

## ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ БАРЬЕРА ШОТТКИ

Э.Э. АСАНОВ, С.А. ЗУЕВ, Г.В. КИЛЕССА, Н.И. СЛИПЧЕНКО, В.В. СТАРОСТЕНКО

В работе представлено описание численной модели выпрямляющего контакта металл-полупроводник. Для верификации разработанной модели был проведен ряд вычислительных экспериментов, в ходе которых получены результаты, в частности вольтамперная характеристика, свидетельствующие о достоверной работе модели.

**Ключевые слова:** контакт металл-полупроводник, барьер Шоттки, моделирование методом макро-частиц.

### ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день выпрямляющий контакт металл-полупроводник широко применяется в полупроводниковой электронике, в частности, в диодах Шоттки и полевых транзисторах с затвором Шоттки. В связи с тенденцией к повышению плотности интеграции микросхем и достижением субмикронных размеров их активных элементов существует потребность в практически эксплуатируемых численных моделях для исследования характеристик как микросхем в целом, так и их отдельных элементов. Точность описания контактов особенно актуальна для короткоканальных приборов, характеристики которых в значительной степени определяются свойствами контактов.

Целью данной работы является построение численной модели выпрямляющего контакта металл-полупроводник (КМП), учитывающей токовые процессы в КМП и прохождение носителей заряда через потенциальный барьер контакта для использования в моделях полупроводниковых приборов и структур.

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Свойства идеального перехода между металлом и кристаллическим полупроводником определяются разностью работ выхода электрона из металла ( $\phi_m$ ) и из полупроводника ( $\phi_s$ ). На рис. 1 показана энергетическая диаграмма контакта металл-полупроводник n-типа в случае, когда  $\phi_m > \phi_s$  [6].

На рис. 1. использованы следующие обозначения:  $E_0$  – энергетический уровень вакуума,  $E_{FM}$  – уровень Ферми в металле,  $E_{FSC}$  – уровень Ферми в полупроводнике,  $\chi_s$  – электрическое сродство.

Как видно из диаграммы, после приведения материалов в контакт и установления термодинамического равновесия в приконтактной области полупроводника образуется барьерная разность потенциалов, равная  $\phi_m - \phi_s$ , препятствующая движению электронов из полупроводника в металл. При этом барьер для обратного ему потока электронов из металла в полупроводник равен

$\phi_m - \chi_s$  и является относительно независимой от внешнего приложенного напряжения и степени легирования полупроводника величиной [7].

Барьерная разность потенциалов определяет выпрямляющие свойства барьера Шоттки. Вследствие того, что работа выхода электрона из металла превышает электронное сродство полупроводника, 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, в связи с чем образуется обедненный электронами слой со стороны полупроводника и электроотрицательный слой со стороны металла. Между этими слоями создается электрическое поле, которое является тормозящим для электронов полупроводника, и ток через контакт не течет. Считая, что все донорные атомы в приконтактной области ионизованы, положим  $\rho = en$ , где  $n$  – концентрация примеси, и, решив одномерное уравнение Пуассона, получим распределение потенциала в полупроводнике [4]:

$$\varphi(x) = \frac{en}{2\epsilon\epsilon_0}(L-x)^2,$$

где  $L$  – ширина области пространственного заряда (ОПЗ). Напряженность электрического

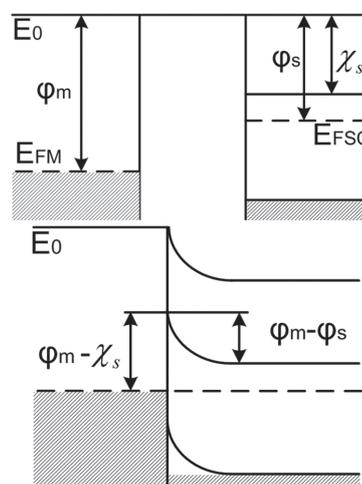


Рис. 1. Энергетическая диаграмма выпрямляющего контакта металл-полупроводник n-типа

поля, в свою очередь, равна  $\xi(x) = \frac{en}{\epsilon\epsilon_0}(L-x)$ .

