

SiC 肖特基接触的直接隧穿效应*

汤晓燕[†] 张义门 张玉明 郭辉 张林

(西安电子科技大学微电子学院 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室, 西安 710071)

摘要: 通过精确求解一维定态薛定谔方程得到电子通过三角形势垒的隧穿几率, 模拟了 SiC 肖特基接触的直接隧穿效应. 结果显示该方法比 WKB 近似更精确, 同时也更适合工作在高场条件下的 SiC 材料, 并且能够连续地计算热电子发射电流和隧穿电流.

关键词: SiC; 肖特基接触; 直接隧穿; WKB 近似

PACC: 7330; 7335C; 7340S

中图分类号: TN311

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)01-0174-04

1 引言

SiC 作为一种新型的半导体材料, 在高温、高频、大功率、光电子及抗辐射等方面具有巨大的应用潜力. 肖特基接触在高速集成电路、微波技术等许多领域都有着重要的应用价值, 因此对它的研究成为人们所关注的重要问题之一.

直接隧穿效应会在很大程度上影响肖特基接触的输运特性. 在计算隧穿电流时, 目前大多数文献和模拟软件^[1,2]都是采用 WKB 近似方法得到电子通过肖特基势垒的隧穿几率. WKB 方法是一种准经典近似, 它的优点是公式简单, 在某些简单情况下能给出隧穿几率的解析表达式. 但这种近似方法只在势垒随空间变化比较平缓时才近似成立. 严格来讲, 对于像肖特基接触这样的突变势垒结构 WKB 近似条件是不成立的. 它会给隧穿电流的计算带来误差, 影响对肖特基接触输运特性的正确模拟.

本文通过精确求解一维定态薛定谔方程得到电子通过三角形势垒的隧穿几率, 并用费米-狄拉克分布代替了常用的玻尔兹曼分布, 模拟了 SiC 肖特基接触的直接隧穿效应. 和 WKB 近似相比, 该方法更适合工作在高场条件下的 SiC 材料, 并且能够连续地计算热电子发射电流和隧穿电流.

2 隧穿几率的求解

金属-半导体整流接触形成的肖特基势垒可视为三角形势垒, 如图 1 所示, 其势能函数表示为:

$$\begin{cases} U = 0, & x < 0 \\ U(x) = U_0 - qF_x x, & 0 < x < a \\ U = 0, & x > a \end{cases} \quad \text{区 (1)}$$

其中 $a = \frac{U_0}{qF_x}$.

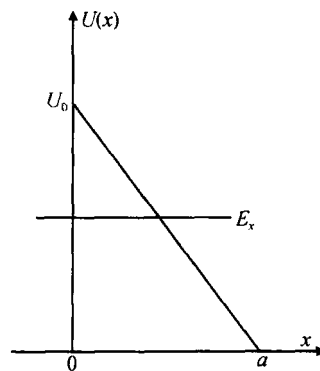


图 1 三角形势垒示意图

Fig. 1 Schematic illustration of triangular barrier

x 轴为电子的隧穿方向, 即垂直于金属/半导体界面. U_0 表示势垒高度, F_x 表示 x 方向的电场, a 为势垒宽度. 可见电场越大, 势垒越窄. 具有能量 E_x 和有效质量 m^* 的电子的运动状态由一维定态薛定谔方程确定.

$$\frac{d}{dx^2} (\psi(x)) + k^2 (\psi(x)) = 0 \quad (2)$$

式中 k 表示粒子波的波矢, $k^2 = 2m^* (E_x - U(x)) / \hbar^2$.

