

КИЕВСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Т.Г.Шевченко

На правах рукописи

КОРОЛЬ Анатолий Николаевич

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ
НА ХАРАКТЕРИСТИКИ КОНТАКТА МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК

01.04.10 – физика полупроводников и
диэлектриков

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

К И Е В

1 9 7 9

Работа выполнена на кафедре физики полупроводников радиофизического факультета Киевского ордена Ленина госуниверситета им.Т.Г.Шевченко

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
проф. Стриха В.И.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
проф. Шейнкман М.К.
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Гольдберг Ю.А.

Ведущее предприятие: Одесский государственный университет
им.И.И.Мечникова

Защита диссертации состоится *24 Октября* 1979г.
в *15* час. в ауд. *46* на заседании специализированного совета
К 068.18.01 в Киевском государственном университете (252127, г.Киев,
просп. 40-летия Октября, 130, радиофизический корпус)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке КТУ.

Автореферат разослан *24 ноября* 1979г.

Ученый секретарь
специализированного совета

Вер

Воронцов В.И.

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

1. Актуальность работы. Проблема глубоких уровней содержит два тесно связанных между собой аспекта. Первый связан с влиянием глубоких уровней на физические свойства полупроводников и на характеристики полупроводниковых приборов. Это влияние весьма разнообразно и существенно, ввиду чего его изучение неизбежно и интенсивно расширяется. Такие исследования преследуют важную для промышленности цель по созданию полупроводников и полупроводниковых приборов с заданными свойствами /1/. Во втором аспекте глубокие центры являются непосредственным объектом исследования, которое имеет определенное научно-познавательное значение; оно поддерживается тем обстоятельством, что несмотря на многочисленные работы и достигнутые успехи еще далеко не завершено теоретическое и экспериментальное изучение появления и существования таких центров.

В данной работе рассматривается влияние глубоких состояний на характеристики контакта металл-полупроводник /КМП/. Эта структура не случайно выбрана в качестве объекта исследования. Контакт металл-полупроводник неизбежно возникает практически во всех физических исследованиях, в которых участвуют полупроводники /либо в качестве пассивного, либо активного элемента/. Его свойства изучаются и используются уже в течение многих лет, но в последнее время роль КМП резко возросла. Это связано в первую очередь с широким использованием КМП в современной микроэлектронике. Достаточно, например, упомянуть о том, что КМП является базовым элементом современных больших интегральных схем в микро-ЭВМ.

Работы, в которых изучалось влияние глубоких уровней на свойства КМП, основывались в подавляющем большинстве своем на модели тесного контакта, т.е. модели КМП, в которой между контактирующими металлом и полупроводником не существует промежуточного слоя. В то же время сейчас общепринятой /и экспериментально подтвержденной/ является модель КМП с тонким промежуточным слоем. В связи с этим в настоящей работе в первую очередь ставится задача исследовать влияние глубоких уровней на характеристики контакта металл-тонкий промежуточный слой - полупроводник.

До сих пор изучение влияния глубоких уровней на свойства КМП проводилось в основном с помощью феноменологического подхода: этот подход для многих целей достаточен и в то же время является общим с той точки зрения, что детализация используемых в нем феноменологических параметров может быть различной и зависит, в частности, от конкретной модели глубокого центра.

В то же время рассмотрение изучаемого влияния должно, вообще говоря, базироваться на микротеоретических расчетах; такие расчеты позволили бы связать выражения для характеристик КМП с параметрами микротеории, используемыми в той или иной модели построения глубоких состояний. Это в первую очередь необходимо при описании роли глубоких примесей как центров захвата и эмиссии носителей заряда.

2. Подытоживая, можно сказать, что целью настоящей работы является: во-первых, изучение влияния глубоких уровней на электрофизические характеристики контакта металл-полупроводник с тонким промежуточным слоем на основе общего феноменологического подхода; во-вторых, построение модели глубокого состояния и использование ее для детального анализа указанного выше влияния.

3. Научная новизна. Впервые изучено влияние глубоких центров на вольтамперные, вольтфарадные, шумовые характеристики контакта металл-тонкий промежуточный слой - полупроводник и установлено существенное отличие этого влияния от того, которое имеет место в тесных КМП. Впервые количественно описан туннельный резонансный ток /с промежуточным захватом электронов на глубокие центры/ в контакте металл-полупроводник.

Предложена новая модель глубокого центра в узкозонных кубических полупроводниках. Ее расчет потребовал исследования диэлектрического экранирования заряженного центра в таких полупроводниках, которое и было проведено впервые.

4. Основные положения, выносимые на защиту

Характер и особенности влияния глубоких уровней на вольтамперные, вольтфарадные, шумовые характеристики КМП с тонким промежуточным слоем; новая модель глубокого состояния до-

норного типа в узкозонных кубических полупроводниках;

характер и особенности диэлектрического экранирования заряженного центра в таких полупроводниках;

результаты расчета времени жизни глубокого состояния и туннельного резонансного механизма релаксации глубокого состояния в КМП;

результаты расчета туннельного резонансного тока в КМП.

