Перенос носителей заряда в наноразмерных периодических структурах Si/CaF₂ с участием ловушек

© Ю.А. Берашевич[¶], А.Л. Данилюк, А.Н. Холод, В.Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Белоруссия

(Получена 28 апреля 2000 г. Принята к печати 22 июня 2000 г.)

Предложена модель переноса носителей заряда в наноразмерных периодических структурах Si/CaF₂ с участием ловушек в диэлектрике. Моделирование вольт-амперных характеристик таких структур показало, что участие ловушек в токопереносе на 2–3 порядка увеличивает общий переносимый заряд и может стать причиной немонотонной вольт-амперной характеристики. При этом на величину переноса по уровням ловушек оказывают влияние положение энергетического уровня, соответствующего ловушкам, число состояний в ловушке на траектории движения носителей заряда, величина отклонения траектории движения от прямолинейной, толщина диэлектрика и высота потенциального барьера.

Введение

Наноразмерные структуры, образующие систему квантовых ям, привлекают все больший интерес исследователей и инженеров. Это связано с перспективой построения на их основе твердотельных приборов, использующих квантово-размерные эффекты [1].

С точки зрения совместимости с хорошо разработанной кремниевой технологией перспективными представляются исследования периодических структур на основе Si/CaF₂ [2–4]. Они создаются методом молекулярнолучевой эпитаксии на монокристаллических кремниевых подложках [5]. При чередовании наноразмерных слоев диэлектрика и полупроводника образуется периодическая структура, каждый период которой включает в себя слои Si и CaF₂. Изучение механизмов переноса носителей заряда через квантовые ямы, образующиеся в таких структурах, представляет значительный интерес в связи с их перспективностью для опто- и наноэлектроники.

Проведенные экспериментальные исследования [6–8] позволили установить, что процессы переноса носителей заряда через периодические структуры Si/CaF₂ характеризуются неравномерным распределением электронов и дырок по периодам структуры, наличием участка отрицательного дифференциального сопротивления (ОДС) на вольт-амперной характеристике, зарядовыми эффектами (в том числе ненулевым потенциалом для нулевого тока), наличием нелинейных температурных зависимостей для тока и др. Каждый из перечисленных эффектов безусловно связан с вкладом определенных механизмов переноса носителей заряда. К наиболее вероятным следует отнести туннельный перенос и перенос по состояниям ловушек, ассистируемые "разогревом" носителей заряда и их лавинным умножением, накоплением заряда в квантовых ямах.

Однако с точки зрения модельных представлений только туннельный перенос получил приемлемое теоретическое описание [6].

Модель

Периодическая структура Si/CaF₂ образует систему квантовых ям, где широкозонный диэлектрик CaF₂ выполняет функции барьера, а кремний — потенциальной ямы. Энергетическая диаграмма такой структуры при приложении внешнего смещения и рассматриваемые механизмы переноса электронов и дырок в ней показаны на рис. 1. В отсутствие внешнего смещения форма потенциальных барьеров предполагается прямоугольной.

В модель включены следующие группы электронных процессов: 1) инжекция носителей заряда из контакта посредством туннелирования через диэлектрический барьер и ловушки в барьере; 2) туннелирование носителей заряда через потенциальные барьеры и их параллельный перенос по уровням ловушек в диэлектрическом барьере; 3) рекомбинация электронов и дырок в полупроводнике; 4) сток носителей заряда на контакт посредством туннелирования и с участием ловушек.

Предполагается, что туннелирование электронов и дырок через диэлектрический барьер является упругим. Вероятность туннелирования определяется в квазиклассическом приближении ВКБ [9].

Одновременно с туннелированием носителей заряда через потенциальные барьеры рассматривается перенос носителей заряда по уровням ловушек в слоях диэлектрика.

Предположительно, уровни ловушек создаются структурными дефектами по Шоттки: пустыми узлами, образованными вследствие диссоциации молекул CaF₂. В полярных кристаллах эти дефекты могут быть двойными

В развитие этой модели нами проанализирован перенос электронов и дырок через периодическую структуру Si/CaF₂ по состояниям ловушек в диэлектрике. Такой перенос рассматривается параллельно с классическим туннелированием, описываемым в приближении Вентцеля– Крамерса–Бриллюэна (ВКБ). Обобщенная модель и численные результаты анализа представлены в данной статье.

