

О РОЛИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ В НАНОКОНТАКТАХ МЕТАЛЛ – ПОЛУПРОВОДНИК

Н. В. Востоков, В. И. Шапкин*

*Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 27 ноября 2003 г.

В приближении полного обеднения рассчитана форма потенциала в контакте, возникающем на границе раздела полупроводника с металлической наночастицей, представляющей собой сферу с радиусом $a \ll S$, где S — ширина области обеднения полупроводника в случае бесконечного плоского контакта с металлом. На основе ВКБ-приближения построена теория термополевого токопереноса в таком наноконтакте. Показано, что с уменьшением радиуса металлической наночастицы все большую роль в токопереносе играет компонента тока термополевой эмиссии, величина обратного тока растет и может стать сравнимой с плотностью прямого тока. Вольт-амперные характеристики становятся при этом более симметричными.

PACS: 73.40.-c

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение свойств наноконтактов металл–полупроводник в настоящее время вызывает большой интерес [1]. Этот интерес обусловлен развитием зондовых методов исследования полупроводниковых структур, разработкой и изготовлением наноразмерных контактов Шоттки для микроволновых и терагерцевых применений и попытками формирования дву- или трехмерных массивов наноконтактов в качестве искусственной нелинейной среды [2–13]. При этом возникают вопросы: меняется ли описание токопереноса при уменьшении размеров контакта и какие эффекты при этом следует ожидать? Есть сообщения о том, что измеряемая высота барьера Шоттки зависит от размеров контакта [4, 5] из-за влияния приповерхностного искривления зон полупроводника вне металла. В работе [2] авторы указывают на возрастающую роль туннелирования при уменьшении размеров. Модель сферического контакта с барьером Шоттки используется при описании оптоэлектронных эффектов в структурах с низкотемпературным арсенидом галлия. В таких структурах барьер Шоттки возникает вокруг кластеров мышьяка с размерами 2–10 нм [10]. Короткое время жизни фотоносителей, низкая проводимость, высокая по-

движность электронов и большое поле пробоя позволяют использовать низкотемпературный арсенид галлия для генерации и детектирования терагерцового излучения [14, 15]. Другая возможность формирования полупроводниковой среды с внедренными металлическими нанокластерами (реализуемая методом металлорганической газофазной эпитаксии) обсуждается в работе [9].

В наноконтактах металл–полупроводник важно либо существование краевых эффектов, либо отличие от нуля кривизны поверхности раздела. При этом потенциал и электрическое поле зависят более чем от одной координаты, величина поля вблизи границы с металлом может быть гораздо больше, чем в плоском случае. Туннельная прозрачность потенциального барьера, возникающего в таком контакте, может быть велика и роль туннелирования в токопереносе — существенной. Обсуждению роли туннелирования посвящена данная работа.

Рассматривается контакт, возникающий между металлической сферой радиуса a и окружающим ее однородным полупроводником (для определенности n -типа). На рис. 1 изображено сечение металлической сферы в полупроводнике плоскостью, проходящей через ее центр. Для нахождения распределения электростатического потенциала контакта φ решается уравнение Пуассона:

*E-mail: vostokov@ipm.sci-nnov.ru

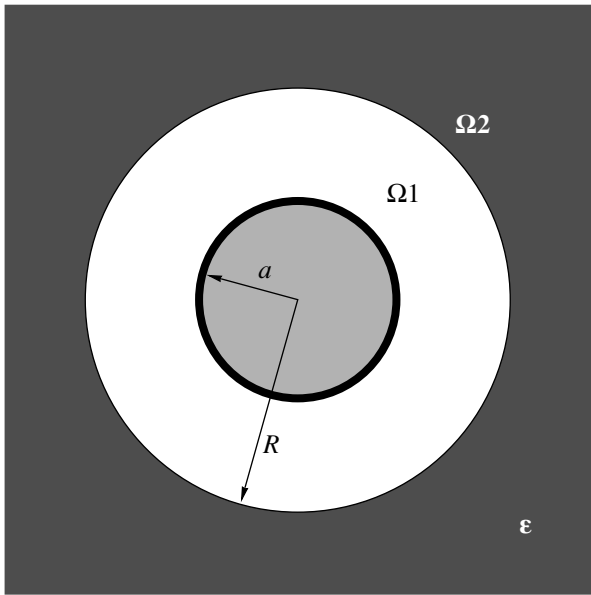


Рис. 1. Модель наноконтакта: металлическая сфера с радиусом a в бесконечном полупроводнике

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi eN}{\varepsilon}, \tag{1}$$

