集成电路中的物理问题讲座

第五讲　金属-半导体接触的电流机制

叶　良　修

（北京大学计算机系）

在金属-半导体界面附近一般存在势垒，称为肖特基势垒．基于这一结构的二极管称为肖特基势垒二极管或肖特基二极管．

由于肖特基二极管较 p-n 结有更低的正向压降，所以在双极型集成电路中用它作限饱和二极管，以显著提高电路的速度．金属半导体接触也是金属-半导体场效应晶体管（MESFET）及有关集成电路的基础。金属-半导体欧姆接触则广泛用于形成低阻接触．

关于金属-半导体接触界面势垒的形成问题，在本刊11卷(1982)8期中陈克铭已经作了介绍，这里不再重复．本文着重讨论金属-半导体接触的电流．

金属-半导体接触的电流通常由多数载流子越过势垒形成，但是在有些情形下，少子的注入电流、隧穿电流或复合电流也可以有重要贡献．为了说明肖特基二极管的电流、电压特性，早在三十年代末和四十年代初就发展了两种理论：扩散理论[1]和热电子发射理论[2]（又称两极管理论）。这两种理论从不同角度描述越过势垒的电流．

一、越过势垒的电流

为了更好地了解上述两种理论，我们来考察一下图1(a)所示的由n型半导体构成的肖特基势垒，分析在正向偏压下电子由半导体向金属发射的过程．正向偏压 V 使半导体内部的费米能级比金属中的高出 eV [图1(b)]．正是这一能级差驱动载流子由半导体流向金属．在接近平衡的条件下，势垒中的载流子仍可由准费米能级描述．一般来说，载流子要流向金属先要通过扩散越过势垒区到达金属-半导体界面，然后在界面处向金属发射．为驱动电子由半导体内部传输到界面，在半导体空间电荷区中电子准费米能级 E_F 要有一定的降落，其变化率反比于载流子浓度 n

$$\frac{dE_F}{dx}=\frac{j}{n\mu}, \tag{1}$$

式中 j 为电流密度，μ 为电子迁移率．在界面附近载流子浓度最低，斜率应最大．但是，一般在界面处费米能级亦应有适当的降落［见图1(b)］．其作用在于提高界面处半导体中的电子浓度，从而使由半导体向金属发射的电子流超过由金属向半导体发射的电子流，形成由半导体流向金属的净电子流（平衡时，两边的发射应相等，不形成净电子流）．界面处准费米能级降落的大小应正好使由半导体内部传输来的电

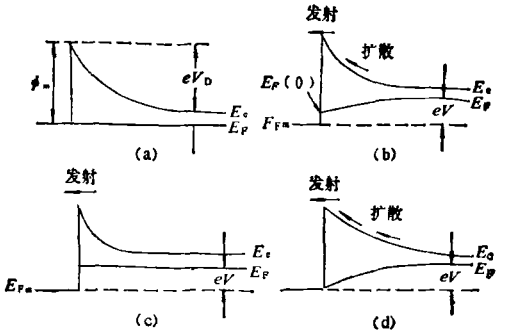

图1　不同情形下势垒区中费米能级的变化
(a)平衡情形；(b)施加正向电压的一般情形；
(c) 和 (d) 分别对应于两极管理论和扩散理论适用的情形

子都能发射到金属中，而不造成积累．换句话说，费米能级在界面和体内降落的大小是受电流连续来调节的．

讨论两种极端情况．一种情况是电子扩散到表面，在阻挡层(即势垒层)内准费米能级的降落可以忽略不计．阻挡层的厚度 d 小于电子平均自由程 l 的薄势垒就属于这种情况，如图1(c) 所示．在这种情形下，处在势垒边界处能量足够高的电子可以自由通过势垒区，并在界面处发射到金属中．因此，外加电压完全用于提高半导体中能向金属发射的电子浓度；这时问题归结为计算在半导体中单位时间内有多少能量足够高的电子能发射到金属中．两极管理论最初正是针对这种情况提出的．另一极端情况是，费米能级主要降落在空间电荷区内，驱动载流子扩散到界面．界面处的费米能级降落小到可以忽略不计．可以近似认为此处金属和半导体具有相同的费米能级．扩散理论适用于这种情形．这时，问题归结为在势垒区中费米能级的降落能引起多大的扩散电流．