[¶] E-mail: julia@nano.bsuir.edu.by



Рис. 1. Энергетическая диаграмма структуры Si/CaF₂ и поведение электронов и дырок в ней: I — туннелирование из эмиттирующего контакта; 2 — эмиссия из эмиттирующего контакта; 3 — туннелирование через диэлектрический барьер; 4 — перенос через уровень ловушки в диэлектрике; 5 — рекомбинация; 6 — туннелирование носителей заряда на коллекторный контакт; 7 — перенос с ловушек в диэлектрике на коллекторный контакт; A — эмиттер электронов (коллектор дырок), В — коллектор электронов (эмиттер дырок).

и одинарными [10]. Двойные дефекты по Шоттки соседние вакансии различной полярности, образующиеся за счет перехода атомов Са и F в междоузлия и последующей диффузии вакансий к стокам. Они образуют ловушки и для электронов и для дырок. Одинарные дефекты, т. е. вакансии одного типа, образуют ловушки только для электронов либо только для дырок. Перенос носителей заряда с участием ловушек осуществляется эстафетным путем. Так же учтено, что в слоях кремния часть носителей вовлекается в процессы излучательной и безызлучательной рекомбинации.

Для определения величины тока, протекающего через структуру, записана система, включающая уравнения непрерывности для потоков электронов и дырок, одномерное уравнение Пуассона и уравнение, описывающее распределение внешнего приложенного напряжения V_{bias} между контактами и периодами структуры:

$$\begin{cases} \frac{dn_i}{dt} = g_i^{\text{trap}}(n_{i-1}, n_i) - g_{i+1}^{\text{trap}}(n_i, n_{i+1}) \\ + g_i^{\text{tun}}(n_{i-1}, n_i) - g_{i+1}^{\text{tun}}(n_i, n_{i+1}) - \gamma_i n_i p_i, \end{cases}$$
(1)

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = g_{i+1}^{\text{trap}}(p_{i+1}, p_i) - g_i^{\text{trap}}(p_i, p_{i-1}) \\ + g_{i+1}^{\text{tun}}(p_{i+1}, p_i) - g_i^{\text{tun}}(p_i, p_{i-1}) - \gamma_i n_i p_i, \end{cases}$$
(2)

$$\frac{d}{dx}\left(\varepsilon_{i}\frac{d\varphi_{i}}{dx}\right) = -\frac{q(n_{i} - p_{i})}{\varepsilon_{0}},$$

$$V_{\text{bias}} = \sum_{i}^{n}\varphi_{i} + \varphi_{k1} + \varphi_{k2},$$
(3)

где i — номер периода структуры (i = 1, ..., n; n — число периодов); $n_i(p_i)$ — концентрация электронов

Физика и техника полупроводников, 2001, том 35, вып. 1

(дырок) в *i*-слое полупроводника; g_i^{trap} — темп переноса носителей заряда через *i*-слой диэлектрика с участием ловушек; g_i^{tun} — темп туннельного переноса носителей заряда через *i*-слой диэлектрика; γ_i — коэффициент рекомбинации электронов и дырок в *i*-слое полупроводника; ε_0 — абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума; ε_i — кусочно-непрерывная функция, состоящая из относительной диэлектрической проницаемости материалов полупроводника и диэлектрика в *i*-периоде; q — заряд электрона; φ_i — падение потенциала на *i*-периоде; φ_{k1} — падение потенциала на эмиттере; φ_{k2} на коллекторе.

Темпы туннельных переходов электронов и дырок через потенциальный барьер равны [6]:

$$g_{i(n)}^{\text{tun}} = \frac{\sqrt{m_{yn}m_{zn}}}{2\pi^{2}\hbar^{3}d_{\text{Si}}} \int_{0}^{E_{\text{F}}} [F_{i(C)}(E) - F_{i(C)}(E + q\varphi_{Di})]dE$$
$$\times \int_{0}^{E} D_{i(n)}^{\text{tun}}(E - E_{\perp}, m_{xn})dE_{\perp}, \qquad (4)$$

$$g_{i(p)}^{\text{tun}} = \frac{\sqrt{m_{yp}m_{zp}}}{2\pi^{2}\hbar^{3}d_{\text{Si}}} \int_{E_{\text{F}}}^{0} [F_{i(V)}(E) - F_{i(V)}(E + q\varphi_{Di})] dE$$
$$\times \int_{E}^{0} D_{i(p)}^{\text{tun}}(E - E_{\perp}, m_{xp}) dE_{\perp},$$
(5)