Пусть на границе материалов со стороны металла образовался отрицательный заряд поверхностной плотности  $\sigma$ . Тогда  $\xi(0) = \frac{\sigma}{\epsilon\epsilon_0} \Rightarrow \sigma = enL$ ,

$L = \frac{\sigma}{en}$ . Используя последнее выражение, можно получить зависимость высоты барьера от поверхностной плотности заряда:

$$\varphi_b = \varphi(0) = \frac{\sigma^2}{2\epsilon\epsilon_0 en}$$

Т.о., зная величину плотности заряда на границе материалов со стороны металла, можно вычислить величину поля и глубину проникновения поля в полупроводник.

Моделирование токовых процессов в выпрямляющем КМП может быть разбито на три этапа:

- 1) моделирование ансамбля электронов проводимости в рабочей области полупроводника;
- 2) моделирование инжекции электронов из металла в область полупроводника;
- 3) моделирование прохождения электроном барьера на границе материалов.

В работе барьера Шоттки можно выделить два последовательных процесса:

- установление контактной разности потенциалов и ОПЗ;
- учет тока электронов через барьер при подаче внешнего напряжения.

Реализация этих составляющих и процессов в модели позволила исследовать свойства барьера, в частности, получить его вольтамперную характеристику.

### 1. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ БАРЬЕРА ШОТКИ

Как было отмечено выше, построение модели выпрямляющего контакта металл-полупроводник можно разбить на три этапа. Рассмотрим более подробно каждый из них.

1. При моделировании рабочей области полупроводника использовалась, разработанная авторами ранее двумерная численная модель, в которой моделирование ансамбля электронов проводится методом крупных частиц [3, 9, 10]. Однако в ней был проведен ряд упрощений: так, например, интеграл столкновений  $S$ , действие которого учитывается благодаря реализации механизмов рассеяния, был положен равным нулю для ускорения вычислений.

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

$$n(E) = \frac{dN}{dE} = n_0 \cdot S \cdot f(E) \cdot D(E) \cdot v(E) \cdot \Delta t,$$

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, как следует из рис. 1,  $E_F < E_C$ , 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], изображенный на рис.2, в результате чего была получена зависимость  $D(E)$  коэффициента прохождения электрона с энергией  $E$ :

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

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

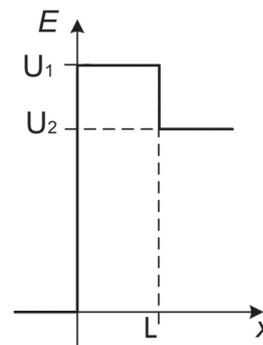


Рис. 2. Потенциальный барьер для электрона на границе материалов

На рис. 3 приведен результат расчета коэффициента туннелирования при прохождении электрона через границу GaAs ( $\chi_s = 4,07$  эВ) и Au ( $\Phi_M = 4,58$  эВ;  $E_{FM} = 7,61$  эВ) [5] для различных значений обратного смещения барьера.

Как следует из рисунка, с увеличением энергии электрона, налетающего на границу перехода металла и полупроводника, вероятность прохождения приближается к единице. Т.о. через контакт проходят преимущественно высокоэнергетические электроны. При обратном смещении барьера для электронов, переходящих

из полупроводника в металл, наблюдается интерференция падающей и отраженной волн, что объясняет появление осцилляций коэффициента туннелирования на кривых SC2 и SC3 [1].

Попадание частицы на потенциальный барьер происходит при эмиссии электронов из металла, либо при их переходе из полупроводника в металл. В обоих случаях при моделировании определяется коэффициент прохождения  $D(E)$  согласно формуле. 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  $E = E_0 - E_{\text{п}}$ , где  $E_0$  – изначальная энергия частицы (энергия, с которой частица налетает на барьер), получаемая из распределения Больцмана,  $E_{\text{п}}$  – энергия, затрачиваемая на преодоление поля в барьере.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для проверки построенной численной модели была проведена серия вычислительных экспериментов, в которых моделировалась полупроводниковая структура на базе GaAs с параметрами, приведенными на рис. 4.