分别求解不同区间的一维定态薛定谔方程, 得到电子波的波函数^[3]:

* 国家自然科学基金资助项目 (批准号: J60404250140)

[†] 通信作者. Email: xytang@mail.xidian.edu.cn

2005-07-01 收到, 2005-10-18 定稿

$$\psi_1 = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x) \quad (3)$$

$$\psi_2 = a_2 \text{Ai}(t) + b_2 \text{Bi}(t) \quad (4)$$

$$\psi_3 = a_3 \exp(ik_3(x-a)) + b_3 \exp(-ik_3(x-a)) \quad (5)$$

式中角标 1,2,3 分别代表不同区间的粒子波。区的解表示为 Airy 函数 Ai,Bi 的线性组合,其中

$$t = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2 q} \right]^{1/3} (U(x) - E_x)$$

将(3)~(5)式带入势函数在不连续突变点处的波函数及其导数连续性条件下,确定波函数的复系数。

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \frac{\psi_1'(0)}{m_1^*} = \frac{\psi_2'(0)}{m_2^*} \quad (6)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \frac{\psi_2'(a)}{m_2^*} = \frac{\psi_3'(a)}{m_3^*} \quad (7)$$

方程(6)和(7)所给的匹配条件可用 2 × 2 矩阵

$$M \text{ 作用于二维矢量 } \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} \text{ 来表示:} \quad \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} \quad (8)$$

若粒子从势垒左边入射,在 $x < 0$ 的区域既有入射波(右行波)又有反射波(左行波),而 $x > a$ 的区域只有透射波(右行波),因此 $b_3 = 0$ 。代入公式可得 $a_1 = M_{11} a_3$, M_{11} 表示矩阵 M 第一行第一列的矩阵元。

隧穿几率(也称透射几率)定义为透射波的几率流密度 j_3 和入射波的几率流密度 j_1 的比值。

$$D_{\text{exact}}(E_x) = \frac{j_3}{j_1} = \frac{k_3 / |a_3|^2}{m_3^*} \times \frac{m_1^*}{k_1 / |a_1|^2} = \frac{m_1^*}{M_{11} m_3^*} \times \frac{1}{|M_{11}|^2} \quad (9)$$

图 2 将本文模拟的三角势的隧穿几率与 WKB 方法得到的结果^[4](方程 10)进行比较。计算中取势垒高度 U_0 为 1eV, $m_1^* = m_2^* = m_3^* = m_0$ (电子的静止质量)。电场 F_x 取 0.1MV/cm 和 1MV/cm。

$$D_{\text{WKB}}(E_x) = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m^*}}{3q\hbar F_x} (U_0 - E_x)^{3/2}\right], E_x < U_0 \quad (10)$$

可以看出 WKB 近似法只有在 $U_0 - E_x$ 很大的情况下才是基本成立的,随着 E_x 的增大,WKB 近似将高估电子的隧穿几率。电场 F_x 越大,WKB 方法的“缓变势垒”条件越难满足,所以偏差也就越大。另外,当电子能量大于势垒高度后,大多数文献都从经典理论的观点出发规定了隧穿几率等于 1^[5]。而实际上按照量子力学的观点,即使电子的能量大于势垒高度,电子流仍以一定的几率被势垒反射^[6]。本文的计算方法能够连续地得到电子在整个能量范围

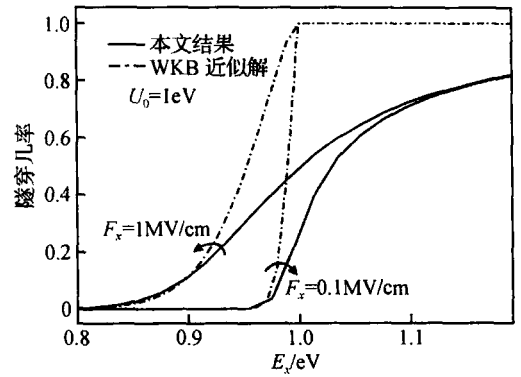


图 2 不同电场下隧穿几率随电子能量的变化曲线

Fig. 2 Tunneling probability versus electronic energy for various electric field

内的透射几率。

3 模拟肖特基二级管的 I-V 特性

利用上述计算隧穿几率的方法模拟 n 型肖特基接触的正向和反向特性。

图 3 给出了反向偏置下 n 型肖特基接触的能带图。 V_D 表示肖特基结的自建势; V 表示偏置电压; $q\Phi_B$ 表示金属一侧的势垒高度, $q(V_D - V)$ 是半导体一侧的势垒高度。

