov v površinskih stanjih na prosti površini kristala (torej na meji kristal-vakuum) [npr. 8]. Odsotnost periodičnosti strukture v normalni smeri na stik povzroči nastanek elektronskih stanj v energijski reži polprevodnika (t.j. nove rešitve Schrödingerjeve enačbe zaradi novih robnih pogojev) z lokalno Fermijevo energijo E_{cni} . Ko je površina polprevodnika prekrita s plastjo kovine, govorimo o kontinuumu stanj, induciranih s kovino (MIGS - Metal Induced Gap States) [9], ki eksponentno pojemajo v notranost polprevodnika in se na meji ujema z (Blochovo) valovno funkcijo elektrona v kovini. Po tem se bistveno razlikujejo od površinskih stanj polprevodnika, ki so eksponentno pojemajoča tudi zunaj polprevodnika, čeprav leži v obeh primerih vzrok za stanja v energijski reži v kompleksnih energijskih pasovih polprevodnika. Položaj Fermijevega nivoja na meji, torej višina Schottkyjeve bariere, je samousklajeno določen z nabojem na meji in s prostorskim nabojem v depletiranem področju

polprevodnika. Za običajne vrednosti gostote primesi v polprevodniku ($<10^{18} \text{ cm}^{-3}$) je elektronska gostota v stanjih na meji ($\sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) večja od površinske gostote naboja v depletiranem področju ($\sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), tako da se lahko prenos naboja med stanji na meji in depletiranim področjem zanemari. S tem se lahko problem Schottkyjeve bariere razdeli na makroskopsko določanje potencialne bariere (band bending) z reševanjem Poissonove enačbe (pri tem je mejna plast robni pogoji) in na mikroskopsko analizo bariere v področju kontrolne plasti.

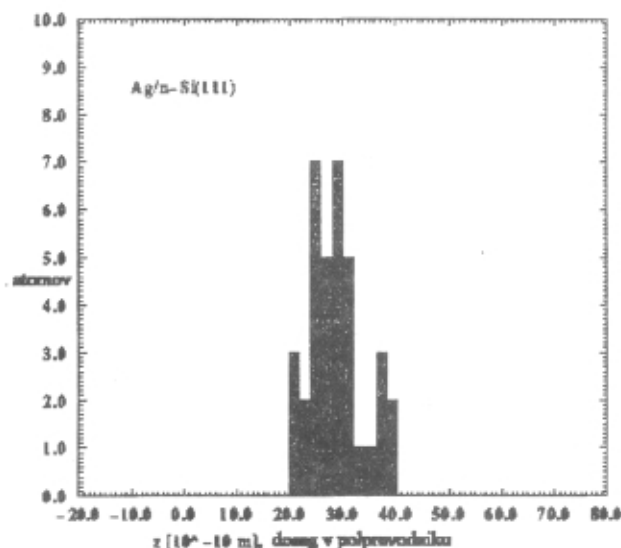
3 LASTNOSTI SCHOTTKYJEVEGA STIKA, IZDELANEGA PO METODI CIS

Metoda nanašanja plasti materiala na podlago s curkom ioniziranih skupkov (CIS) (podrobneje npr. /3/) je nizkotemperaturna vakuumaska metoda, kjer se materialu v obliki ioniziranih skupkov in atomov na poti do podlage dovaja dodatna energija s pospeševanjem v statičnem električnem polju. Pospeševalna napetost, ki je glavni eksperimentalni parameter te metode, je navadno v mejah od nekaj sto do nekaj tisoč voltov.

Vrsta analiz električnih lastnosti stikov kovine in polprevodnika (Ag/Si in Pb/Si), narejenih s pilotsko CIS napravo na Odseku za reaktorsko fiziko Instituta J. Stefan pri različnih pospeševalnih napetostih, kaže na modifikacijo Schottkyjeve bariere, ki se s povečevanjem energije vpadlih atomov in skupkov *znižuje* na n-tipu in *zvišuje* na p-tipu polprevodnika /10, 11/ v primerjavi s standardnimi vrednostmi. Pri zelo velikih pospeševalnih napetostih ($\sim 6 \text{ kV}$) pa se opazi prehod električnih lastnosti stika iz usmerniške v linearno (ohmsko), tako da metoda CIS lahko omogoča *zvezno* spreminjanje višine bariere pri *istem* sistemu izbrane kovine in polprevodnika. Tehnološki pomen takšne variabilnosti Schottkyjeve bariere je očiten. Čeprav so glavne smeri sprememb tokovnih karakteristik stika, narejenega po metodi CIS, opazili že zgodaj /3/, ni bil podan niti približen poskus opisa fizikalnih pojavov in njihove interpretacije v okviru konsistentnega modela neidealnega kontakta z neurejeno kontrolno plastjo.