где N — концентрация примеси в однородно легированном полупроводнике, ε — его диэлектрическая проницаемость, e — заряд электрона. Используется приближение полного обеднения [16], которое в силу симметрии задачи приводит к следующим граничным условиям на двух сферических поверхностях, а именно, на поверхности металла Ω_1 и на поверхности Ω_2 , ограничивающей область полного обеднения полупроводника:

$$\varphi(r)|_{\Omega_1} = 0, \tag{2}$$

$$\varphi(r)|_{\Omega_2} = u_c - u, \tag{3}$$

$$\nabla\varphi(r)|_{\Omega_2} = 0. \tag{4}$$

Здесь u_c — изгиб зон в полупроводнике при нулевом напряжении, u — напряжение на контакте. Предполагаем, что u_c сохраняет свою величину независимо от размеров и формы контакта. В той ситуации, когда к металлической сфере, окруженной полупроводником, нельзя подключиться и подать напряжение, под u можно понимать фотоэдс, возникающую при освещении из-за перераспределения неравновесных носителей заряда. В такой постановке задачи удается рассчитать распределение потенциала вокруг наноконтакта.

При условии, когда можно пренебречь приповерхностным изгибом зон полупроводника на гра-

нице с воздухом (вакуумом), решение задачи о наноконтакте, внедренном в объем полупроводника с $\varepsilon \gg 1$, приближенно описывает электрические свойства металлических наноконтактов на поверхности полупроводника [17]. Актуальным примером является контактная атомно-силовая микроскопия с одновременным измерением вольт-амперных характеристик через проводящий зонд и образец.

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ВОКРУГ СФЕРИЧЕСКОГО НАНОКОНТАКТА

Для металлической сферы радиуса a в полупроводнике будем решать уравнение (1) в сферической системе координат с началом координат в центре сферы с условиями (2), (3) и (4). В этом случае Ω_1 — сфера с радиусом $r = a$, Ω_2 — в силу симметрии задачи тоже сфера с радиусом $r = R$ (рис. 1). Решение легко найти:

$$\varphi(r) = (u_c - u) \left[\frac{a^2}{3S^2} \left(1 - \frac{r^2}{a^2} \right) + \frac{2R^3}{3aS^2} \left(1 - \frac{a}{r} \right) \right]. \tag{5}$$

Здесь $S = \sqrt{\varepsilon(u_c - u)/2\pi eN}$ — ширина области полного обеднения полупроводника для бесконечного плоского контакта, а величина R является решением уравнения $2R^3 - 3aR^2 - 3aS^2 + a^3 = 0$. Единственным действительным его решением является следующее:

$$R = \frac{a}{2} + \frac{a^2}{2(2\sqrt{3}\sqrt{3a^2S^4 - a^4S^2} + 6aS^2 - a^3)^{1/3}} + \frac{1}{2} \left(2\sqrt{3}\sqrt{3a^2S^4 - a^4S^2} + 6aS^2 - a^3 \right)^{1/3}. \tag{6}$$

Используя (5) и учитывая потенциал взаимодействия электрона со своим изображением в металлической сфере, получим для потенциальной энергии электрона

$$V(x) = e(u_c - u) \times \left[\frac{a^2}{3S^2} \frac{x}{a} \left(2 + \frac{x}{a} \right) - \frac{2R^3}{3aS^2} \frac{x}{x+a} - \frac{2c}{x \left(2 + \frac{x}{a} \right)} \right]. \tag{7}$$

Здесь $x = r - a$ — расстояние от поверхности сферы, $c = e/4\varepsilon(u_c - u)$ — параметр размерности длины, характеризующий масштаб потенциала сил изображений. При обратных и небольших прямых напряжениях для полупроводников $c < 1$ нм. Третье слагаемое в квадратных скобках выражения (7) существенно только для $x \leq c$. Поскольку $c \ll a$, членом x/a в

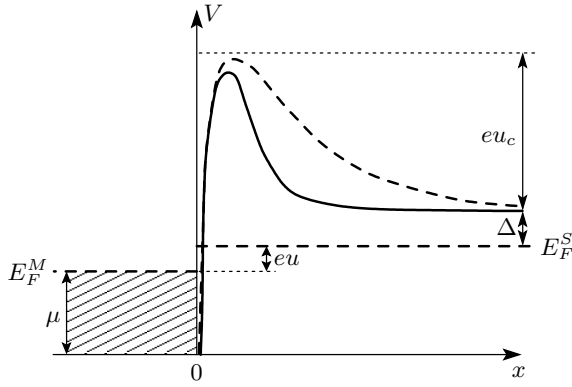


Рис. 2. Форма потенциала для наноконтакта (сплошная линия) и для плоского случая (штриховая линия)

знаменателе можно пренебречь. Кроме того, если интересоваться формой потенциальной энергии только вблизи металлической сферы для x меньших или порядка a , то при $a \ll S$ в выражении (7) можно пренебречь первым слагаемым в квадратных скобках. Это означает, что вблизи достаточно малой металлической сферы можно пренебречь электрическим полем, создаваемым пространственным зарядом полупроводника, по сравнению с полем поверхностного заряда сферы. Таким образом, для x меньших или порядка a получим для потенциальной энергии электрона приближенное выражение

$$V(x) = \mu + \Delta + eu_c - d(u) \left[g(u) \frac{x}{x+a} + \frac{c(u)}{x} \right]. \quad (8)$$