5. Апробация работы. Материалы диссертации докладывались на Совещании по глубоким центрам в полупроводниках /г.Одесса, 1972 г./, Восьмом совещании по теории полупроводников /г.Киев, 1975 г./, конференциях "Полупроводниковые приборы с барьером Шоттки" /г.Киев, 1975 г., г.Одесса, 1978 г./, Девятом совещании по теории полупроводников /г.Тбилиси, 1978 г./.

6. Публикации. Основные результаты диссертации отражены в 7 статьях, напечатанных в журналах "*Physica Status Solidi*", "Физика твердого тела", "*Solid State Electronics*", "Физика и техника полупроводников", "Полупроводниковая техника и микроэлектроника", сборника статей "Физические процессы в полупроводниковых приборах с барьером Шоттки" и 4 публикациях по материалам докладов на Всесоюзных и республиканских совещаниях и конференциях.

7. Практическая ценность и рекомендации по дальнейшему использованию полученных результатов. Полученные в диссертации результаты позволили объяснить некоторые закономерности работы КМП, в том числе объяснен ход обратных ветвей ВАХ силовых диодов с барьером Шоттки, наличие особенностей /экстремумов/ в зависимости параметра, описывающего выпрямляющие свойства КМП, от напряжения, установлен один из возможных механизмов образования низкочастотного избыточного шума в диодах Шоттки, сделаны выводы относительно некоторых практических преимуществ, которыми обладают КМП с тонким промежуточным слоем перед контактами без такого слоя. Практическую ценность имеют и другие результаты диссертации, прежде всего

расчеты туннельного резонансного тока в КМП. В частности, эффект независимости туннельного резонансного тока от температуры следует использовать при разработке чувствительных тензометров. На туннельных резонансных токах может быть также создан диод с лучшими выпрямляющими свойствами, чем диод, в котором преобладающей является термоэмиссионная составляющая тока.

8. Объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитированной литературы. Работе изложена на 158 страницах машинописного текста, включающего список цитируемой литературы /161 наименований/, 1 таблицу и 22 рисунков.

П. КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы по вопросам, близким к затронутым в основной части. Краткое содержание оригинальных 2-4-й глав последовательно приводится ниже.

1. Феноменологическое описание влияния глубоких уровней на электрофизические характеристики контакта металл-промежуточный слой-полупроводник

Энергетическая модель контакта металл-промежуточный слой - полупроводник, представлена на рисунке 1. Между металлом и полупроводником существует слой диэлектрического вещества толщиной d , создающий потенциальный барьер, который носители заряда преодолевают либо туннельным путем, либо приобретая соответствующую энергию. Рассматривается запорный контакт металла с полупроводником n типа; силами изображения, по верхностными состояниями, носителями противоположного знака пренебрегается /формулы с их учетом при необходимости можно получить, используя монографию [2].

Одной из наиболее важных характеристик КМП, на которую оказывает влияние глубокие уровни, является вольтамперная характеристика I/VAX . Ее удобно анализировать с помощью параметра, определяющего дифференциальный наклон VAX [2]:

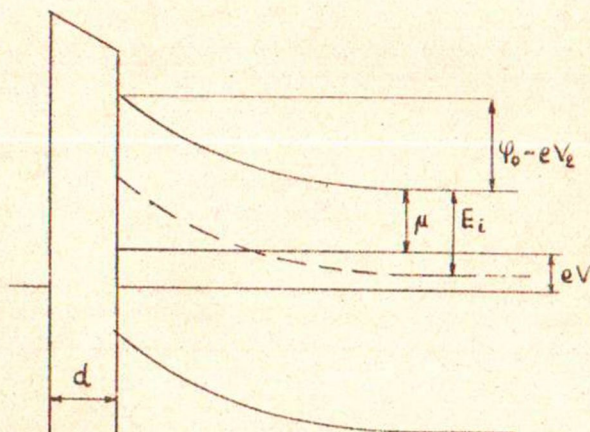


Рис.1. Энергетическая диаграмма контакта металл-промежуточный слой - полупроводник с глубоким уровнем

$$\alpha(V) = \frac{e}{kT} \frac{dV_2}{dV} = \begin{cases} \frac{d \ell n J}{dV}, & V > 0 \\ \frac{e}{kT} - \frac{d \ell n J}{dV}, & V < 0 \end{cases} \quad /1/$$