Zaradi zvečevanja njihove energije pri pospeševanju na poti do podlage lahko ionizirani atomi in skupki prodrejo pod površino polprevodnika in tvorijo s kovinskimi ioni obogateno plast polprevodnika v bližini meje. Predpostavlja se, da lahko tako formirana plast obogatene polprevodnika igra vlogo neurejene vmesne plasti DICL v modelu stika kovine in polprevodnika. Doseg kovinskih atomov L (in njihova porazdelitev) v kristalu polprevodnika je funkcija pospeševalne napetosti (slika 3) in pomeni širino neurejene vmesne plasti. Nered (kovinski atomi v kristalni mreži polprevodnika in sprememba medatomske vezi) vpliva na spremembo elektronske strukture v kontrolni plasti, ki povzroča modifikacijo Schottkyjeve bariere glede na idealni stik. Osnovo za razumevanje vpliva nereda daje Andersonov model lokalizacije elektronskih stanj /12/. Lokalizacija bo najmočnejša na meji med neurejenim in urejenim delom polprevodnika, kjer prihaja do največje variacije lokalne strukture. Del lokaliziranih stanj se zaradi razširitve robov energijskih pasov nahaja v energijski reži polprevodnika.

Taka stanja se imenujejo z neredom inducirana stanja (DIGS - Disorder Induced Gap States) /13/ in jih lahko



Slika 3: Porazdelitev atomov srebra v tanki plasti silicija. Simulacija je narejena z molekularno dinamiko za trk 36 atomov srebra z energijo 300 eV z modelom silicijevega kristala z orientacijo površine (111).

opišemo z eksponentno pojemajočo krajevno odvisnostjo:

$$\psi_{DIGS} \propto \exp(-|\bar{r} - \bar{r}_0| / \xi) \quad (7)$$

kjer je ξ lokalizacijska dolžina stanja. Za DIGS z zvezno gostoto stanj v reži še podobno kot za MIGS definira nevtralni nivo E_{HO} . Če Fermijev nivo v polprevodniku lokalno ne sovпада z E_{HO} , potem se v DIGS inducira dodatni naboj, ki lahko vpliva na višino bariere. Vpliv kovinskih atomov, vgrajenih v kristalno mrežo polprevodnika pri nanosu po metodi CIS, je potemtakem dvojen:

- s povzročanjem neurejenosti v strukturi polprevodnika inducirajo lokalizirana stanja DIGS z mogočim dodatnim nabojem na meji med DICL in urejenim delom polprevodnika
- delujejo kot atomi primesi z diskretnimi elektronskimi stanji (donorskimi in akceptorskimi) v energijski reži polprevodnika, ki ionizirani lahko spremenijo gostoto prostorskega naboja v DICL in s tem tudi rob energijskega pasu večinskih nosilcev.

Gostoto inducirane naboja na višino Schottkyjeve bariere lahko v poenostavljenem enodimenzionalnem modelu s konstantno gostoto DIGS /14/ ocenimo z:

$$n(z) = \frac{D_{DIGS} (E_F - E_{HO} - \Delta V_i(z))}{\xi} \exp(-|z - L| / \xi) \quad (8)$$

kjer je D_{DIGS} gostota DIGS na enoto površine, E_F Fermijeva energija. Inducirani potencial ΔV_i je rešitev Poissonove enačbe in je na meji med DICL in urejenim delom polprevodnika:

$$\Delta V_i(z) = (E_F - E_{HO}) [1 - c] \quad (9)$$

kjer je $c = I_0(2\xi/\lambda)$ modificirana Besselova funkcija in

$$\lambda = \sqrt{\epsilon_s \epsilon_0 \xi / e^2 D_{DIGS}}.$$

Višina Schottkyjeve bariere je sedaj:

$$\Phi_b = c(E_c - E_F) + (1 - c)(E_c - E_{HO}) \quad (10)$$

V limiti, ko je nered v kontrolni plasti dovolj majhen, pri nizkih vrednostih pospeševalne napetosti ($D \rightarrow 0$), zgornji izraz reproducira Schottky-Mottovo limito ($c = 1$) $\Phi_b = E_c - E_F$. Pri večjih vrednostih pospeševalne napetosti in pri nastanku kontinuuma DIGS z gostoto $\sim 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ je (z lokalizacijsko dolžino 0,2 nm) $c = 2$ in za višino Schottkyjeve bariere z neurejeno kontrolno plastjo:

$$\Phi_b = (E_c - E_F) - (E_F - E_{HO}) = \Phi_{b0} - \Delta\Phi_b \quad (11)$$

Torej je variacija potencialne bariere na neidealnem stiku kovine in polprevodnika v predstavljenem modelu podana z lokalnim odstopanjem Fermijevega nivoja od nevtralnega nivoja v DIGS kontinuumu. V primeru vpetja Fermijevega nivoja na meji med DCL in urejenim delom polprevodnika $E_F = E_{HO}$ izhaja iz zgornjega izraza Bardeenova limita za primer neidealnega stika kovina-polprevodnik, izdelanega po metodi CIS: $\Phi_b = E_c - E_{HO}$. Ker nevtralni nivo E_{HO} označuje mejo v kontinuumu DIGS med stanji akceptorskega in donorskega značaja, se predpostavlja, da je pri polprevodnikih s tetraedersko koordinacijo vezi enak energiji hibridiziranih sp^3 orbital in leži blizu sredine energijske reže /13/. Pri CIS-Schottkyjevih strukturah je mogoče pričakovati, da bo položaj E_{HO} blizu sredine energijske reže le pri nizkih vrednostih pospeševalne napetosti (nekaj 100 V), ko gre za zmerne spremembe strukture polprevodnika. Za silicij je takrat $\Phi_b = E_c - E_g/2 = 0,58 \text{ eV}$, medtem ko je izmerjena vrednost za sistem Ag/n-Si(111) pri 300 V pospeševalne napetosti 0,59 eV /11/. Za visoke vrednosti pospeševalne napetosti (nekaj kV) in pri močno neurejeni kontrolni plasti pa se pričakuje, da se bo položaj E_{HO} premaknil iz sredine energijske reže in v limiti dosege Fermijevo energijo kovine v stiku. Za podrobno razumevanje razmer v neidealnem Schottkyjevem stiku je treba izhajati iz mikroskopske slike okolice posameznega atoma v kontrolni plasti in vpliva nereda v plasti na položaj nevtralnega nivoja in na vpetje Fermijevega nivoja. Raziskave v tej smeri so v teku.

4 SKLEP

Opisan je stik med kovino in polprevodnikom s stališča splošnega modela kontakta s tremi dobro definiranimi in fizikalno različnimi področji: kovinsko plastjo na eni strani, urejenim polprevodnikom na drugi in kontrolno vmesno plastjo. Posebej je poudarjen način raziskovanja variacije višine Schottkyjeve bariere pri kontaktih med kovino in polprevodnikom, narejenih po metodi CIS. Pri do sedaj znanih načinih modifikacije Schottkyjeve bariere so uporabljene ultratanke plasti, narejene z molekularno epitaksijo, ki povzročajo nastanek urejene vmesne plasti /15/. Pri tem je material urejene kontrolne plasti drugačen od polprevodniške podlage (npr. Al/Si/GaAs sistemi). Nanos kovine v Schottkyjevih strukturah, izdelanih po metodi CIS, rezultira v kvalitativno drugačnih fizikalnih procesih kontrole višine bariere in za sedaj predstavlja edinstven način študija celotnega problema nastanka Schottkyjeve bariere. Pomembna razlika med tehnikama MBE in CIS je, da pri uporabi tehnike CIS prihaja do modifikacij v kristalni mreži polprevodnika, tako da se kontrolna plast formira v samem polprevodniku, ki je karakterizirana s kontinuumom lokaliziranih elektronskih stanj (DIGS) na meji med kontrolno plastjo in urejenim delom polprevodnika. Nadaljnje raziskave so usmerjene v študij mikroskopske slike okolice posameznega atoma v neurejeni kontrolni plasti in vpliva spremenjene elektronske strukture polprevodnika na transportne lastnosti stika kovine in polprevodnika.

5 LITERATURA

- /1/ E. H. Rhoderick, R. H. Williams, Metal-Semiconductor Contacts 2nd ed., Clarendon Press (1988)
- /2/ S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices 2nd ed., John Wiley and Sons (1981)
- /3/ T. Takagi, Ionized Cluster Beam Deposition and Epitaxy, Noyes Publications (1988), glej tudi B. Cviki, Vakuumist, 13, 1993, 18
- /4/ N. F. Mott, Proc. Camb. Philos. Soc. 34, 1938, 568
- /5/ W. Schottky, Z. Phys. 41, 1940, 570
- /6/ J. Bardeen, Phys. Rev. 71, 1947, 717
- /7/ A. M. Cowley, S. M. Sze, J. Appl. Phys. 36, 1965, 3212
- /8/ M. C. Desjonqueres, D. Spaanjard, Concepts in Surface Physics 2nd ed., Springer (1996)
- /9/ V. Heine, Phys. Rev. 138, 1965, 1689
- /10/ B. Cviki, T. Mrden, Fizika A4, 1995, 203
- /11/ B. Cviki, D. Korošak, Zs. J. Horvath, v tisku Vacuum (1998)
- /12/ P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1958, 1492
- /13/ K. Koyanagi, S. Kasai, H. Hasegawa, Jpn. J. Appl. Phys. 32, 1993, 502
- /14/ D. Korošak, B. Cviki, T. Mrden, 24th International Conference on Microelectronics, MIEL '96, Proceedings, 1996, 303
- /15/ L. Sorba, G. Bratina, A. Antonini, A. Franciosi, L. Tapfer, A. Miglioni and P. Merli, Phys. Rev. B46, 1992, 6834