где $m_{xn(p)}, m_{yn(p)}, m_{zn(p)}$ — эффективные массы электронов (n) и дырок (p) в кремниевой яме; направление туннелирования — вдоль оси x; направления z, y лежат в плоскости слоев; $D_{in(p)}^{tun}$ — туннельная прозрачность барьера для электронов (дырок); \hbar — постоянная Планка; d_{Si} — толщина слоя кремния; E — максимальная энергия электронов в инжектирующем электроде; $F_{iC(V)}(E)$ функция распределения Ферми–Дирака для электронов (дырок); φ_{Di} — падение потенциала в *i*-слое диэлектрика.

Вероятность туннелирования в рамках аппроксимации по теории ВКБ [9]:

$$D_{in(p)}^{\text{tun}} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \left\{2m_{xn(p)}\left[U_{in(p)} - \left(\frac{q^3\varphi_i}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_D d_D}\right)^{1/2} - E + E_{\perp}\right]\right\}^{1/2} dx\right),\tag{6}$$

где x_1, x_2 — классические точки поворота; $U_{in(p)}$ — высота потенциального барьера для электронов (n) и дырок (p); d_D — толщина слоя диэлектрика.

Темпы туннельных переходов электронов и дырок по состояниям ловушек, когда энергия носителей достигает значения энергии уровня ловушек, задавали следующим образом [11-12]:

$$g_{in(p)}^{\text{trap}} = \frac{a^2 \sqrt{m_{yn(p)} m_{zn(p)}}}{4\pi^2 \hbar d_D m_{xn(p)}}$$

$$\times \int_{0}^{E_{\text{F}}} [F_{iC(V)}(E) - F_{iC(V)}(E + q\varphi_{Di})] dE$$

$$\times \int_{E_{\text{F}} - q\varphi_{Di}}^{E} E D_{in(p)}^{\text{trap}}(E - E_{\perp}) dE_{\perp}, \qquad (7)$$

где *а* — расстояние между состояниями ловушек. Коэффицент туннельного прохождения носителей заряда по уровням ловушек в диэлектрике равен [11,12]

$$D_{in(p)}^{\text{trap}} = G \sum_{m=0}^{\infty} (p_m) \frac{m!}{d_D^m} \alpha_{in(p)}^{-m},$$
(8)

где

$$p_m = \frac{(N_D a^2 d_D)^m}{m!} \exp(-N_D a^2 d_D)$$

— вероятность расположения m ловушек на траектории движения носителей заряда через диэлектрик с концентрацией дефектов N_D ;

$$\alpha_{in(p)}^{-1} = \left[2m_{xn(p)}(U_{in(P)} - E + E_{\perp})/\hbar^2\right]^{-0.5}$$

— характерная длина затухания электронного (дырочного) состояния с энергией E в однородном барьере; G вклад в коэффициент туннельного прохождения уровней, уширенных за счет зарядовых эффектов, рассеяния, отклонения траектории уровней ловушек от прямолинейной.

Количество состояний на траектории движения носителей заряда по уровню ловушек связано с толщиной барьера, расстоянием между состояниями ловушек и величиной отклонения траектории движения от прямолинейной следующим образом [11]:

$$m = \frac{d_D}{a} \left(1 + \frac{\theta^2}{2} \right),\tag{9}$$

где θ — угол в радианах, характеризующий извилистость траектории.

