

В.А. Сминтина, О.А. Кулініч, М.А. Глауберман, Г.Г. Чемересюк, І.Р. Яцунский  
**Моделювання процесу струмопереносу в реальних структурах метал-кремній з бар'єром Шоткі**

*Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова, Навчально-науковий-виробничий центр  
вул. Маршала Говорова, 4, м. Одеса, Україна, 65063, e-mail: [eltech@elaninet.com](mailto:eltech@elaninet.com)*

В роботі на основі проведених за допомогою сучасних методів досліджень запропонована модель струмопереносу в реальних структурах метал-кремній в межах діодної та дрейфової теорій і основана на бар'єрних властивостях структурних дефектів і залежності рухливості носіїв зарядів від різних механізмів процесу розсіювання.

**Ключові слова:** кремній, метал, моделювання, струмоперенос.

*Стаття поступила до редакції 23.04.2005; прийнята до друку 15.11.2005*

Актуальність теми даного дослідження визначається добре відомим фактом відхилення експериментальних вольт-амперних характеристик структур метал-кремній з бар'єром Шоткі. Навіть, коли врахувати ефекти, які призводять до зміни параметрів бар'єру, в деяких випадках неможливо пояснити, чому на експерименті прямі вольт-амперні характеристики дають менші значення струму, ніж теоретично розраховані. Наявність великої щільності структурних дефектів в приповерхневих шарах кремнію може призвести до ефекту збільшення струму, що можна пояснити збільшенням провідності за наявності локалізованих дефектних чи домішкових преципітованих станів в забороненій зоні кремнію [1,2]. Але коли густина структурних дефектів не перевищує  $10^{12} \text{ м}^{-2}$  експериментальний струм не тільки не збільшується, а навпаки, в більшості випадків, зменшується.



**Рис. 1.** Електронне зображення досліджуваних контактів нікель-кремній з бар'єром Шоткі.

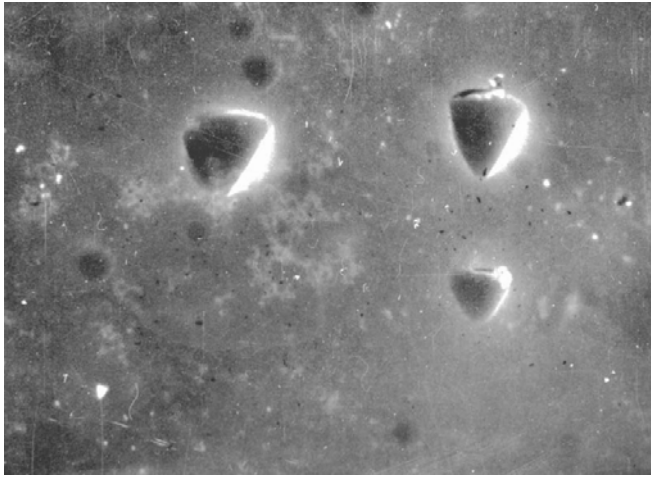
**Мета роботи:** метою роботи є встановлення: структурних та електрофізичних властивостей шарів кремнію на межі розподілу метал-кремній; визначення можливого впливу сторонніх домішок (кисню і т.д.) на властивості досліджуваних шарів кремнію; вивчення впливу цих шарів на електрофізичні характеристики структур метал-кремній з бар'єром Шоткі та запропонувати модель струмопереносу з врахуванням їх реальної структури.

**Об'єкт дослідження:** вивчалися структури нікель-кремній з бар'єром Шоткі, сформовані на пластинах кремнію КДБ – 10 (100) та КЕФ – 4,5(111) за звичайною планарною технологією (рис. 1).