Верхний контакт структуры представлял собой барьер Шоттки: материал металла – Au ( $\phi_m = 4,58$  эВ), протяженность по оси OX – 400 нм; нижний контакт структуры представлял собой омический контакт: материал металла – Al ( $\phi_m = 3,74$  эВ), протяженность по оси OX – 1 мкм. По существу моделировалась диодная структура с указанными выше характеристиками контактов и GaAs.

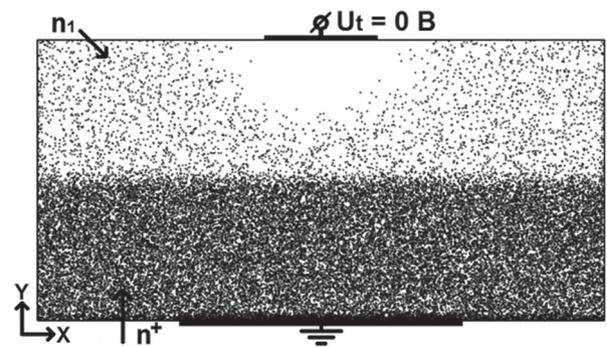


Рис. 4. Моделируемая полупроводниковая структура, количество макрочастиц – 40000; коэффициент укрупнения – 275; временной шаг  $dt = 10^{-15}$  с; ширина области  $2 \cdot 10^{-6}$  м; высота области  $10^{-6}$  м; количество узлов в сетке по оси OX 100; количество узлов сетки по оси OY 65; слой  $dz = 10^{-6}$  м; концентрация области  $n_1 = 10^{24}$  м<sup>-3</sup>; концентрация области  $n^+ = 10^{25}$  м<sup>-3</sup>

На рис. 5 приведены распределения электростатического потенциала и макрочастиц в области полупроводника при различных подаваемых напряжениях. Из соответствующих графиков и распределений частиц видна зависимость высоты обедненной области при барьере Шоттки от величины приложенного напряжения  $U_i$ ; размеры области и потенциальный барьер для электронов уменьшаются по мере изменения  $U_i$  от  $-0,4$  В до  $0,4$  В. В диапазоне этих напряжений ток через барьер Шоттки равен нулю – контакт закрыт.

Для получения вольтамперной характеристики омический контакт заземлялся, а на барьер Шоттки подавался потенциал в диапазоне от  $-1$  В до  $1$  В с шагом в  $0,1$  В. Мгновенные значения тока снимались в течении 10 пс через временной шаг  $dt = 1$  фмс, после чего производилась аппроксимация полученного набора величин линейной