对于一般情形，则要将上述两种理论结合起来．在此基础上可以得到这两种理论的适用条件．

二、热电子发射理论

通过势垒的电流可通过计算由半导体向金属以及由金属向半导体发射电子得到．先计算由半导体发射到金属中的电子电流 j_{sm}．设界面与 x 方向垂直．在电压 V 的作用下，半导体中的势垒高度变为 $e(V_D-V)$，如图2所示．

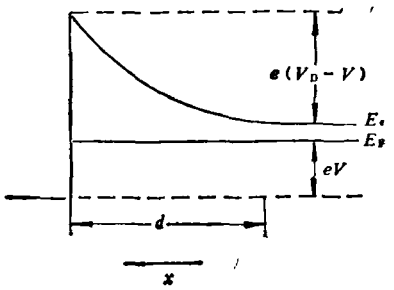

图2　外加偏压下的肖特基势垒 ($d<l$)

V_D 为自建势．

在 $d<l$ 的情形下，计算通过离开界面一个平均自由程 l 的范围内任意截面(包括金属-半导体界面) 向界面运动并能越过势垒的电子数，就可求得电流．我们可把这个面取在空间电荷区边界处．只有那些沿 x 方向运动且动能 $mv_x^2/2$ 超过势垒高度 $e(V_D-V)$ 的电子才能越过势垒发射到金属中 (m 为电子有效质量)．因为 $mv_x=\hbar k_x$(k_x 为电子波矢的 x 分量)所以

$$k_x>\sqrt{\frac{2me(V_D-V)}{\hbar^2}}. \tag{2}$$

问题即化为，求 k_x 满足上述条件的电子所产生的电流：

$$j_{sm}=\int ev_x dn. \tag{3}$$

因为单位体积晶体 $\boldsymbol{k}$ 空间状态密度为 $2/(2\pi)^3$，且非简并条件下分布几率 f 为

$$f=\exp\left[-\frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)}{2mk_BT}-\frac{E_c-E_F}{k_BT}\right], \tag{4}$$

式中 k_B 为玻耳兹曼常数．由

$$dn=\frac{2}{(2\pi)^3}fd^3k,$$

(3)式可写作

$$\begin{aligned}j_{sm}&=\frac{2e}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}dk_y\int_{-\infty}^{\infty}dk_z\int_{\sqrt{\frac{2me(V_D-V)}{\hbar^2}}}^{\infty}\frac{\hbar k_x}{m}\\&\quad\cdot\exp\left[-\frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)}{2mk_BT}\right]\\&\quad\cdot\exp\left[-\frac{E_C-E_F}{k_BT}\right]dk_x\\&=\frac{4\pi e(k_BT)^2m}{h^3}\exp\left[-\frac{e(V_D-V)}{k_BT}\right]\\&\quad\cdot\exp\left[-\frac{E_C-E_F}{k_BT}\right].\end{aligned} \tag{5}$$

由于 $\phi_m=eV_D+(E_C-E_F)$ [见图1(a)]，可把上式的系数表示为 A^*T^2．可得

$$j_{sm}=A^*T^2\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_BT}\right)\exp\left(\frac{eV}{k_BT}\right), \tag{6}$$