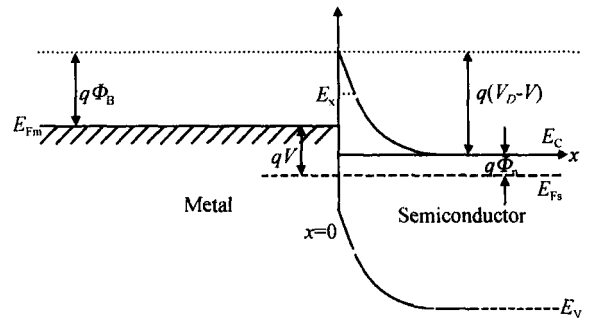


图 3 反向偏置下 n 型肖特基接触的能带图

Fig. 3 Schematic band diagram of n-type Schottky barrier under reverse biases

因为发生隧穿的最小能量是 E_C ,故取导带底为势能零点。由图 3 可以看出势垒反向偏置时, E_x 有可能小于金属费米能级 E_{Fm} 。此时玻尔兹曼分布不再成立。本文根据费米-狄拉克分布函数得到通过势垒的电流密度 $J^{[7]}$

$$J = \frac{A^* T}{k_B} \int_0^{q(V_D - V)} D(E_x) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(-\frac{q\phi_n - E_x}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{q\phi_n + E_x + qV}{k_B T}\right)} \right] dE_x \quad (11)$$

式中 A^* , k_B , T 分别表示有效理查森常数、玻尔兹曼常数和绝对温度。当积分限取 0 到 $q(V_D - V)$ 时积分结果对应隧穿电流,取 $q(V_D - V)$ 到无穷时对应

应热发射电流. $V > 0$ 对应正向电流, $V < 0$ 对应反向电流. 即方程(11)可以连续地处理肖特基接触的隧穿和热电子发射电流, 并且对正向和反向偏置同时适用.

图 4 将本文模型和传统的热发射模型进行了比较. 模拟中取 6H-SiC 的材料参数, T 取 300 K, $m_1^* = m_0, m_2^* = m_3^* = 0.9m_0$ (SiC 材料中电子的隧穿有效质量), 金属一侧的势垒高度 $q\phi_B = 1\text{eV}$, 掺杂浓度 $N_D = 1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$. F_x 取势垒区的表面电场, (12) 式中 ϵ_{semi} 表示半导体的介电常数. 正向偏置时隧穿电流可以忽略, 此时费米分布可用玻尔兹曼分布代替, 故本文的计算结果和热发射模型重合. 反向偏置时, 表面电场随着反向电压增大, 隧穿几率随之增大. 可以看出隧道效应是导致反向电流不饱和的主要因素. 除此之外, 镜像力使势垒降低和界面层的影响也会导致反向电流不饱和.

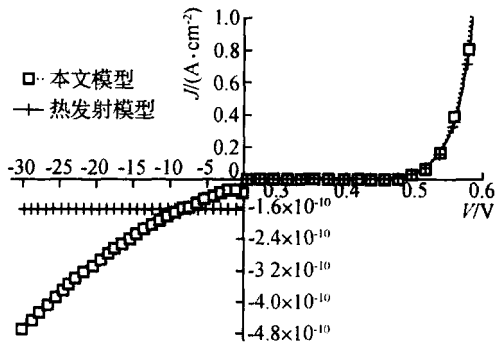


图 4 n 型肖特基接触的正向和反向特性

Fig. 4 I - V characteristics of n-type Schottky contact under forward and reverse biases

$$F_x = \sqrt{\frac{2qN_D(V_D - V - k_B T/q)}{\epsilon_{\text{semi}}}} \quad (12)$$

对不同的势垒高度 ϕ_B 分别利用本文的方法和 WKB 近似方法计算隧穿几率, 代入 (11) 式得到反向电流密度随表面电场的变化曲线, 如图 5 所示. 可以看出电场越大势垒高度 ϕ_B 越低, WKB 近似方法的偏差越大, 所以对于通常工作在大电压条件下的 SiC 肖特基接触, WKB 近似是不适用的.