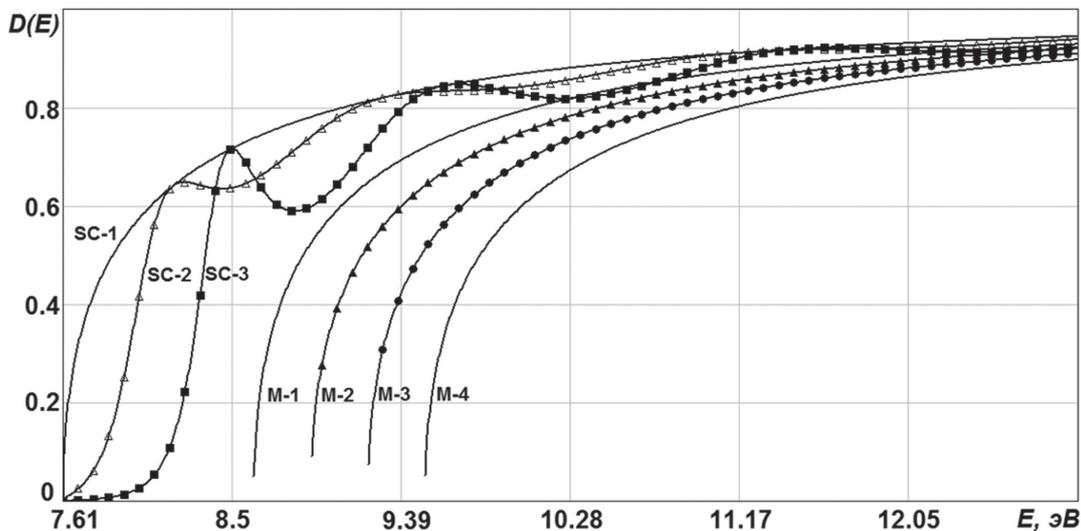


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения  $D$  от энергии (относительно низшего энергетического уровня в металле) частицы проходящей через границу GaAs и Au. Кривые M1-M4 – инжекция из металла в полупроводник, SC1-SC3 – из GaAs в Au. M1 – 0 В; M2 – 0,3 В; M3 – 0,6 В; M4 – 0,9В; SC1 – 0 В; SC2 – 0,2 В; SC3 – 0,5 В

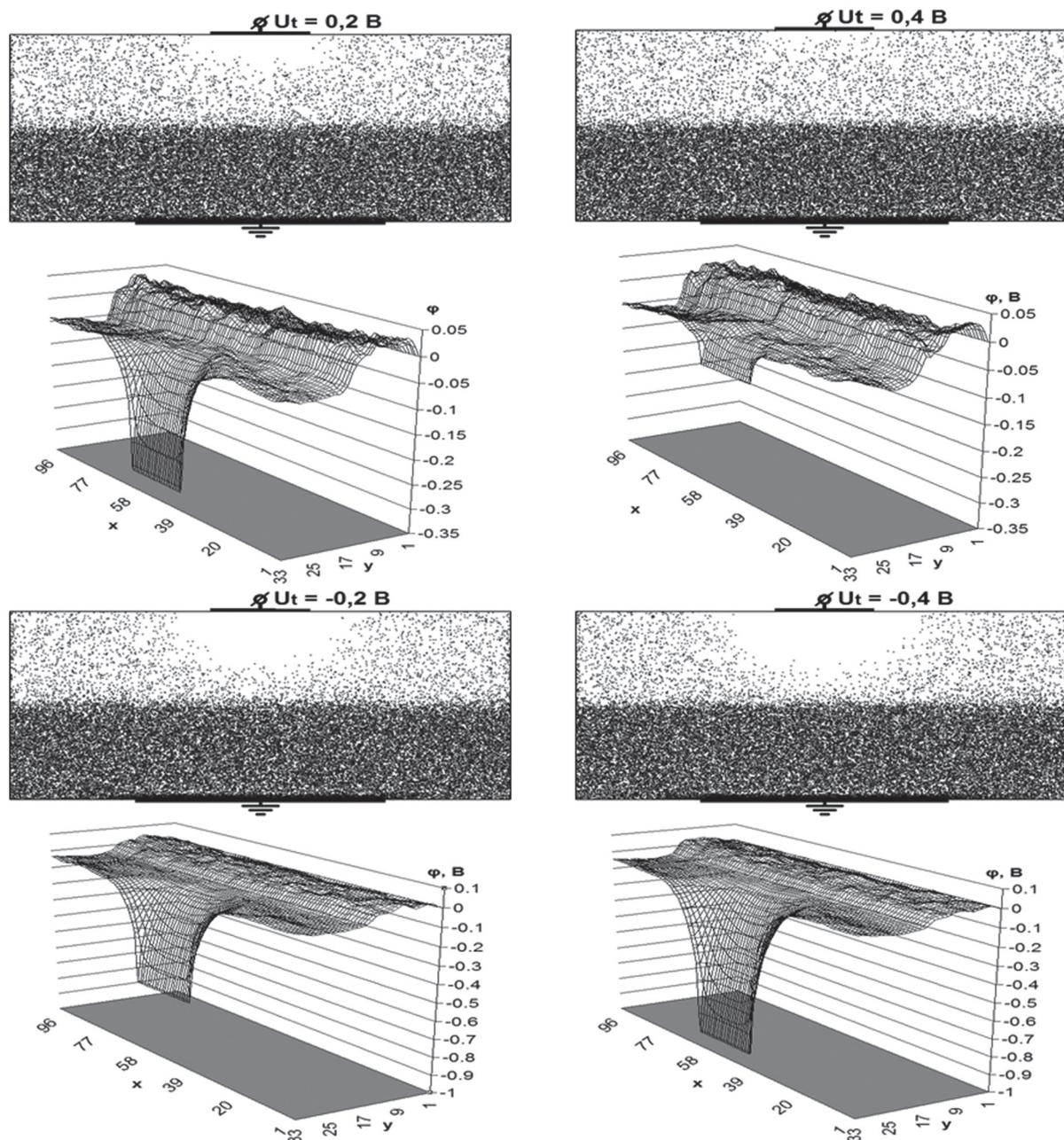


Рис. 5. Распределение потенциала и макрочастиц в структуре при подаче различных напряжений

функцией вида  $I(t) = b - k * t$ . Т.к. 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.