式中

$$A^* = \frac{4\pi e k_B^2 m}{h^3} \tag{7}$$

称为里查孙常数. 金属发射到半导体中的电流 j_{ms} 可由零偏压下的 j_{sm} 得到. 在零偏压下这两者大小相等方向相反,即有 $j_{ms} = -j_{sm}(0)$. 于是可求得热发射电流为

$$\begin{aligned} j &= j_{sm} + j_{ms} \\ &= A^* T^2 \exp\left(-\frac{\phi_m}{k_B T}\right) \\ &\quad \cdot (e^{eV/k_B T} - 1), \end{aligned} \tag{8}$$

电流大小取决于势垒高度 ϕ_m. 上面的伏安特性和 p-n 结的情形在形式上十分相似. 这是因为在两种情形下能够越过势垒的载流子数量都是受势垒高度控制的. 但两者之间有以下两点重要区别:

(1) 肖特基二极管越过势垒的电流是多数载流子电流,不象 p-n 结的少子注入电流那样存在电荷存贮效应. 因此,肖特基二极管的频率特性优于 p-n 结.

(2) 在相同的 V_D 值和相同的正向偏压下,肖特基二极管的电流密度比 p-n 结的大得多. (8)式可改写为

$$\begin{aligned} j &= \frac{eN_c\bar{v}}{4}\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_B T}\right)(e^{eV/k_B T} - 1) \\ &= \frac{en\bar{v}}{4}\exp\left(-\frac{eV_D}{k_B T}\right)(e^{eV/k_B T} - 1), \end{aligned} \tag{9}$$

式中 $\bar{v}$ 为电子的平速热运动速度, $\bar{v} = (8k_B T/\pi m)^{1/2}$, n 为半导体中的电子浓度, N_c 为导带有效态密度, $N_c = 2(2\pi m_n k T)^{3/2}/h^3$. 与 p-n 结电流相比,虽然两者都取决于能越过势垒的电子浓度,但是,在肖特基二极管中,这些电子以热运动速度的量级 ($\sim 10^7$cm/s) 向金属发射,而在 p-n 结中,越过势垒的电子只以扩散速度 ($D/L \sim 10^4$cm/s) 注入对方. 这样在相同的条件下,对于一定的电流,p-n 结上的压降将高于肖特基二极管.这一点被利用于晶体管-晶体管逻辑电路,作为限饱和二极管而有效地提高了电路的速度.

进一步的理论还应考虑电子在界面的反射和界面附近光学声子的散射[3]等. 考虑所有这些因素,可把(9)式写成

$$j = ev_r N_c \exp\left(-\frac{\phi_m}{k_B T}\right)\left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1\right), \tag{10}$$

其中 v_r 为一具有热运动速度量级的等效速度.

三、扩散理论及扩散理论和两极管理论的结合

设费米能级全部降落在半导体势垒区中,推动载流子流向半导体表面. 在势垒区 n 不是恒定的,因而 dE_F/dx 也不是恒定的. 用 $N_c\exp[-(E_c - E_F)/k_B T]$ 代替 n,可把(1)式改写为

$$\frac{j}{k_B T \mu N_c} e^{\frac{E_c}{k_B T}} = \frac{d}{dx}\left(e^{\frac{E_F}{k_B T}}\right). \tag{11}$$

把金属、半导体界面的坐标定为零,又设在势垒区中迁移率 μ 保持不变,对上式积分得

$$\begin{aligned} &\frac{j}{k_B T \mu N_c}\int_0^d e^{\frac{E_c}{k_B T}} dx \\ &= \exp\left(\frac{E_F(d)}{k_B T}\right) - \exp\left(\frac{E_F(0)}{k_B T}\right) \\ &= \exp\left(\frac{E_F(0)}{k_B T}\right)\left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1\right), \end{aligned} \tag{12}$$