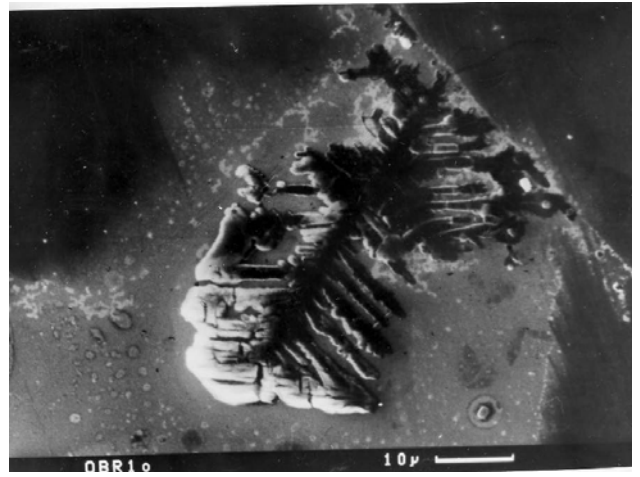
**Методи дослідження та обладнання:** поверхня кремнію після зняття металу досліджувалась методами оптичної (за допомогою металографічного мікроскопу MMP – 2P) та електронної мікроскопії (за допомогою електронного скануючого мікроскопу “Cam-Scan” з рентгенівським мікроаналізатором “Link – 860”), методом рентгенівської топографії Фудживара та за допомогою Оже-спектрометра LAS – 3000 (діаметр пучка – 5 мкм). З метою виявлення структурних дефектів, на поверхні кремнію проводилось пошарове з травлювання поверхні кремнію хімічними вибірковими травниками Секко (для поверхні 100) чи Сіртля (для поверхні 111) з попередньою обробкою в суміші Каро та перекисно-аміачному розчині [3].

## **I. Результати роботи та їх обговорення**

В більшості випадків за виникнення дефектів в структурах метал-кремній винні не тільки відхилення



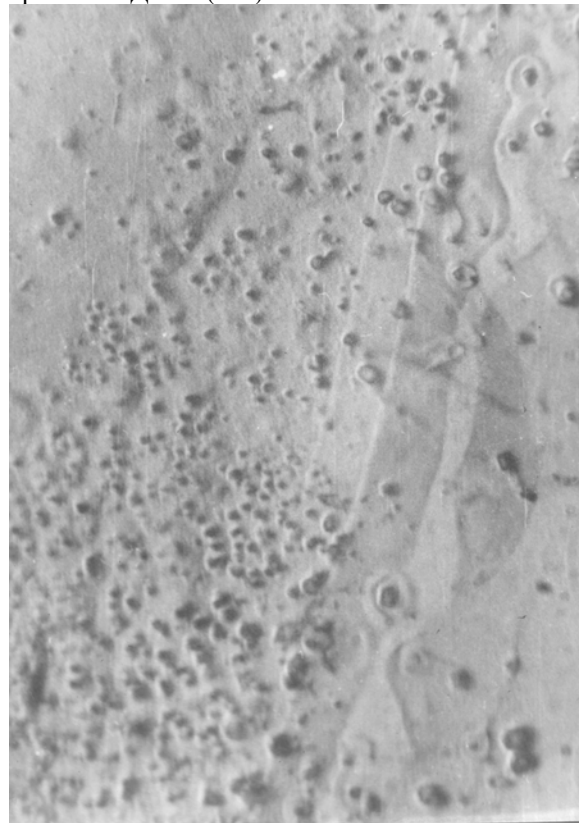
**Рис. 2.** Електронне зображення дислокацій на поверхні кремнію (метод провідності).



**Рис. 3.** Електронне зображення дендритів на поверхні кремнію КДБ-10 (100).



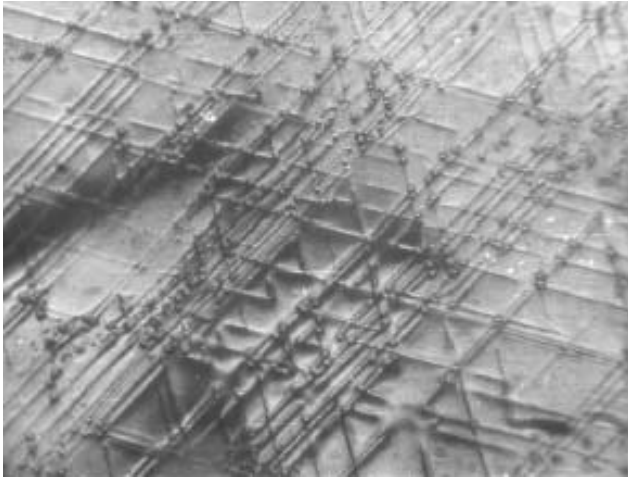
**Рис. 4.** Електронне зображення двійникових ламелей на поверхні кремнію КДБ-10 (100).