4 结论

通过精确求解一维定态薛定谔方程得到电子通过三角形势垒的隧穿几率, 计算结果显示 WKB 近似方法在势垒顶端附近明显高估了电子的隧穿几率. 另外 WKB 近似法只对电子能量小于势垒高度

时有效, 无法计入电子能量大于势垒高度时的量子反射现象, 而本文的计算方法能够连续地得到电子在整个能量范围内的透射几率.

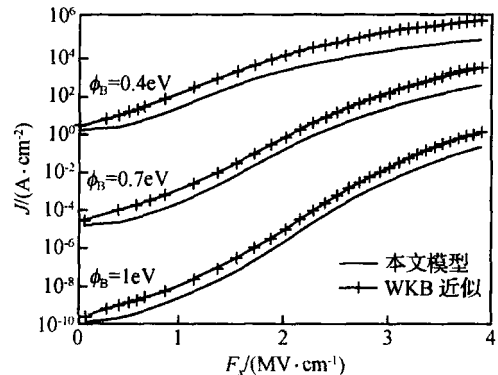


图 5 不同势垒高度下反向电流密度随表面电场的变化曲线
Fig. 5 Reverse current density versus electric field for various barrier height

利用本文计算隧穿几率的方法, 采用费米-狄拉克分布代替常用的玻尔兹曼分布模拟了 SiC 肖特基接触的电流-电压特性. 该方法具有更大的普适性, 并且能够连续地计算热电子发射电流和隧穿电流. 而采用 WKB 近似方法模拟的反向特性, 势垒越低表面电场越大, 其偏差越大. 对于通常工作在高场条件下的 SiC 肖特基接触 WKB 近似是不适用的.

参考文献

- [1] Avant ! Corporation. Medici two-dimensional device simulation program. Version 4. 1, User Manual (TACAD Business Unit, Fremont, California, USA), 1998
- [2] Integr. Syst. Eng., Inc., ISE 7.0 User Manual, 2001 San Jose, CA 95113
- [3] Jensen KL, Ganguly A K. Numerical simulation of field emission and tunneling: a comparison of the Wigner function and transmission coefficient approaches. J Appl Phys, 1993, 73 (9) : 4409
- [4] Matsuzawa K, Uchida K, Nishiyama A. A unified simulation of Schottky and Ohmic contacts. IEEE Trans Electron Devices, 2000, 47(1) : 103
- [5] Sun Lei, Du Gang, Liu Xiaoyan, et al. Direct tunneling effect in metal-semiconductor contacts simulated with Monte Carlo method. Chinese Journal of Semiconductors, 2001, 22 (11) : 1364
- [6] Winstead B, Ravaoli U. Simulation of Schottky barrier MOSFET's with a coupled quantum injection/ Monte Carlo technique. IEEE Trans Electron Devices, 2000, 47(6) : 1241
- [7] Crofton J, Sriram S. Reverse leakage current calculations for SiC Schottky contacts. IEEE Trans Electron Devices, 1996, 43(12) : 2305

Direct Tunneling Effect in SiC Schottky Contacts *

Tang Xiaoyan[†], Zhang Yimen, Zhang Yuming, Guo Hui, and Zhang Lin

(*Key Laboratory of the Ministry of Education for Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices,
Microelectronics Institute, Xidian University, Xi'an 710071, China*)

Abstract: The direct tunneling effect in SiC Schottky contacts is simulated based on electron tunneling probabilities through a triangular barrier, which are accurately solved using the one-dimensional time-independent Schrödinger equation. The simulation results show that the proposed method has the advantages of greater accuracy and adaptability to SiC Schottky contacts in high fields over the WKB approximation. It also can seamlessly treat thermionic emission and tunneling current.

Key words: SiC; Schottky contact; direct tunneling; WKB approximation

PACC: 7330; 7335C; 7340S

Article ID: 0253-4177(2006)01-0174-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. J60404250140)

[†] Corresponding author. Email: xytang@mail.xidian.edu.cn

Received 1 July 2005, revised manuscript received 18 October 2005

© 2006 Chinese Institute of Electronics