式中 $E_F(0)$, $E_F(d)$ 分别为界面处和 d 处半导体中的 E_F, 后者与体内 E_F 值同 [参看图 1(b)]. 第二步考虑到 $E_F(d) = E_F(0) + eV$. 由于上式左边的被积函数是指数函数,在 $x = 0$ 处 E_c 最高,对积分的贡献主要来自 $x = 0$ 附近,因此可作如下近似:

$$E_c(x) = E_c(0) - eE_M x, \tag{13}$$

E_M 是界面处空间电荷区最大电场. 可得(12)式中的积分为

$$\begin{aligned} \int_0^d \exp\left(\frac{E_c}{k_B T}\right) dx &\cong \exp\left(\frac{E_c(0)}{k_B T}\right) \\ &\quad \cdot \int_0^\infty \exp\left(-\frac{eE_M x}{k_B T}\right) dx \\ &= \frac{k_B T}{eE_M} e^{\frac{E_c(0)}{k_B T}}. \end{aligned} \tag{14}$$

将此结果代入(12)式，略作整理可得

$$j = e(\mu E_M)N_C\exp\left(-\frac{E_c(0)-E_F(0)}{k_BT}\right)\cdot\left[\exp\left(\frac{E_F(d)-E_F(0)}{k_BT}\right)-1\right].\quad(15)$$

考虑到费米能级全部降落在半导体内部，因此 $E_F(d)=E_F(0)+eV$, $E_c(0)-E_F(0)=\phi_m$. 上式可写为

$$j = e(\mu E_M)N_c\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_BT}\right)\cdot\left(e^{\frac{eV}{k_BT}}-1\right).\quad(16)$$

这就是扩散理论的结果，它在形式上与两极管理论的(10)式相似，只是以界面最大电场下的漂移速度 $\mu E_M = v_d$ 代替了 v_r. 但是，E_M 随反向偏压的增加而增加，因此上式给出的反向电流应随反向偏压缓慢增加.

通常肖特基势垒的厚度在微米量级，但载流子的平均自由程约为几百埃，在这种情形下，两极管理论能否适用？若以扩散理论为基础来考虑，则对于迁移率较大的材料来说，μE_M 值可以超过 v_r，即在更厚的势垒条件下，由(16)式得到的电流比薄势垒的单纯热发射电流[(10)式]还要大，这显然是不合理的. 但是，这种情况说明，载流子扩散通过势垒区的阻力很小，因此载流子在界面发射所要求的界面费米能级降落不再能够忽略，这时我们必须把载流子的扩散和发射这两个环节一并加以考虑[4]. 显然，在扩散阻力很小(即 μE_M 很大)的最佳情况下得到的电流不应超过两极管理论给出的电流.

如前所述，一般情形下，应假定半导体和金属之间的费米能级差分别降落在界面和势垒区，相应的值应为 $E_F(0)-E_{Fm}$ 和 $E_F(d)-E_F(0)$，其中 E_{Fm} 为金属一边的费米能级. 用 $E_F(0)-E_{Fm}$ 代替式(10)中的 eV，得到热发射电流 j_t 为

$$j_t = ev_rN_c\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_BT}\right)\cdot\left[\exp\left(\frac{E_F(0)-E_{Fm}}{k_BT}\right)-1\right].\quad(17)$$

对于扩散电流，我们可把式(15)改写为

$$j_d = e(\mu E_M)N_c\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_BT}\right)\cdot\left[\exp\left(\frac{E_F(d)}{k_BT}\right)-\exp\left(\frac{E_F(0)}{k_BT}\right)\right]\cdot\exp\left(-\frac{E_{Fm}}{k_BT}\right).\quad(18)$$

由(17)式解出 $\exp(E_F(0)/k_BT)$，代入(18)式，并考虑到电流连续(即 $j_t = j_d = j$)，稍加整理后可得

$$j = \frac{ev_rN_c}{1+\frac{v_r}{v_d}}\exp\left(-\frac{\phi_m}{k_BT}\right)\cdot\left(e^{\frac{eV}{k_BT}}-1\right),\quad(19)$$