здесь V_2 , V - падение напряжения на полупроводнике и общее приложенное напряжение. Выражение для параметра α находилось в диссертации с помощью уравнения Пуассона и условия непрерывности нормальной составляющей вектора электромагнитной индукции на границе раздела полупроводник-промежуточный слой. При этом предполагалось, что в области пространственного заряда /ОПЗ/ полупроводника мелкие уровни полностью ионизированы, и кроме того существует набор равномерно распределенных в пространстве глубоких донорных центров с потенциалами ионизации E_i ; последние считались полностью ионизированными в области, где они расположены выше уровня химического потенциала μ . Предполагалось также, что к диоду приложено внешнее напряжение либо низкой частоты, т.е. такой, что все глубокие уровни успевают перезарядаться, либо высокой-такой, что часть глубоких уровней успевает "следить" за частотой, а часть не успевает. Выражения для α в случае одного мелкого и одного глубокого уровней и низкой частоты внешнего сигнала имеют следующий вид:

если: $\varphi_0 - eV_2 < E_i - \mu$, $\alpha = \frac{e}{kT} \left\{ 1 + \frac{d}{\varepsilon_1} \left[\frac{2\pi \varepsilon_2 n}{\varphi_0 - eV_2} \right]^{1/2} \right\}^{-1}$, /2/

если $\varphi_0 - eV_2 \geq E_i - \mu$,
 $\alpha = \frac{e}{kT} \left\{ 1 + \frac{d}{\varepsilon_1} (n+N) \left[\frac{2\pi \varepsilon_2}{(\varphi_0 - eV_2)(n+N) - (E_i - \mu)N} \right]^{1/2} \right\}^{-1}$, /3/

где φ_0 - высота потенциального барьера, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ - диэлектрические постоянные промежуточного слоя и полупроводника соответственно, n и N - концентрации мелких и глубоких примесей соответственно. Качественно зависимость $\alpha(V)$ представлена на рис.2. Главная особенность изображенной кривой состо-

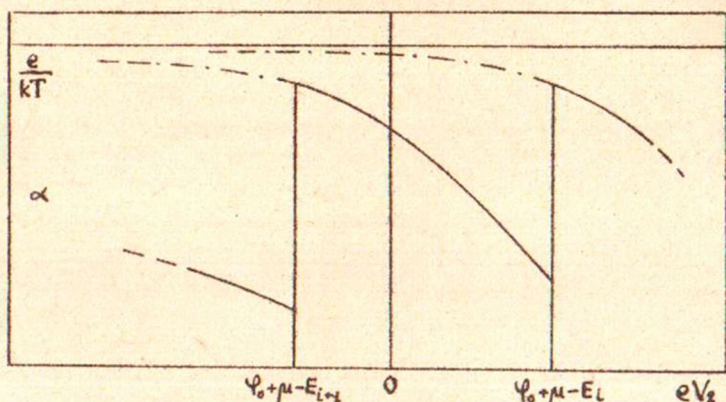


Рис.2. Качественная зависимость величины $\alpha = \frac{d \ln J}{dV}$ от напряжения V_2 .

ит в том, что она имеет скачки /экстремумы при $T \neq 0$ / в точках $V_2^i = \varphi_0 + \mu - E_i$. Возникновение этих скачков вызвано ступенчатообразными изменениями плотности заряда в ОПЗ при напряжениях таких, что $E_i - \mu = \varphi_0 - eV_2$. Использование статистики Ферми-Дирака при нулевой температуре приводит к острой форме указанных скачков. С ростом частоты модулирующего сигнала

экстремумы в зависимости $\alpha(V)$ сглаживаются и исчезают, когда $\omega \gg \tau_i^{-1}$ (τ_i - время релаксации i -й примеси). Конечному результату сглаживания соответствует штриховая линия на рис.2. Отметим, что экстремумы функции $\alpha(V)$ могут располагаться в любой точке оси напряжений; если при нулевом смещении глубокий уровень не пересекается с уровнем Ферми, то экстремумы $\alpha(V)$ возникают при подаче отрицательного смещения, в противном случае указанные экстремумы находятся в области прямых смещений. Из выражений /2/ и /3/ следует важный вывод: при конечной толщине промежуточного слоя исследование зависимостей $\alpha(V)$ может служить для определения параметров глубоких центров в объеме полупроводника. Причем видно, что чем толще промежуточный слой, тем сильнее влияние глубоких уровней на параметр $\alpha(V)$. Если же $d = 0$, т.е. в случае тесного контакта, влияние глубоких уровней на параметр $\alpha(V)$ не имеет места. Т.о. здесь проявляется существенное различие между КМП с промежуточным слоем и тесным КМП. Отметим, наконец, что данные низкочастотных измерений дают более точные результаты, поскольку точки разрывов в зависимостях $\alpha(V)$ в этом случае непосредственно определяют потенциалы ионизации глубоких уровней.