Как видно из рис. 6, ток отличный от нуля наблюдается при подаче 0,4 В на барьер Шоттки. При этом остается некомпенсированная разность потенциалов на границе металла с полупроводником величиной 0,1 В, которую некоторые частицы способны преодолеть. Смещение барьерной разности потенциалов связано с наличием  $n-n^+$  перехода, разность потенциалов на котором  $\phi_{n-n^+} = 0,08 В$ .

На рис. 7 приведена динамика изменения потенциала на границе выпрямляющего контакта для различных значений концентрации в

приконтактной области. Из рисунка можно сделать вывод, что скорость установления барьера Шоттки пропорциональна уровню легирования

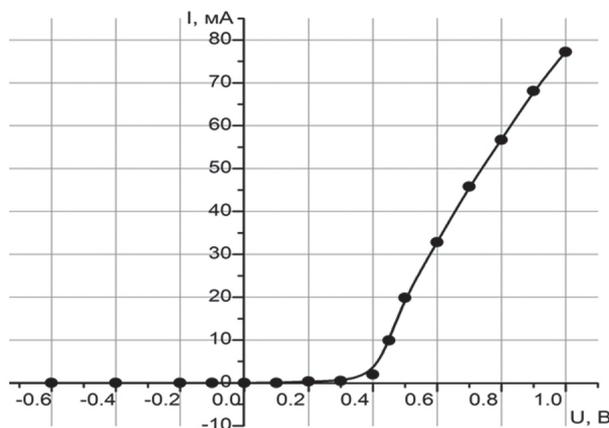


Рис. 6. ВАХ барьера Шоттки

полупроводника, однако следует принять во внимание, что при достаточно высокой концентрации примесных атомов в приконтактной области получить барьер Шоттки невозможно: такой контакт имеет омическую ВАХ вследствие эффектов квантового туннелирования [8].

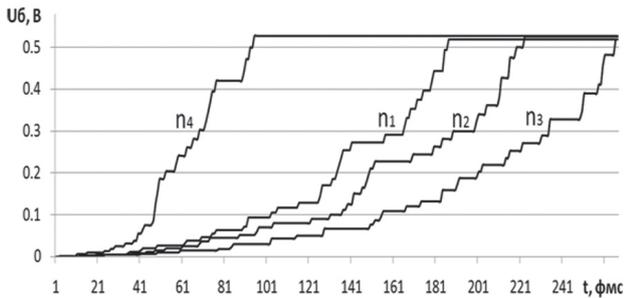


Рис. 7. Динамика изменения потенциала на границе выпрямляющего контакта для различных значений концентрации в приконтактной области:

$$n_1 = 10^{24} \text{ м}^{-3}; n_2 = 8 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3};$$

$$n_3 = 6 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}; n_4 = 2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$$

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена численная модель выпрямляющего контакта металл-полупроводник, учитывающая процессы токопереноса через П-образный потенциальный барьер на границе материалов, которая пригодна для вычислительных экспериментов при моделировании полупроводниковых приборов и структур.

Для верификации модели был проведен ряд вычислительных экспериментов, в результате которых получено распределение потенциала и макрочастиц в структуре, динамика изменения потенциала на границе выпрямляющего контакта для различных значений концентрации в приконтактной области и вольтамперная характеристика барьера Шоттки.

### Литература

[1] Аладьшин А.Ю. Туннельные явления в нанофизике. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2011. – 32 с.