式中用 v_d 代替了 μE_M. 可见，在

$$\mu E_M \gg v_r.\quad(20)$$

的条件下，(19)式约化为(10)式，即为单纯两极管理论所得的结果. 在这种情形下，扩散的阻力很小，电流受界面处的热发射限制. 若 $\mu E_M \ll v_r$，则(19)式约化为扩散理论的(16)式，这时电流的限制因素是扩散. 以上结果说明，作为两极管理论的使用条件，$d < l$ 是过于苛刻了. 实际上只要 μE_M 大于或接近于热运动速度即可，即对于高迁移率的材料，两极管理论适用或近似适用. 对此有人曾从实验上进行过验证[5]. 对于 Si, Ge 和 GaAs 的计算结果也表明[6]，在势垒区中费米能级的降落通常可以忽略(但在大的正偏压下，能带近于平直，μE_M 下降，这时单纯的两极管理论不适用[7])；对于低迁移率的材料，实验资料较少；对于 Cu_2O[8]，无定形 Si[9] 及真空蒸发的 CdS 多晶薄膜[10] ($\mu\sim 1cm^2/V\cdot s$, $v_r/v_d \sim 600$) 扩散理论适用.

四、隧穿电流和欧姆接触

和在简并 p-n 结中发生的情况相似，当半导体的掺杂浓度足够高和势垒足够薄时，能量低于势垒的载流子也能穿透势垒形成电流. 在整个势垒较厚的情形下，能量接近于势垒高度的一部分载流子所要隧穿的势垒却很薄，有较大的隧穿几率. 从效果上来看，相当于势垒略

有降低. 这种情形称为热离子场发射，但随着掺杂浓度的提高，势垒越来越薄，有更多的低于势垒高度的电子能够隧道穿透. 一种极端情形是欧姆接触，其中隧穿电流占优势，如图 3 所

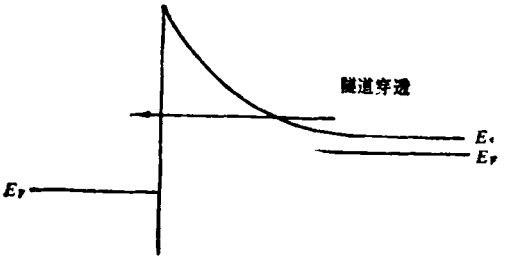

图 3 隧道穿透肖特基势垒

示，相应地接触电阻有较低的值. 接触电阻定义为

$$R_c = \left(\frac{\partial I}{\partial V}\right)^{-1}_{V=0} \tag{21}$$

在零偏压附近，可求得 $x \approx d$ 处，带底的电子的隧穿几率为

$$T = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\left(\frac{m\varepsilon\varepsilon_0}{N}\right)^{1/2} V_D\right]$$
$$= \exp[-eV_D/E_{00}], \tag{22}$$

式中 N 为掺杂浓度，ε 为介电常数，ε_0 为真空

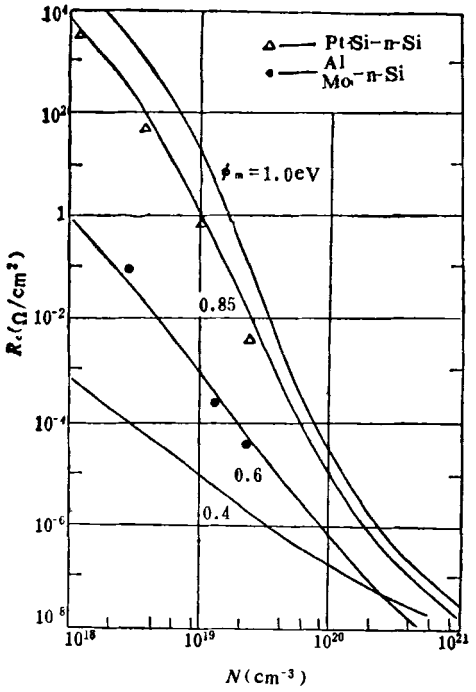

图 4 不同掺杂浓度的 n 型 Si 和金属的接触电阻

电容率，E_{00} 为一参考能量：

$$E_{00} = \frac{e\hbar}{2}\left(\frac{N}{m\varepsilon\varepsilon_0}\right)^{1/2}. \tag{23}$$