Аналогичным образом можно исследовать и влияние глубоких уровней на вольт-фарадные характеристики КМП. Зависимость функции $C^{-2}(V)$, где C - емкость ОПЗ полупроводника качественно представлена на рис.3. В точках, соответствующих энергетическим положениям примесных уровней, эта функция терпит разрывы, величина которых зависит от соотношения концентраций примесей; участки между точками разрывов имеют линейный характер. Таким образом, емкостные свойства диодов Шоттки, содержащих промежуточный слой, существенно зависят от наличия глубоких примесей. Анализ этих свойств дает информацию о параметрах глубоких уровней. Нам хотелось бы подчеркнуть, что когда промежуточный слой достаточно толст, основная информация о глубоких уровнях содержится в $\alpha(V)$ зависимостях, так как в предельном случае $d \rightarrow \infty$ глубокие примеси не оказывают влияния на ем-

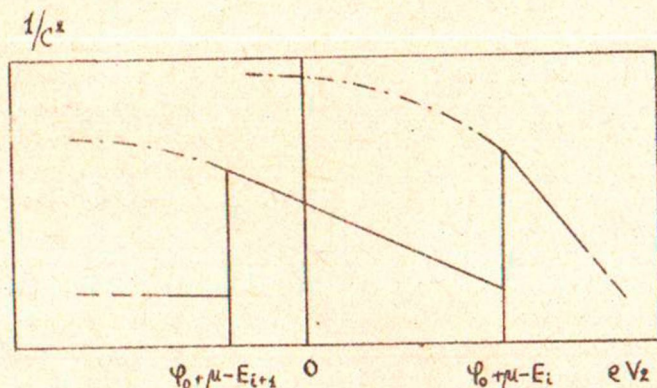


Рис.3. Качественная зависимость величины C^{-2} от напряжения V_z . C - емкость ОПЗ.

кость контакта, которая становится равной емкости промежуточного слоя. Следует также отметить, что совместное использование вольтамперных и вольтфарадных измерений дает более точные и надежные результаты при анализе влияния глубоких уровней на характеристики КМП.

При решении вопросов, аналогичных затронутым выше, уровень Ферми обычно считается постоянной, не зависящей от пространственной координаты величиной. Это предположение справедливо для диодной теории выпрямления, но нуждается в специальном рассмотрении в случае выполнения диффузионной теории выпрямления в КМП. На основе диффузионно-дрейфовых уравнений в работе найдена зависимость квазиуровня Ферми от пространственной координаты в ОПЗ полупроводника. Оказалось, что если к контакту приложено прямое смещение, то отклонением квазиуровня Ферми от его объемного значения μ_0 можно пренебречь. В этом случае анализ влияния глубоких доноров на ВАХ и емкость КМП с тонким промежуточным слоем, проведенный в предположении постоянного уровня Ферми, остается справедливым. Если же к контакту прило-

жено обратное смещение, то как показал расчет, указанное отклонение может быть существенным. Это обстоятельство необходимо учитывать при анализе ВАХ и емкости КМП, используя в соответствующих формулах вместо постоянного значения уровня Ферми зависящее от пространственной координаты значение $\mu(x)$. В частности, если имеется эксперимент по влиянию глубоких уровней на $\alpha(V)$ и $C(V)$ характеристики КМП, то потенциал ионизации глубоких центров, определяемый из этих характеристик при $V < 0$, равен не $E_i = \Phi_0 + \mu_0 - V_2^i$, а $E_i = \Phi_0 + \mu(x=0) - V_2^i$, где V_2^i - напряжение, при котором происходит разрыв функции $\alpha(V) / C^{-2}(V)$. Одним из вопросов, решаемых в диссертации, относится ко влиянию глубоких уровней на избыточные шумы в КМП. Изучается низкочастотный шум типа $1/f^\alpha$ и предлагается следующий механизм его образования: возникает флуктуация заряда на глубоком уровне в ОПЗ, она приводит к флуктуации падений напряжения на промежуточном слое и в обедненном слое, что в свою очередь приводит к возникновению флуктуации тока в диоде в случае короткого замыкания, или к флуктуации общего напряжения в режиме холостого хода. Шумовой спектр ищется с помощью известного выражения [3], в котором флуктуирующая величина зависит от механизма релаксации флуктуации заряда. В диссертации сначала рассматривается механизм Шокли-Рида-Холла, в котором не учитывается конкретная модель глубокого центра /далее рассматривается более специальный случай/.

Численный расчет окончательных выражений показывает, что спектр типа $1/f^\alpha$, где α близко к единице, может охватывать различные участки на оси частот в зависимости от параметров задачи, но с небольшим общим интервалом /в пределах порядка/. Величина шума диода зависит от толщины промежуточного слоя, возрастая с увеличением толщины. Изучаемый шум исчезает при $d \rightarrow 0$, откуда следует, что данный механизм шумообразования может проявиться только в КМП с промежуточным слоем, но не в тесных контактах. Расчет показывает, что флуктуация тока в случае контакта с зазором, а значит и шум, может значительно превосходить величину шума в тесном контакте.