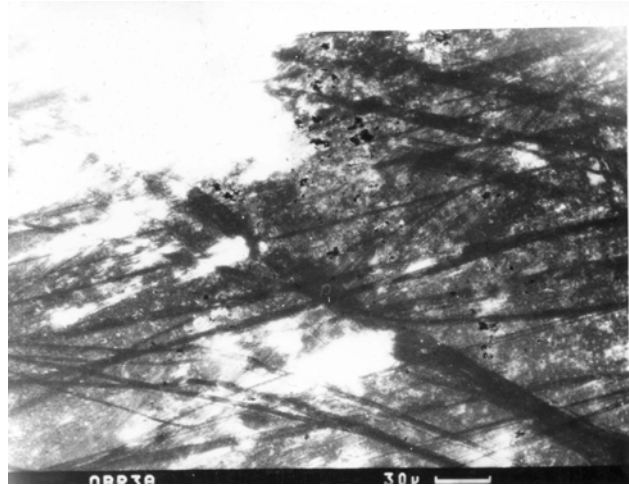
**Рис. 5.** Типове зображення поверхні кремнію КДБ-10 (100) після зняття шару нікелю та обробки травником Секко протягом 0,5 хвилини (отримане за допомогою мікроскопу ММР – 2Р).

параметрів технологічних процесів від заданих і різниця в параметрах металу і кремнію, а і дефектна структура у вихідному кремнію. На рис. 2 представлена електронна картина дефектів дислокаційного типу, отримана на поверхні кремнію типу КДБ – 10 (100) після обробки вибіркоким хімічним травником Секко протягом 2 хвилин. Картина отримана в режимі провідності, що дає можливість визначити області підвищеної (темні області) та зменшеної провідності (світлі області). В деяких випадках спостерігалась поява дендритів, які

складались з солі лужних металів (KCl) (рис. 3) та двійникових ламелей (рис. 4). На рис. 5 наведено типове зображення поверхні кремнію КДБ 10 (100) після зняття шару нікелю та обробки травником Секко протягом 0,5 хвилини, отримане за допомогою мікроскопу ММР – 2Р. Добре видно, що типові ямки травлення, які характерні для дислокацій та дефектів пакування, відсутні. Наявні на поверхні кремнію ямки пов'язувались з витравлюванням осередків металу, які виникають при прискореній термодифузії металу вздовж структурних дефектів кремнію.



**Рис. 6.** Електронне зображення дислокаційних сіток (отримано при травленні поверхні кремнію КДБ-10 (100) (3 хвилини) травником Секко).