由式可见，N 愈高，E_{00} 愈大，隧穿几率愈大. 可以求得

$$R_c \propto \exp(eV_D/E_{00}). \tag{24}$$

可见对于一定的 V_D，掺杂浓度愈高，R_c 愈小. 图 4 的曲线是在不同势垒高度 ϕ_m 和不同掺杂浓度的 n 型 Si 的肖特基势垒上得到的[11]. 理论与实验相当一致.

五、其它电流机制

1. 少子注入电流

仍讨论 n 型半导体和金属的接触. 前面我们只考虑了在正向偏压下导带电子的流动. 实际上在上述偏压的驱动下，价带中的空穴也将同时由金属-半导体界面流向半导体内部. 界面附近流走的空穴通过向金属发射电子得到补充. 分析空穴的准费米能级的变化，可得知电流的大小. 这里的问题实际上和 p-n 结中注入电流的问题相同，需要知道空间电荷区边界处空穴准费米能级的位置，从而，可以得到该处过剩空穴浓度，求得空穴扩散电流. 由于在界面处金属和半导体中空穴浓度都很高(在金属中，在界面附近，在相应于半导体价带顶的能量位置上的能级中，只要温度不为零，总存在少量空能级. 可把它们称为空穴)，容易进行空穴交换，可以认为界面两边空穴费米能级具有同一水平. 由于势垒区中空穴浓度远比半导体内部高，空

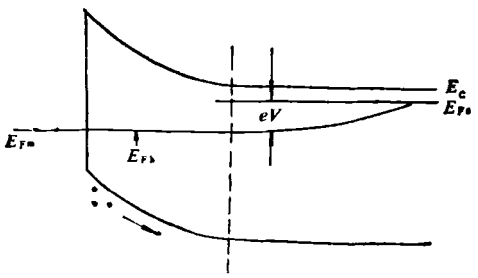

图 5 在正向偏压下肖特基势垒中的空穴准费米能级

E_{Fs} 为半导体一边的费米能级；
E_{Fb} 为空穴准费米能级

穴准费米能级基本上水平通过势垒区，其"降落"主要发生在势垒区以外的半导体内部，如图5所示. 可以得到空穴注入电流为

$$j_p = eD_p \frac{p_0}{L_p}(e^{eV/k_BT} - 1), \qquad (25)$$

式中 p_0 为体内空穴的平衡浓度. 利用 p_0 与表面空穴浓度 p_s 的平衡关系

$$p_0 = p_s \exp(-eV_D/k_BT),$$

上式可改写为

$$j_p = e\left(\frac{D_p}{L_p}\right)p_s e^{-eV_D/k_BT}(e^{eV/k_BT} - 1). \qquad (26)$$

空穴注入电流在总电流中所占比例 γ 可由上式及式(9)求得，为

$$\gamma \approx \frac{j_p}{j_n} = \frac{(D_p/L_p)p_s}{v_r n_0}. \qquad (27)$$

由于通常是 $p_s \lesssim n_0$，$D_p/L_p \ll v_r$，所以少子注入电流通常很小. 但是在某些特殊情形下，可以有显著的少子注入. 例如，点接触的情形(由细的金属簧丝压在半导体上构成). 注入少子沿径向扩散、被迅速稀释，从而大大增加注入少子的径向梯度. 计算表明，这时注入电流 [式(26)]中的 D_p/L_p 应被 $(D_p/L_p + D_p/r_0)$ 代替[12]. r_0 是金属触丝的端部曲率半径. 减小 r_0 可使少子注入效率显著提高. 此外，大的偏压也可使少子注入比增高[13].