2. Модель глубокого примесного состояния в ³уловонных кубических кристаллах

При дальнейшем анализе влияния глубоких уровней на характеристики КМН необходимо использовать конкретную модель глубокого центра. Поскольку речь идет о примесном центре, то и расчет экранированного потенциала примеси, и расчет собственно примесного состояния должны основываться на одной и той же модели зонной структуры полупроводника. В качестве такой основы в работе используется нейновская модель зонной структуры, в которой непосредственно взаимодействующие электронная и три дырочных зоны имеют экстремумы в центре зоны Бриллюэна и разделены в нем небольшой энергетической щелью. Ввиду того, что глубокое состояние может иметь малый радиус, вычисления экранированного потенциала примеси должны учитывать пространственную зависимость диэлектрической проницаемости в достаточно широком диапазоне изменения пространственной координаты. Расчет безынерционной части диэлектрической проницаемости основывается в работе на методе самосогласованного поля [4]. В настоящей работе последовательно учтены виртуальные переходы между зонами тяжелых и легких дырок и зоной проводимости, и между спинотщепленной зоной и зоной проводимости. Числа заполнения положены равными либо единице, либо нулю. Получены явные выражения для оптической диэлектрической проницаемости, т.е. для ϵ при $q \rightarrow 0$ / q - волновое число / в случаях нулевой и бесконечной спинорбитальной щели Δ , причем результаты точных расчетов показали, что ϵ очень слабо зависит от Δ . Главный член в диэлектрической проницаемости равен

$$\epsilon(q \rightarrow 0) \approx \frac{\delta}{3\pi\rho} \ln \frac{4\rho\alpha}{E_g} \quad /4/$$

где ρ - матричный элемент импульса, E_g - минимальная ширина запрещенной зоны, α - радиус сферы, равной по объему первой зоне Бриллюэна. Т.о. получена аналитическая зависимость ϵ от таких параметров зонной структуры, как ширина запрещенной зоны, постоянная решетки / $\alpha \sim a^{-1}$ /; эффективная масса носителей заряда /через ρ /. Логарифмическая зависимость ϵ от E_g предсказана впервые и отличается от известной в литературе зависимости типа $\epsilon \sim E_g^{-2}$. Сравнение расчетных значений $\epsilon(0)$ с

экспериментальными даст весьма неплохое согласие /см. нпр. для $Jn Sb$ на рис.4/.

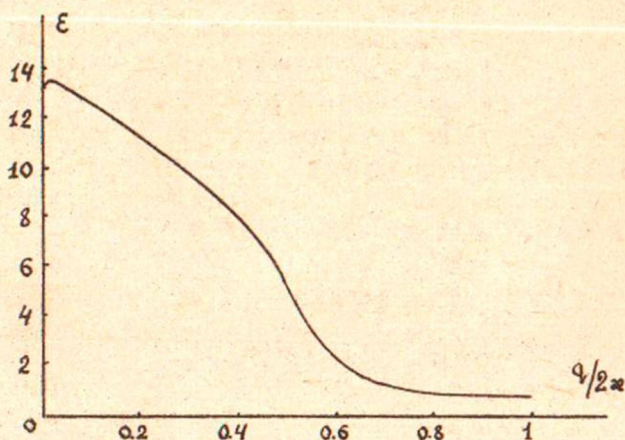


Рис.4. Диэлектрическая функция кристалла $Jn Sb$.

Функция $\epsilon(q)$ при $q \neq 0$ рассчитана численно и представлена на рис.4. для кристалла $Jn Sb$. Аналитически показано, что эта функция имеет особенности в точках $q = \infty$ и $q = 2\pi$. Эти особенности: логарифмическая и скачок четвертой производной, проявляются при построении координатной зависимости экранированного потенциала примеси. Такой потенциал имеет осциллирующий характер; т.о. в полупроводнике, зонная структура которого описывается кейновской схемой, возникает явление, известное как гало заряда вокруг кулоновского центра.

Наличие диэлектрической функции $\epsilon(q)$ позволяет построить глубокое примесное состояние, которое получено в работе методом, близким к методу Костера-Слэтера. Возмущающий потенциал в уравнении Шредингера описывается с помощью модельного псевдопотенциала Хейне-Абаренкова [5]. Локализованный характер экранированного потенциала предопределяет использование в качестве базисных - функций Ванье. Показано, что в общем уравнении Дайсона для искомой функции Грина наиболее существенным является учет ближайших к примесному узлов решетки. Оказалось,

что существуют решения для собственных значений энергии, лежащих в запрещенной зоне; величина потенциала ионизации весьма чувствительна к параметрам псевдопотенциала. Т.о.использованная методика, основанная на расчете экранированного псевдопотенциала и энергетического спектра примеси на базе единой модели зонной структуры /кейнговская модель/ позволила получить глубокие примесные состояния донорного типа, имеющие сильнолокализованный характер.