**Рис. 7.** Електронне зображення окремих дислокацій та ліній сковазання при травленні 5 хвилин.

Спроби отримати зображення поверхні Si за допомогою електронного мікроскопу “Cam – Scan” виявились невдалими. Це пов’язано з тим, що при опромінюванні пучком електронів поверхня кремнію сильно заряджувалась і не було змоги отримати пучок відбитих електронів. Вище викладене свідчить, що досліджувані шари кремнію знаходяться у сильно розупорядкованому стані, який близький до дрібноблокованої або аморфної структури, та проявляють деякі діелектричні властивості. При дослідженні властивостей цієї дрібноблокованої структури рентгенівським топографічним методом Фудживара встановлено, що сусідні блоки розорієнтовані під кутами від  $0,051^\circ$  до  $0,062^\circ$ . Причому, підвищення фону в окремих місцях топограм пов’язувалось з присутністю домішок металу і (або) кисню, що також підтверджується результатами ОЖЕ-аналізу. При подальшому травленні поверхні кремнію (до 3 хвилин) травником Секко були виявлені дислокаційні сітки (густина дислокацій в сітках складала до  $10^{10} \text{ м}^{-2}$ ), які складались з  $60^\circ$  та часткових дислокацій, які були декоровані киснем (рис. 6). Виникаючі типові структурні дефекти свідчать про появу нормальної кристалічної структури Si. При травленні більш ніж 5 хвилин дислокаційні сітки зникали, а замість них проявлялися окремі дислокації та лінії сковазання (рис. 7). Встановлено, що товщини перехідних шарів, які склалися з розупорядкованого кремнію та областей дислокаційних сіток, пропорційні товщинам нанесеного металу, що зрозуміло, якщо пригадати, що збільшення товщини металу призводить до збільшення механічної напруги на межі розподілу, величина якої сильно перевищує поріг пластичної течії кремнію. На товщину перехідного шару також впливає наявність структурних дефектів на поверхні вихідного кремнію. Збільшення густини структурних дефектів призводить до збільшення кількості каналів прискореної дифузії при нанесенні металу, що і призводить до збільшення механічної напруги на

межі розподілу.

Отже, при розгляді процесу струмопереносу в структурах метал-кремній з бар’єром Шотткі необхідно врахувати наявність структурних дефектів і можливість їх впливу на провідність кремнію. Добре відомо, що присутність структурних дефектів в напівпровіднику впливає як на час життя, так і на час вільного пробігу носіїв заряду. Наприклад, в кремнії  $60^\circ$  дислокація утворює потенціальний бар’єр, висота якого, в основному, залежить від густини легуючої домішки та відстані між зарядами в ядрі дислокації. При розсіюванні носіїв заряду дислокаційними бар’єрами з густиною  $N$  рухливість  $\mu_{qd}$  можна розрахувати як [4]

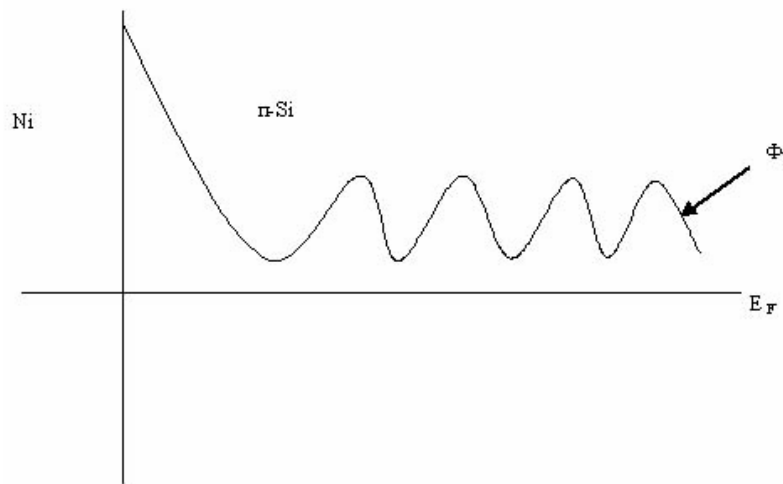
$$\mu_{qd} = 3q(8RNvm^*)^{-1}, \quad (1)$$

де  $q$  – заряд електрона,  $m^*$  – ефективна маса носіїв заряду,  $N$  – густина дислокацій,  $R$  – радіус просторового заряду дислокації,  $v$  – швидкість розсіяння електронів. Якщо не врахувати «інтерференцію» процесів розсіювання, результуючу рухливість можна записати як

$$\mu^{-1} = \mu_{qf}^{-1} + \mu_{qd}^{-1} + \mu_{qs}^{-1} + \mu_{qi}^{-1}, \quad (2)$$

де  $\mu$  – результуюча рухливість,  $\mu_{qs}$  – рухливість при розсіюванні на межах розподілу та поверхнях,  $\mu_{qi}$  – рухливість при розсіюванні на іонізованих домішках.

