

利用 I - V 特性确定 Schottky 势垒 中的准费米能级

葛 惟 锐

(中国科学院半导体研究所)

1985年2月9日收到

利用 I - V 特性曲线的实验值,可以简便地计算出 Schottky 势垒中准费米能级变化的曲线,对于估计深能级的荷电状态有一定意义。

在一般的耗尽层近似中,即使在外加偏压的情况下,也经常把准费米能级 ζ 的位置当成直线来处理。实际上,从 Schottky 结界面处($x=0$)到耗尽层边缘($x=W$), ζ 的位置可能有很大差别。Rhoderick^[1]采用了一种巧妙的方法从实验数据来估计这个差别。以 n 型材料为例。他的出发点是认为流过空间电荷区的电流机构为一般的漂移和扩散,因此电流密度 J 可写为

$$J = \mu n \frac{d\zeta}{dx} \quad (1)$$

式中 μ 是电子迁移率,电子浓度 n 通过 $n = N_c \cdot \exp[-(E_c - \zeta)/kT]$ 和准费米能级联系起来, N_c 为导带有效态密度。(1)式可进一步写成

$$J = kT \mu N_c \exp(-E_c/kT) \frac{d}{dx} [\exp(\zeta/kT)] \quad (2)$$

取金属中的准费米能级为能量基点,则在外加偏压为 V_t 时, $\zeta(W) = qV_t$ 。从 $x=0$ 到 $x=W$ 积分(2)式即可得

$$\zeta(0) = \zeta(W) + kT \ln \left\{ 1 - \frac{J F(\alpha W) \exp[(\phi_b - qV_t)/kT]}{kT \mu N_c \alpha} \right\} \quad (3)$$

式中 ϕ_b 为势垒高度, $\alpha = (N_d q^2 / 2 \epsilon_s kT)^{1/2}$, N_d 为施主浓度, ϵ_s 为半导体介电常数, $F(\alpha W)$ 是一个以 αW 为宗量的 Dawson 积分,其一般形式为

$$F(y) = \exp(-y^2) \int_0^y \exp(y^2) dy \quad (4)$$

文献[2]给出 $F(y)$ 的数值表。当 $y > 2$ 时, $\frac{1}{2y}$ 是 $F(y)$ 的很好的近似。

(3)式已经给出 $x=0$ 和 $x=W$ (即体内)处准费米能级的差别。要获得整个耗尽层内 ζ 的变化曲线,必须得到 $\zeta(x)$ 的一般表达式。这很容易由(2)式积分求出,即

$$\frac{J}{kT \mu N_c} \int_0^x \exp(E_c/kT) dx = \exp[\zeta(x)/kT] - \exp[\zeta(0)/kT] \quad (5)$$

由于 E_c 可写成^[3] $E_c(x) = \phi_b + \frac{q^2 N_d}{2\epsilon_s} (x^2 - 2xW)$, (5)式左方的积分可计算如下:

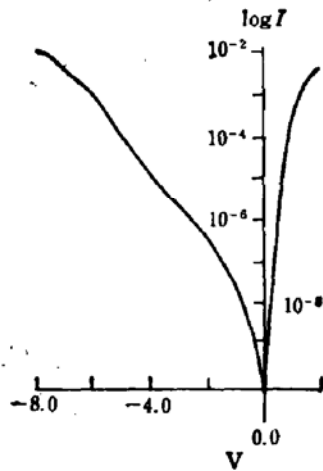


图1 Schottky 结的正反向 I-V 特性

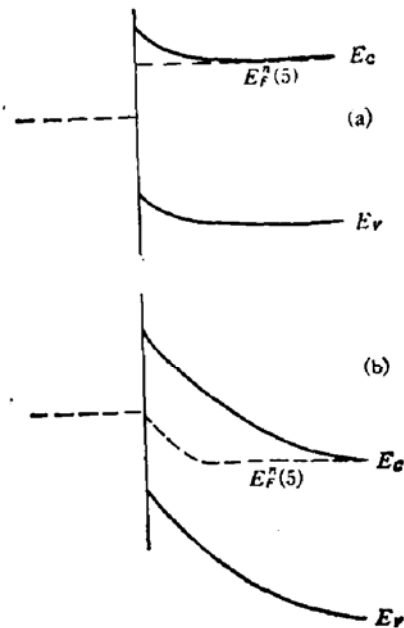


图2 不同偏压下的准费米能级位置

(a) $V_f = +0.5V$

(b) $V_f = -0.5V$

表1 金属-半导体界面处的准费米能级

N_d (cm^{-3})	N_c (cm^{-3})	μ ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$E_c - E_F = \eta$ (eV)	ϕ_b (eV)	V_f (V)	J (Acm^{-2})
1.89×10^{23}	4.70×10^{23}	3.5×10^{-1}	0.02	0.80	0.5	10
		$\alpha (\text{cm}^{-1})$	αW	$F(\alpha W)$	-0.5	-3.5×10^{-2}
$\phi_b - \eta - qV_f$ $= qV_d (\text{eV})$					$\frac{JF(\alpha W) \exp[(\phi_b - qV_f)/k_B T]}{kT\mu N_c \alpha}$	$qV_f - \xi(0) (\text{eV})$
0.28		7.25×10^7	3.28	0.152	3.14×10^{-6}	0
1.28			7.02	0.071	-2.60×10^8	-0.504