8. Исследование влияния глубоких уровней на характеристики КМП с использованием конкретной модели глубокого центра

Используя построенную модель глубокого состояния, можно получить некоторые новые результаты по расчету характеристик КМП, на которые оказывают влияние глубокие уровни. Прежде всего следует остановиться на определении времени жизни глубокого состояния, т.к. эта величина является весьма важной характеристикой электронных процессов в полупроводниках, и используется нами в дальнейшем. В работе предлагается туннельный механизм релаксации глубокого состояния, т.е. механизм, при котором примесный электрон переходит в зону проводимости полупроводника изоэнергетически, и проводится сравнение с другими механизмами релаксации. Рассматривается уравнение Шредингера для примесного электрона в ОПЗ полупроводника:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + V_p + \varphi(x) + V_i \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad /5/$$

где V_p - периодический потенциал кристалла; V_i - потенциал примеси, а $\varphi(x)$ - задает потенциальный барьер ОПЗ: $\varphi(x) = \varphi_0 / (1 - \frac{x}{L})^2$, причем показано, что результаты расчета практически не зависят от выбора функции $\varphi(x)$ при $x > L$, L - длина слоя Шоттки.

В качестве потенциала примеси V_i используем модельный потенциал, рассмотренный выше. Сильная локализация такого потенциала, связанная с особенностями диэлектрического экранирования на малых расстояниях, позволяет выразить вероятность ионизации глубокого состояния следующим образом

$$\Gamma = \left. \frac{J_m G^*(z_i, z_i, E)}{\frac{\partial}{\partial E} \operatorname{Re} G^*(z_i, z_i, E)} \right|_{E_i} \quad /6/$$

Здесь z_i - трехмерная координата примеси, $J_m G^*$ и $\operatorname{Re} G^*$ соответственно мнимая и реальная части функции Грина уравнения /5/, в котором отсутствует потенциал V_i . Вычислив мнимую и реальную части функции Грина /с использованием решения уравнения Шредингера /5/ без члена V_i /, получаем выражение для Γ в аналитическом, хотя и громоздком виде. Связь между τ и Γ для случая туннельного перехода найдена на основании статистики Шокли-Рида-Холла. Расчет показывает, что Γ очень резко зависит от того, в каком месте ОПЗ находится примесь. Область изменения величины Γ и соответственно времени жизни τ очень велика - время жизни неравновесного носителя заряда, захваченного на глубокий центр, может составлять как десятки секунд, так и доли секунды порядка 10^{-15} сек. в зависимости от формы потенциального барьера, а также энергетического и пространственного местоположения примеси. Это обстоятельство существенно выделяет рассматриваемый механизм релаксации среди других /эксовский каскадный, излучательный, столкновительный и др., см. [1], в которых не достигается столь широкий спектр времен жизни.

Возможность реализации весьма малых значений времени жизни дает основания предположить, что в КМП важную роль может играть туннельный резонансный механизм токопрохождения. В диссертации рассматривается такой механизм и рассчитывается туннельный ток по каналу: зона проводимости металла - глубокий донор в ОПЗ полупроводника - зона проводимости полупроводника. При вычислении туннельного резонансного тока /ТРТ/ использовались результаты расчета глубокого состояния, а также результаты работы [6]. Следует отметить, что ТРТ может быть существенным в основном при обратных напряжениях. Выражения для ТРТ в двух наиболее важных случаях имеют следующий вид /для линейного потенциала в ОПЗ/:

$$J = D N k T \left(\frac{2}{E_i m^*} \right)^{1/2} e^{-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{q} E_i^{3/4} - \frac{\varphi_0}{kT}} \left(e^{\frac{2^{1/2} E_i}{kT}} - e^{\frac{E_i}{kT}} \right), \quad /7/$$

$$J = D N \left(\frac{2}{E_i m^*} \right)^{1/2} e^{-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{q} E_i^{3/4}} \left\{ \left(2^{1/2} E_i - \varphi_0 \right) + kT \left(1 - e^{-\frac{\varphi_0 - E_i}{kT}} \right) \right\}. \quad /8/$$

Здесь $\mathcal{F}$ - напряженность электрического поля, φ_B - расстояние от уровня Ферми металла до вершины потенциального барьера, N - концентрация глубоких центров. Расчет по формулам /7/, /8/ показывает, что туннельный резонансный ток в КМП может быть весьма существенным /превышать термоэмиссионный ток/ в широком диапазоне значений параметров задачи, в том числе температуры. Следует обратить особое внимание на выражение /8/, из которого видно, что ТРТ может практически не зависеть от температуры; это является интересным с точки зрения технического использования выводом. Причем надо отметить, что в КМП с промежуточным слоем реализуются более выгодные условия для проявления этого эффекта - независимости тока от температуры, чем в тесном контакте. В работе также рассчитан ТРТ в случае ступенчатого распределения глубоких примесей.

Рассмотренный выше туннельный механизм релаксации глубокого состояния дал возможность получить новые выражения для низкочастотного избыточного шума в КМП. Расчет показал, что спектр шума типа $1/f^a$, где a близко к единице, в случае туннельного механизма рассасывания флуктуации заряда занимает значительно больший /более двух порядков/ интервал значений частот, чем в случае механизма Шокли-Рида-Холла; такой большой интервал, как известно, лучше соответствует экспериментально наблюдаемым фактам. Другие отличия между этими двумя случаями несущественны.