Плотность электрического тока, протекающего через структуру, определяли как [6]

$$J(V) = J_{i(n)}(\varphi_{Di}) + J_{i(p)}(\varphi_{Di}) - \sum_{i=1}^{n} [q\gamma_{i}n_{i}(\varphi_{Di})p_{i}(\varphi_{Di})d_{Si}],$$
(10)

где $J_{i(n)}(\varphi_{Di}), J_{i(p)}(\varphi_{Di})$ — плотность нерекомбинационных составляющих электронного и дырочного токов в *i*-слое полупроводника, равная

$$J_{in(p)}(\varphi_{Di}) = qn_i(p_i)d_{\mathrm{Si}}(g_{in(p)}^{\mathrm{tun}} + g_{in(p)}^{\mathrm{trap}})/N_{C(V)}, \qquad (11)$$

где $N_{C(V)}$ — эффективная плотность состояний в зоне проводимости (валентной зоне).

Разработанная модель была использована для анализа вольт-амперной характеристики (ВАХ) 20-периодной структуры Si/CaF₂ при комнатной температуре в предположении, что толщины слоев диэлектрика и полупроводника, коэффициент рекомбинации, высота потенциального барьера для электронов и высота потенциального барьера для дырок одинаковы для всех периодов структуры. Рассматривались переходы носителей заряда при энергиях, близких к энергии Ферми эмитирующих контактов и квазиуровней Ферми в квантовых ямах.

Результаты расчета и их обсуждение

Расчет ВАХ периодической структуры Si/CaF₂ проводили с учетом следующих факторов: количество состояний на траектории движения носителей заряда по уровню ловушек, число уровней дефектов, наличие центров захвата на ловушки в диэлектрике для одного типа и для обоих типов носителей заряда, толщина слоев CaF₂ и Si, величина отклонения от прямолинейной траектории в расположении ловушечных центров, высота барьера.

Параметры, использованные в расчетах, приведены в таблице. В случаях, когда толщина диэлектрика и толщина полупроводника не являлись варьируемыми

Параметры, используемые для моделирования переноса носителей заряда в слоистых структурах Si/CaF_2

Параметр	Величина
Толщина слоя CaF ₂	1-2.5 нм
Толщина слоя Si	1-2.5 нм
Число периодов	20
Высота потенциального барьера	3.3 эВ
для электронов [13]	
Высота потенциального барьера	7.6 эВ
для дырок [13]	
Эффективная масса электрона в плоскости	$0.35m_0$
кремниевой ямы [5]	
Эффективная масса дырки в плоскости	$0.35m_0$
кремниевой ямы [5]	
Эффективная масса туннелирования	$0.42m_0$
для электрона [14]	
Эффективная масса туннелирования	$0.42m_0$
для дырки [14]	
Коэффициент рекомбинации для электронов	$10^{-22} \mathrm{m}^{-3} \mathrm{c}^{-1}$
и дырок в полупроводнике	
Плотность носителей заряда на контактах	10^{22} m^{-3}
Относительная диэлектрическая	5
постоянная CaF ₂ [6]	
Относительная диэлектрическая	7.5
проницаемость Si [6]	
Энергетическое положение ловушечного	0.6–0.63 эВ
уровня относительно энергии Ферми	
слоя кремния [7]	
Количество состояний на траектории	2–4
движения носителей заряда	
по ловушечному уровню	



Рис. 2. Влияние ловушек на вольт-амперную характеристику 20-периодной структуры Si/CaF₂. Перенос носителей заряда по ловушкам: 1 - c участием двух типов ловушек; 2 - c участием только электронных ловушек; 3 - c участием только ловушек для дырок. Туннельный перенос: 4 - o бщий туннельный ток; 5 - вклад электронов; 6 - вклад дырок. Предполагается перенос носителей заряда через ловушки с энергией на уровне дна зоны проводимости для электронов и валентной зоны — для дырок.

параметрами, их значения принимались равными 2.0 и 1.5 нм соответственно.