Отже, процес струмопереносу відбувається в присутності структурних дефектів дислокаційного типу, які сформовані в просторові сітки, та в присутності областей розупорядкованого кремнію. Експериментальні дослідження показують, що товщина області розупорядкованого кремнію значно менша ніж зона дислокаційних сіток, а опір при проходженні струму значно менший, ніж в області дислокаційних сіток. Таким чином, при розробці моделі струмопереносу крізь структури метал-кремній необхідно врахувати ту частину струмопереносу, яка відбувається в області знаходження дислокаційних сіток, а в якості наближення застосувати термоелектронну та дрейфово-дифузійну теорії. Вважаємо, що



**Рис. 8.** Енергетична схема структури металл –п-кремній з бар'єром Шотткі в присутності дислокаційних сіток

паралельно площині переходу метал-кремній розташовані  $L$  дислокаційних сіток з  $M$  дислокаціями в одній сітці. Відстань між дислокаціями, при їх найбільшій густині, менш ніж подвійний радіус просторового заряду дислокації. Енергетична схема структури метал-кремній з бар'єром Шоткі в присутності дислокаційних сіток представлена на рис. 8. Розглянемо, по-перше, процес струмопереносу в наближенні термоелектронної теорії. В рамках цієї теорії струмоперенос через область дислокаційних бар'єрів можна записати як

$$I = A^{**} T^2 S [\exp(qV/kT) - \exp(-qV/kT)] \exp(-\Phi_b/kT), \quad (3)$$

де  $A^{**}$  – модифікована постійна Річардсона,  $T$  – температура,  $V$  – падіння напруги в області просторового заряду бар'єра Шоткі,  $\Phi_b$  – висота дислокаційного бар'єру. Оскільки, вважається, що всі бар'єри мають однакову висоту такий струм буде проходити через всі паралельні дислокаційні сітки,  $S$  – площа контакту метал-кремній.

Стум, який тече крізь бар'єр Шоткі контакту метал-кремній буде визначатись як [5]

$$I_1 = A^{**} T^2 S [\exp(qV/kT) - 1] \exp(-\Phi_a/kT), \quad (4)$$

де  $\Phi_a$  – висота бар'єра Шоткі.

Оскільки дислокаційні бар'єри та бар'єр Шоткі “підключені” послідовно струми  $I$  та  $I_1$  однакові. Піднесемо вираз (3) до  $LM$  степеня, помножимо з виразом (4), видобуємо корінь  $LM+1$  степеня з отриманого виразу та запишемо вираз для струмопереносу через бар'єр Шоткі контакту метал-кремній в присутності дислокаційних сіток у вигляді

$$I_d = A^{**} T^2 S \exp[-(\Phi_a + LM \Phi_b)/(LM+1) kT] [\exp(qV/kT) - \exp(-qV/kT)]^{(LM/LM+1)} [\exp(qV/kT) - 1]^{1/(LM+1)}, \quad (5)$$

Вираз (5) можна застосувати при розрахунку впливу однієї дислокації на струмоперенос через контакт метал-кремній з бар'єром Шоткі. В цьому випадку вираз при  $M = L = 1$  можна записати у вигляді

$$I_d = A^{**} T^2 S \exp[-(\Phi_a + \Phi_b)/2 kT] [\exp(qV/kT) - \exp(-qV/kT)]^{(1/2)} [\exp(qV/kT) - 1]^{(1/2)}, \quad (6)$$

У випадки відсутності дислокацій вираз (5)

співпадає з виразом (4). Вирази (3), (4), (5), (6) отримані при припущенні, що модифікована постійна Річардсона однакова для дислокаційних бар'єрів та бар'єру Шоткі контакту метал-кремній. Прямий розрахунок цих постійних для вищезгаданих бар'єрів давав результат, який відрізнявся менш ніж на 1%.