В конце диссертации приведено сравнение полученных в ней выводов с результатами ряда экспериментальных работ.

ВЫВОДЫ

1. На основе метода самосогласованного поля проведен расчет диэлектрической проницаемости для полупроводников, к которым применима кейновская модель зонной структуры. Для оптической диэлектрической постоянной получено неплохое согласие с экспериментом. Впервые показано, что зависимость диэлектрической постоянной от ширины запрещенной зоны для рас -

считываемых полупроводников имеет логарифмический вид. Ос-
новной вклад в диэлектрическую постоянную вносят виртуальные
переходы между зоной проводимости и зоной тяжелых дырок.

2. Показано, что диэлектрическая функция имеет особен-
ности в точках $q = \pi$ и $q = 2\pi$, где π - радиус сферы, рав-
ной по объему первой зоне Бриллюэна. Наличие этих особеннос-
тей приводит к осцилляциям экранированного потенциала примес-
ного центра и плотности заряда вокруг этого центра - т.е. опи-
сано явление гала заряда.

3. Построены глубокие примесные состояния /примеси за-
мещения/ в полупроводниках типа A_3B_5 на основе метода Костера-
Слатера с использованием экранированного псевдопотенциала ти-
па Хейна-Абаренкова. Показано, что потенциал ионизации примес-
ного центра оказывается весьма чувствительным к параметрам
используемого псевдопотенциала. Глубокое состояние описы-
вается сильнолокализованной волновой функцией.

4. Использование предложенной в работе модели глубокого
состояния позволило вычислить время жизни /сечение захвата/
примесного электрона, находящегося в этом состоянии. В случае
оптической рекомбинации, т.е. захвата зонного электрона при-
месным центром с излучением фотонов, соответствующее сечение
захвата близко к характерному и равно 10^{-22} см^2 /при $T = 4^\circ \text{K}$ /,
т.е. меньше, чем в случае мелкого примесного состояния.

5. Рассмотрен новый механизм релаксации глубокого сос-
тояния, учитывающий специфику области пространственного заря-
да полупроводника, в котором обмен электроном между примесным
состоянием и зоной проводимости совершается изосенергетически -
туннельным образом. Вычисления основывались на определении точ-
ной функции Грина примесного электрона в ОПЗ полупроводника
для трехмерного случая. Получены аналитические формулы для ве-
роятности ионизации глубокого центра полем ОПЗ в зависимости
от параметров задачи.

6. На основе статистики Шокли-Рида-Холла найдено время
жизни рассматриваемого глубокого состояния. Полученный спектр

времени жизни очень широк — оно может быть равным как десяткам секунд, так и долям секунд порядка 10^{-15} сек в зависимости от формы потенциального барьера, а также энергетического и пространственного положения примеси. Пространственная зависимость времени жизни качественно отличается от обычно используемой при рассмотрении других механизмов релаксации.

7. На основе строгих квантовомеханических выражений рассчитан туннельный резонансный ток через глубокие центры в ОПЗ контакта металл-полупроводник. Вычисление проведено для трехмерного случая с использованием рассмотренной ранее модели глубокого состояния. Интегральная резонансная составляющая ВАХ зависит лишь от одного параметра примесного центра — его ионизационного потенциала. Впервые показано, что туннельный резонансный ток по своей величине может превышать надбарьерный эмиссионный ток в широком интервале температур вплоть до комнатных и значит, резонансное туннелирование следует рассматривать, как равноправный механизм токопрохождения в контакте металл-полупроводник.

8. Показано, что туннельный механизм токопрохождения можно использовать для получения значений параметра, характеризующего дифференциальный наклон ВАХ, больших, чем e/kT . В определенной области значений параметров задачи туннельный резонансный ток является независимым от температуры. В контактах с промежуточным слоем осуществляются гораздо более выгодные условия для проявления этого эффекта, чем в тесных контактах.

9. Показано, что наличие глубоких примесных уровней в контакте металл-тонкий промежуточный слой — полупроводник может приводить к образованию скачков /при $T = 0$ / в зависимости параметра α , характеризующего дифференциальный наклон термоэмиссионной ВАХ от внешнего напряжения.

10. Такие же скачки в количестве, равном числу глубоких уровней, могут появляться и в вольтфарадных характеристиках, причем в обоих случаях эти скачки сглаживаются с ростом температуры, и вместо них возникают экстремумы соответствующих функций.

11. Показано, что возникновение экстремумов возможно лишь тогда, когда частота внешнего напряжения меньше обратного времени жизни глубокого состояния; в противном случае изменяется лишь ход вольтамперной и вольтфарадной зависимостей, в частности функция C^{-2} / V не описывается более прямой линией.

12. Если промежуточный слой достаточно толст, то основная информация о глубоких уровнях, которую можно извлечь, изучая выпрямляющие и емкостные свойства контакта металл-промежуточный слой /толщиной d / - полупроводник, содержится в $\propto(V)$ зависимостях, так как в предельном случае $d \rightarrow \infty$ глубокие примеси не оказывают влияния на емкость контакта.