表2 负偏压下的准费米能级

x	$F[\alpha(W-x)]$	$\frac{J \exp[(\phi_b - \xi(0))/k_B T]}{kT\mu N_c \alpha}$	$\frac{\exp(-\alpha^2 W^2)}{\exp[-\alpha^2 (W-x)^2]}$	$\xi(x) - \xi(0)$ (eV)
0.1W	0.070	-14.08	8.58×10^{-3}	-0.244
0.2W	0.455	"	1.90×10^{-4}	-0.413
0.3W	0.281	"	1.22×10^{-11}	-0.504
0.4W	0.193	"	2.01×10^{-16}	"
0.5W	0.149	"	8.88×10^{-17}	"
0.6W	0.122	"	1.05×10^{-18}	"
0.7W	0.104	"	3.34×10^{-20}	"
0.8W	0.091	"	2.84×10^{-21}	"
0.9W	0.080	"	6.48×10^{-22}	"

$$\begin{aligned}
& \int_0^x \exp(E_c/kT) dx \\
&= \exp(\phi_b/kT) \int_0^x \exp[\alpha^2(x^2 - 2xW)] dx \\
&= \alpha^{-1} \exp(\phi_b/kT - \alpha^2 W^2) \int_{\alpha(W-x)}^{\alpha W} \exp(y^2) dy \\
&= \alpha^{-1} \exp(\phi_b/kT - \alpha^2 W^2) \left[\int_0^{\alpha W} \exp(y^2) dy - \int_0^{\alpha(W-x)} \exp(y^2) dy \right] \\
&= \alpha^{-1} \exp(\phi_b/kT) \left\{ F(\alpha W) - \frac{\exp(-\alpha^2 W^2)}{\exp[-\alpha^2(W-x)^2]} F[\alpha(W-x)] \right\} \quad (6)
\end{aligned}$$

这样就得到

$$\begin{aligned}
\zeta(x) = \zeta(0) + kT \ln \left\{ 1 + \frac{J \exp[(\phi_b - \zeta(0))/kT]}{kT \mu N_c \alpha} \left[F(\alpha W) \right. \right. \\
\left. \left. - \frac{\exp(-\alpha^2 W^2)}{\exp[-\alpha^2(W-x)^2]} F[\alpha(W-x)] \right] \right\} \quad (7)
\end{aligned}$$

根据上述原理,测量了一个 Au-GaAs 结的 I - V 特性曲线,示于图 1. GaAs 材料为 n 型 MOCVD 外延片,由 C - V 测量得到 $n = 1.9 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$,由此估计迁移率 $\mu \cong 3500 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}^{[4]}$;并得到 $\phi_b \cong 0.9 \text{eV}$. 表 1 中给出 $V_i = \pm 0.5 \text{V}$ 时 $\zeta(0)$ 的计算结果,表 2 中给出当 $V_i = -0.5 \text{V}$ 时耗尽层中每隔 $0.1W$ 处的 ζ 值.最后在图 2 中示出 ζ 的分布情况.可以看出,在正偏压 0.5V 情况下,电子准费米能级 E_F^e (即 ζ) 保持为平直的,而在负偏压 -0.5V 的情况下, $E_F^e(\zeta)$ 在接近界面时向金属的费米能级靠拢,在界面处与金属费米能级基本重合.

由于在深能级分析中,经常要关心深能级在耗尽层中与准费米能级在何处相交,所以上述简便的分析方法可能是有意义的.

感谢 E. H. Rhoderick 教授有益的讨论.

参 考 文 献

- [1] E. H. Rhoderick, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **5**, 1920 (1972).
- [2] W. L. Miller and A. R. Gordon, *J. Phys. Chem.*, **35**, 2785 (1931).
- [3] E. H. Rhoderick, *Metal-Semiconductor Contacts*, Oxford, 1980.
- [4] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John. Wiley and Sons, Inc., (1969).

Determination of Quasi-Fermi Level within Schottky Barrier from its I - V Characteristics

Ge Weikun (W. K. Ke)

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

Abstract

A simple method based upon the experimental I - V data is introduced to calculate the variation of the quasi-Fermi level within a Schottky barrier. It is believed to be useful to estimate the charge state of some deep levels.