Коли густина дислокацій така, що довжина вільного пробігу носіїв заряду ( $l$ ) менша ніж довжина зони просторового заряду ( $W$ ), один з критеріїв придатності термоелектронної теорії не виконується. В цьому випадку, для опису струмопереносу через контакт метал-кремній з участю дислокацій необхідно застосувати дрейфово-дифузійну теорію, а відношення прямих струмів з врахуванням дислокацій  $I_d$  та без них  $I$  можна записати як

$$I_d / I = \mu_{dq} / (\mu_{dq} + \mu_0), \quad (7)$$

де  $\mu_{dq}$  – рухливість носіїв зарядів при розсіюванні на дислокаціях (описується виразом (1)),  $\mu_0$  – рухливість носіїв зарядів без врахування розсіювання на дислокаціях. Розрахунки довжини просторового заряду контакту нікель-кремній з бар'єром Шоткі та довжини вільного пробігу для кремнію КЕФ-4.5 (111) показують, що при щільності дислокацій  $10^{12} \text{ м}^{-2}$  (що на порядок більше виявленої густини дислокацій в сітках) ці величини одного порядку ( $W \sim l$ ). Це означає, що при виявленої густини дислокацій ( $10^{10} \text{ м}^{-2}$ ) довжина вільного пробігу набагато більша ніж довжина зони просторового заряду контакту метал-кремній з бар'єром Шоткі і при описі струмопереносу з участю дислокацій має бути застосовано наближення термоелектричної теорії (вираз (5)).

## Висновки

Таким чином, при моделюванні процесу струмопереносу через контакти метал-кремній з бар'єром Шоткі в присутності дислокацій з крайовою межею необхідно знати не тільки параметри потенційного бар'єра Шоткі та параметри кремнію, а,

також, основні параметри дислокацій – вид, густина дислокацій, висоти потенційних бар'єрів, положення енергетичних рівнів дислокації в забороненій зоні кремнію (для розрахунку степені заповнення дислокаційних рівнів носіями заряду, радіусу дислокаційних циліндрів та висоти потенційних бар'єрів дислокацій).

Залишається відкритим питання моделювання взаємодії преципітованої домішки на параметри дислокацій. Можна сказати, що виявлений за допомогою ОЖЕ та рентгенівського методів кисень розташований біля ядер дислокацій, в місцях знижених значень деформаційного потенціалу, та може взаємодіяти з “ненасиченими” або “вільними” зв'язками дислокацій з появою нових енергетичних

рівнів в забороненій зоні кремнію, таким чином змінюючи електричну активність дислокацій.

**Сминтина В.А.** – доктор фізико-математичних наук, професор, академік, ректор ОНУ ім. І.І. Мечникова;

**Кулініч О.А.** – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Навчально-науково-виробничого центру при ОНУ;

**Чемересюк Г.Г.** – професор, декан фізичного факультету;

**Глауберман М.А.** – кандидат фізико-математичних наук, директор ННВЦ при ОНУ;

**Яцунский І.Р.** – студент 5-го курсу фізичного факультету

- [1] К. Рейви. *Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии*. М. Мир. (1984)
- [2] В.И. Стриха, Е.В. Бузанева. *Физические основы надежности контактов металл-полупроводник в интегральной электронике*. М. Радио и связь (1987).
- [3] О.А. Кулинич, А.А. Лисовская, Н.Н. Садова. О повышении выявляющей способности избирательного травления монокристаллов кремния // *УФЖ*, **35**(11), сс. 1691-1695 (1990).
- [4] Г. Матаре. *Электроника дефектов в полупроводниках*. М. Мир (1974).
- [5] Зи С. *Физика полупроводниковых приборов*. Ч.1. М. Мир (1984).

V.A. Smyntyna, O.A. Kulinich, M.A. Glauberman, G.G. Chemeresuk, I.R. Yacunsky

## Process Current Flow Modeling in Real Metal-Silicon Structures with Schottky's Barrier

*Training, Scientific-Investigation and Production Center at Mechnikov Odesa National University  
4 Marshala Govorova Str., Odesa, 65063, Ukraine, e-mail: [eltech@elaninet.com](mailto:eltech@elaninet.com)*

The process current flow modeling in real metal – silicon structures with used modern method of research in limits of diffusion and thermoelectric theories and used on barrier properties of the structural defects and carrier mobility depending on different mechanisms of the scattering has been proposed.