13. Показано, что исследуя влияние глубоких уровней на характеристики контакта металл-промежуточный слой - полупроводник /или, напротив, исследуя глубокие центры с помощью таких характеристик/ необходимо учитывать зависимость квазиуровня Ферми от пространственной координаты. Получены выражения, свидетельствующие о том, что при обратных смещениях изгиб квазиуровня Ферми может быть весьма существенным, в то время как при прямых смещениях им практически можно пренебречь.

14. Исследован новый механизм образования низкочастотного избыточного шума в контакте металл-полупроводник. Он заключается в том, что при возникновении флуктуации заряда на глубоких уровнях происходит перераспределение падения напряжения между полупроводником и промежуточным слоем, в результате чего и возникает шум типа $1/f^{\alpha}$. Данный механизм шумообразования возможен только в контактах с промежуточным слоем и является причиной довольно интенсивных шумов.

15. Проведено сравнение полученных в работе выражений с некоторыми экспериментальными результатами. С помощью экспериментальных данных подтвержден ряд выводов глав II-IV диссертации о характере влияния глубоких уровней на свойства КМП с тонким промежуточным слоем.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А.Милнс. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках, М., "Мир", 1977.

2. В.И.Стриха. Теоретические основы работы контакта металл-полупроводник, Киев, "Наукова думка", 1974.

3. А.Ван дер Бил. Флуктуационные явления в полупроводниках, М., Изд.иностр.лит., 1961.

4. Дж.Займан. Принципы теории твердого тела, М., "Мир", 1966.

5. В.Хейне, М.Козн, Д.Уэйр. Теория псевдопотенциала, М., "Мир", 1973.

6. А.В.Чаплик, М.В.Этин. Влияние локализованных состояний в барьере на туннелирование электронов, ЖЭТФ, 1974, 67, № 1, стр.208-218.

Основные результаты диссертационной работы изложены в следующих публикациях:

1. A.N.Korol, M.Ye.Kitsai, V.I.Strikha, D.I.Sheka.
Effect of deep impurity levels on Schottky barrier diode characteristics - Sol.State Electr., 1975, 18, № 5, p. 375-379.

2. Д.И.Шека, В.И.Шека, А.Н.Король. Диэлектрическая проницаемость узкозонных ковалентных кристаллов - Физика твердого тела, 1976, 18, № 10, стр.2887-2892.

3. А.Н.Король, М.Е.Кицай, В.И.Стриха. Влияние глубоких уровней на избыточный шум диодов с барьером Шоттки - Полупроводниковая техника и микроэлектроника, со.вып.22, 1976, стр.43-48.

4. D.I.Sheka, A.N.Korol, *Dielectric Permittivity of Semiconductors With Narrow Forbidden Gap in the Long-Wave Limit - Phys.Stat.Solidi*, 1976, 76, p.413-418.

5. Д.И.Шека, В.И.Шека, А.Н.Король. Пространственная дисперсия диэлектрической проницаемости в полупроводниках типа $InSb$ - Физика твердого тела, 1977, 19, № 10, стр.3155-3158.

6. А.Н.Король, В.И.Стриха, Д.И.Шека. Учет неравновесности в задаче об определении параметров- глубоких примесных уровней из характеристик контакта металл-полупроводник-физика и техника полупроводников, 1978, 12, № 8, стр.1658.

7. А.Н.Король, Д.И.Шека. Туннельный резонансный ток с участием глубоких уровней в диодах Шоттки- в сб.Физические процессы в полупроводниковых приборах с барьером Шоттки,1979, стр.142.

8. А.Н.Король, В.И.Стриха, Д.И.Шека. О влиянии глубоких примесных уровней на параметры диодов Шоттки- Совещание по глубоким центрам в полупроводниках.Краткое содержание докладов,Одесса, 1972, стр.72.

9. Д.И.Шека, В.И.Шека, А.Н.Король.Диэлектрическая проницаемость узкозонных кубических кристаллов -Восьмое совещание по теории полупроводников.Тезисы докладов, Киев, 1975, стр.175.

10. А.Н.Король, Д.И.Шека. Влияние глубоких примесей на выпрямляющие и емкостные характеристики контакта металл-полупроводник с учетом проходящего тока - в книге Физические основы работы контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки, "Знание", Киев, 1975, стр.21-22.

11. А.Н.Король, В.И.Стриха, Д.И.Шека. Туннельный механизм релаксации глубокого центра и туннельный резонансный ток в области пространственного заряда полупроводника - Девятое совещание по теории полупроводников. Тезисы докладов, Тбилиси, 1978, стр.229.

Бд 26796

Зак.331-100

Формат 60х90/16

Подписано к печати 20.XI.1979 года

Тираж 100

Офсетная лаборатория Института теоретической физики АН УССР