Проведены расчеты ВАХ структуры в отдельности для каждого механизма переноса носителей заряда: туннельного и по ловушкам. Как было установлено, вклад "ловушечного" тока во всем диапазоне изменения приложенного напряжения существенно (в 10²-10³ раз) превышает туннельный ток. При этом зависимость тока от внешнего напряжения в обоих случаях является экспоненциальной и монотонной. Связано это с различием потенциальных барьеров для электронных переходов по туннельному и ловушечному механизмам. При переносе по уровням ловушек барьер разбивается на несколько более узких барьеров. Вольт-амперные характеристики структуры для описанного случая приведены на рис. 2 (кривые 1, 4). В связи с тем что в диэлектрике могут присутствовать одинарные и двойные дефекты по Шоттки, изучено влияние типа дефекта на ловушечный перенос в периодической структуре Si/CaF₂. На том же рисунке показаны рассчитанные ВАХ для случаев присутствия в диэлектрике только электронных или только дырочных ловушек (кривые 2, 3). При этом энергетический уровень ловушек совпадал с дном квантовой ямы. Так, при наличии в диэлектрике только электронных ловушек величина тока на порядок больше, чем при присутствии в диэлектрике исключительно дырочных ловушек. Аналогичные соотношения для дырочной и электронной компонент туннельного тока: электронная составляющая тока на 2-3 порядка больше дырочной (рис. 2, кривые 5, 6). К такой разнице приводит различие высот потенциальных барьеров для электронов (3.3 эВ) и дырок (7.6 эВ).

8 Физика и техника полупроводников, 2001, том 35, вып. 1

При учете переноса носителей заряда по двум уровням ловушек с различной энергией на ВАХ появляются ступеньки, и кривая становится немонотонной (рис. 3). Этот эффект связан с совпадением положения ловушек и энергии носителей заряда в квантовой яме. Включение в общий поток переноса носителей заряда по уровням ловушек обусловливает всплеск тока при определенном потенциале. Пренебрежение процессами рассеяния приводит к появлению резонанса в структуре, когда энергия носителей в яме совпадает с положением уровня ловушек (кривая 3). В этом случае на ВАХ наблюдается резонансный пик. Учет процессов рассеяния носителей заряда в яме ведет к уширению энергетических состояний, размытости резонанса и отсутствию участка спада тока на характеристике (кривые 1, 2). Число всплесков тока определяется количеством уровней в диэлектрике с энергией, превышающей энергию дна зоны проводимости наноразмерного кремния.

Установлено, что величина ловушечного тока, как и туннельного, экспоненциально зависит от высоты потенциального барьера. Однако туннельная компонента тока уменьшается на 3 порядка при увеличении высоты барьера от 3 до 5 эВ, а ловушечная компонента — только на порядок. Причина состоит в том, что высота потенциального барьера при ловушечном переносе влияет только на характерную длину затухания электронной волны с энергией E в однородном потенциальном барьере.

Так как концентрация дефектов зависит от режимов формирования структур Si/CaF₂, было исследовано влияние числа состояний в ловушке *m* на траектории



Рис. 3. Влияние энергетического положения уровня ловушки на вольт-амперную характеристику 20-периодной структуры Si/CaF₂. Перенос носителей заряда: I — через 2 типа ловушек для электронов (дырок) с энергией на 0.02 эВ выше (ниже) относительно дна зоны проводимости (потолка валентной зоны) и с энергией, равной дну зоны проводимости (потолку валентной зоны); 2 — только через ловушки для электронов (дырок) с энергией на 0.02 эВ выше (ниже) относительно дна зоны проводимости (потолка валентной зоны); 3 — через ловушки для случая расположения энергетических уровней аналогично кривой I в предположении отсутствия рассеяния носителей заряда.



Рис. 4. Влияние толщин CaF_2 и Si на вольт-амперную характеристику 20-периодной структуры Si/CaF₂ при внешнем смещении 3 В: 1, 2 — ток через ловушки в зависимости от толщин CaF₂ и Si соответственно; 3, 4 — туннельный ток в зависимости от толщин CaF₂ и Si соответственно.

движения носителей заряда по уровню ловушки. Установлено, что плотность тока увеличивается в 10^3 раз с уменьшением *m* от 4 до 2 из-за возрастания коэффициента прозрачности при переносе носителей зарядов по состояниям ловушек.

Анализ влияния геометрических размеров структуры показал неодинаковую зависимость составляющих тока от толщины слоев Si и CaF₂ (рис. 4). При увеличении толщины слоев Si от 1 до 2.5 нм величины туннельного и ловушечного тока изменяются незначительно (кривые 2, 4). Рост толщины CaF₂ от 1 до 2.5 нм приводит к тому, что ловушечный ток экспоненциально уменьшается в 10⁵ раз, а туннельный в 10⁷ раз (кривые 1, 3).