[2] Данилов Ю.А., Демина П.Б., Дорохин М.В., Звонков Б.Н., Питиримова Е.А., Прокофьева М.М. Электролюминесценция диодов Шоттки Ni/AlAs/GaAs/InGaAs/GaAs // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2009, № 2. – С.44-48.

[3] Килесса Г.В., Асанов Э.Э., Зуев С.А. Предельные частотные характеристики ПТШ на GaAs при заданной геометрии // СгіМіСо – 2011: 21-ая Международная Крымская Конференция “СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии”. – Севастополь, 2011.

[4] Мамедов Р.К. Контакты металл-полупроводник с электрическим полем пятен. – Баку: «БГУ», 2003. – 230 с.

[5] Милнс А., Фойхт Д. Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. – М.: «Мир», 1975. – 432 с.

[6] Стриха В.И. Контактные явления в полупроводниках. – Киев: Выща школа. Головное изд-во, 1982. – 224 с.

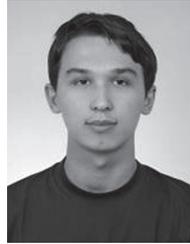
[7] Стриха В.И. Теоретические основы работы контакта металл-полупроводник. – К.: Наукова думка, 1974. – 263 с.

[8] Торхов Н.А., Еремеев С.В. Токоперенос в структурах Ме-n-n+ с барьером Шоттки. // Физика и техника полупроводников, 2000. – Т. 34, № 1. – С. 106-112.

[9] Хокни Р., Иствуд Д. Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987. – 638 с.

[10] 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.

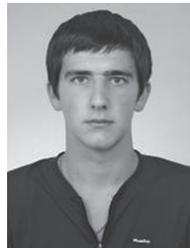
Поступила в редколлегию 16.05.2012



**Асанов Эрнест Эдемович**, бакалавр радиофизики и электроники, Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, 95007, Украина, Симферополь, пр. Вернадского, 4. Область научных интересов: физика полупроводников.



**Зуев Сергей Александрович**, канд. техн. наук, доцент кафедры радиофизики и электроники Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Область научных интересов: моделирование физических процессов в полупроводниковых приборах и структурах в кинетическом приближении.



**Килесса Григорий Владимирович**, бакалавр радиофизики и электроники Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Область научных интересов: численное моделирование полупроводниковых структур.



**Слипенко Николай Иванович**, профессор, д-р физ.-мат. наук, проректор по научной работе Харьковского национального университета радиоэлектроники. Область научных интересов: численное моделирование полупроводниковых структур.



**Старостенко Владимир Викторович**, профессор, д-р физ.-мат. наук, зав. каф. радиофизики и электроники Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Область научных интересов: моделирование физических процессов в вакуумных и твердотельных приборах, исследование воздействия импульсных электромагнитных полей на элементную базу, биологические объекты и среды.

УДК 621.382.323

**Чисельна модель бар'єру Шоткі** / Е.Е. Асанов, С.О. Зуев, Г.В. Килесса, Н.І. Слипченко, В.В. Старостенко // Прикладна радіоелектроніка: наук.-техн. журнал. – 2012. – Том 11. № 3. – С. 378–383.

У роботі представлено опис чисельної моделі контакту, що випрямляє, метал-напівпровідник. Для верифікації моделі було проведено ряд обчислювальних експериментів, у ході яких отримані результати, зокрема вольтамперна характеристика, що свідчать про достовірну роботу моделі.

*Ключові слова:* контакт метал-напівпровідник, бар'єр Шоткі, моделювання методом макрочастинок.

Л. 07. Бібліогр.: 10 найм.

UDC 621.382.323

**Numerical model of Schottky barrier** / E.E. Asanov, S.A. Zuev, G.V. Kilessa, N.I. Slipchenko, V.V. Starostenko // Applied Radio Electronics: Sci. Journ. – 2012. Vol. 11. № 3. – P. 378–383.

The paper presents a description of the numerical model of a rectifying metal-semiconductor contact. To verify the model developed a number of computing experiments have been conducted and results have been obtained, the current-voltage characteristic, in particular, which are evidence of the authentic operation of the model.

*Keywords:* metal-semiconductor contact, Schottky barrier, modeling by macroparticle method.

Fig. 07. Ref.: 10 items.