2. 复合电流

肖特基势垒中产生复合电流的机制与 p-n 结中的相同. 在正向偏压下，可以求得复合电流 j_r 与热发射电流 j_t 之比为

$$\frac{j_r}{j_t} \approx \frac{\delta(n_i/2\tau)e^{eV/2k_BT}}{v_r N_c e^{-\phi_m/k_BT} e^{eV/k_BT}}, \qquad (28)$$

式中 τ 为寿命，n_i 为本征载流子浓度，δ 为复合区的有效宽度. 若近似以

$$\phi_m \approx (2/3)\varepsilon_g$$

代入，并考虑到

$$n_i \propto e^{-\varepsilon_g/k_BT}$$

(ε_g 为禁带宽度)，则有

$$\frac{j_r}{j_t} \propto \frac{1}{\tau}\exp\left[\left(\frac{1}{3}\varepsilon_g - eV\right)\Big/ 2k_BT\right]. \qquad (29)$$

可见小电流(小偏压)、高 ε_g、短寿命和低温有利于复合电流起作用. 在 n 型 GaAs 的肖特基势垒中，在室温下可以观测到复合电流[14].

参 考 文 献

[1] W. Schoffky, *Zeit. f. Phys.*, **113** (1939), 367; N. F. Mott, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **34** (1938), 568; Б. И. Давыдов, *Жэтф* **9**(1939), 451.

[2] H. A. Bethe, M. I. T. *Radiation Lab. Rep.*, **43-12** (1942).

[3] C. R. Crowell and S. M. Sze, *Solid-St. Electron.*, **8**(1965), 673; 979.

[4] C. R. Crowell and S. M. Sze, *Solid-St. Electron.*, **9**(1966), 1035.

[5] E. H. Rhoderick, *J. Phys. D.*, **5**(1972), 1920.

[6] C. R. Crowell and M. Beguwala, *Solid-St. Electron.*, **14** (1971), 395.

[7] J. M. Wilkinson, J. D. Wilcock and M. E. Brinson, *Solid-St. Electron.*, **20** (1977), 45.

[8] H. K. Henish, Rectifying Semiconductor Contacts, Oxford Univerisity Press, Oxford, (1957).

[9] C. R. Wronski, D. E. Carlson and R. E. Danial, *Appl. Phys. Lett.*, **29** (1976), 602.

[10] R. Köhler and L. Wauer, *Solid-St. Electron.*, **14** (1971), 581.

[11] O. Y. Chang, Y. K. Fang and S. M. Sze, *Solid-St. Electron.*, **14** (1971), 541.

[12] 黄昆、谢希德，半导体物理学，科学出版社，(1958)，203.

[13] D L. Scharfetter, *Solid-St. Electron.*, **8**(1965), 299;
M. A. Green and J. Shewchun, *Solid-St. Electron.*, **16**(1973), 1141.

[14] A. Y. C. Yu and E. H. Show, *J. Appl. Phys.*, **39**(1968), 3008.

(上接第 504 页)

skii. F. S. Fasisullov, *J. E. T. P. Lett.*, **16**(1972), 435.

[8] A. Yariv, *Appl. Phys. Lett.*, **28**(1977), 88.

[9] A. Yariv, *Opt. Comm.*, **21** (1977), 49.

[10] P. V. Avizonis, F. A. Hopf, W. D. Bamberger, S. F. Jacobs, A. V. Tomita and K. H. Momack, *Appl. Phys. Lett.*, **31**(1977), 435.

[11] N. C. Griffen and C. V. Heer, *Appl. Phys. Lett.*, **33**(1978), 65.

[12] R. W. Hellwarth, *J. Opt Soc. Am.*, **67** (1977), 1.

[13] P M. Selzer in Laser Spectroscopy of Solids, ed by W. M. Yen and P. M. Selzer, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, (1981), 136.

[14] M. Fujita, H. Nakasuka, H. Nakanishi and M. Matsuoka, *Phys. Rev. Lett.*, **42** (1979), 974.