Увеличение отклонения траектории движения носителей заряда по уровню ловушек от прямолинейной (увеличение угла θ от 0 до 45°) ведет к уменьшению тока в 30–45 раз, что является следствием увеличения числа состояний в ловушках на траектории движения, а также длины самой траектории.

Заключение

Предложенная модель параллельного транспорта носителей заряда путем туннелирования и через ловушки в наноразмерных периодических структурах Si/CaF₂ и проведенные расчеты показали, что состояния ловушек на 2–3 порядка увеличивают общий переносимый заряд. Кроме того, качественный вид вольт-амперных характеристик (BAX) зависит от таких факторов, как энергия и концентрация уровней ловушек, отклонение траектории движения носителей заряда по уровню ловушек от прямолинейной. Учет токопереноса по уровням ловушек ведет в определенных случаях к возникновению немонотонной BAX, когда с ростом внешнего напряжения смещения происходит совпадение уровней в яме и диэлектрике. Эти закономерности важно учитывать при проектировании нано- и оптоэлектронных приборов на квантовых ямах не только в структурах Si/CaF₂, но и в близких по электронным свойствам структурах Si/SiO₂, в которых транспорт через ловушку также должен играть существенную роль.

Работа выполнена в рамках проекта T99-102, финансируемого Фондом фундаментальных исследований Республики Беларусь, и Международной программы "Наноэлектроника".

Список литературы

- [1] C.G. Smith. Rep. Prog. Phys., 59, 235 (1994).
- [2] L. Vervoort, F. Bassani, I. Michalcescu, J.C. Vial, F. Arnaud d'Avitaya. Phys. St. Sol., 190, 123 (1995).
- [3] F. Bassani, L. Vervoort, I. Michalcescu, J.C. Vial, F. Arnaud d'Avitaya. J. Appl. Phys., 79, 4066 (1996).
- [4] F. Arnaud d'Avitaya, L. Vervoort, F. Bassani, S. Ossicini, A. Faxolino, F. Bernardini. Europhys. Lett., 31, 25 (1995).
- [5] A.G. Cullis, L.T. Canham, P.D.J. Calcott. J. Appl. Phys., 82, 909 (1997).
- [6] В.Е. Борисенко, А.Л. Данилюк, А.Н. Холод. Микроэлектроника, 27, 170 (1998).
- [7] V. Ioannou-Sougleridis, V. Tsakiri, A.G. Nassiopoulou, F. Bassani, S. Menard, F. Arnaud d'Avitaya. European projects: *Silicon Modules for Integrated Light Engineering* (Marseille, France, 1999) p. 133.
- [8] S. Menard, F. Bassani, M. Liniger, F. Arnaud d'Avitaya, A.N. Kholod, V.E. Borisenko. *Physics Chemistry and Application of Nanostructures* (Minsk, Belarus, 1999) p. 23.
- [9] C.B. Duke. Solid Physics Supplement 10 (N.Y., Academic Press, 1969) p. 390.
- [10] Электронные процессы и дефекты в ионных кристаллах. Сб. науч. тр., под ред. И. Тале (Рига, Латвия, 1985).
- [11] В.Я. Кирпиченков. ЖЭТФ, 113, 1522 (1998).
- [12] И.М. Лифшиц, В.Я. Кирпиченков. ЖЭТФ, 77, 989 (1979).
- [13] M.T. Cuberes, A. Bauer, H.J. Wen, M. Prietsch, G. Kaindl. J. Vac. Sci. Technol. B, 12, 2646 (1994).
- [14] C. Svensson, I. Lundström. J. Appl. Phys., 44, 4657 (1973).

Редактор Т.А. Полянская

Carrier transport via traps in nanosize periodic Si/CaF₂ structures

Yu.A. Berashevich, A.L. Danilyuk, A.N. Kholod, V.E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 220013 Minsk, Belarus

Abstract A model of the carrier transport in nanosize periodical Si/CaF_2 structures Si/CaF_2 via traps in a dielectric is proposed. Computer simulation of current-voltage characteristics has shown that the trap controlling carrier transport rises the total current by 2–3 orders. Moreover, at a certain energy position of the trap level the characteristics become nonmonotonous. The number of traps and the carrier's trajectory via traps, as well as the thickness of dielectric and barrier heights can influence the current through out the structures.