В формуле (8) энергия отсчитывается от дна зоны проводимости металла, μ — энергия Ферми в металле, Δ — расстояние от уровня Ферми до дна зоны проводимости полупроводника, введены обозначения $d(u) = e(u_c - u)$, $g(u) = 2R^3/3aS^2$. На рис. 2 схематично показана форма потенциала в наноконтакте (сплошная линия) в сравнении с зависимостью для квазиплоского случая (штриховая линия). Существенно, что ширина и высота барьера для наноконтакта уменьшаются.

3. ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ТОКА В СФЕРИЧЕСКОМ НАНОКОНТАКТЕ

Туннельную прозрачность будем рассчитывать в приближении ВКБ [18]:

$$D(E) \approx \exp[-A(E)], \quad (9)$$

где для энергий E меньших максимума барьера

$$A(E) = \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx, \quad (10)$$

x_1 и x_2 — нули подкоренного выражения в (10). Интеграл в (10) вычисляется точно, в результате получаем

$$A(z) = p(z^2 + 2\beta z - 4\beta + \beta^2)f(z), \quad (11)$$

где

$$p = \frac{20\pi a \sqrt{2mdg}}{3h}, \quad z = \frac{\mu + \Delta + eu_c - E}{dg}$$

— безразмерная энергия, отсчитываемая вниз от уровня $\mu + \Delta + eu_c$ — максимума барьера без учета сил взаимодействия изображений, $\beta = c/ag$, $f(z)$ — медленно изменяющаяся функция z , выражающаяся через функцию Аппеля. Формулы и график $f(z)$ приведены в Приложении. Вершине потенциального барьера (8) соответствует значение $z = z_m = 2\sqrt{\beta} - \beta$.

Полагая, что максимум в распределении электронов, прошедших область барьера, находится хотя бы на несколько kT выше уровня Ферми в полупроводнике $\mu + eu$ [18], и считая коэффициент прохождения над барьером равным единице ($A(z < z_m) = 0$), можно записать выражение для плотности тока через контакт как сумму термоэлектронной j_{TE} (электроны с энергиями, большими энергии максимума потенциального барьера) и термополевой j_T (электроны с энергиями, меньшими энергии максимума потенциального барьера) компонент:

$$j = j_{TE} + j_T = \frac{4\pi m e k T}{h^3} \exp\left(-\frac{\Delta + eu_c}{kT}\right) \times \left(\exp\left(\frac{eu}{kT}\right) - 1\right) dg \left[\int_{-\infty}^{z_m} \exp\left(z \frac{dg}{kT}\right) dz + \int_{z_m}^{1/g} \exp\left(z \frac{dg}{kT} - A(z)\right) dz \right]. \quad (12)$$

Здесь m — эффективная масса электрона в полупроводнике, T — температура. Величина прямого напряжения на контакте должна быть не слишком велика, так чтобы не нарушалось соотношение $a \ll S$, являющееся условием применимости формулы (8). Поскольку, как показано в Приложении, $f(z)$ — медленноменяющаяся функция, при интегрировании выражения (12) будем считать эту функцию константой, равной по величине ее значению в

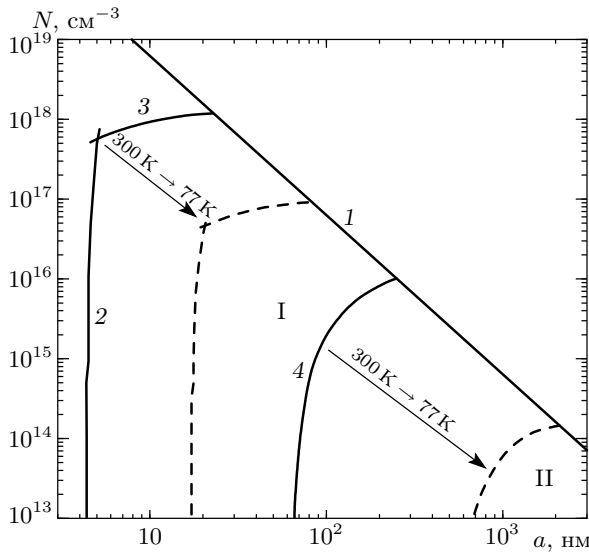


Рис. 3. Плоскость параметров N, a с областью, в которой применимо используемое приближение (ограниченной линиями 1, 2 и 3), 4 — линия равенства термополевой и термоэлектронной компонент тока. Стрелками показано перемещение границ 2, 3 и 4 при снижении температуры до 77 К

максимуме подынтегральной функции. С учетом того, что $f = \text{const}$, максимум подынтегральной функции достигается при $z = z_0$, где величина z_0 является решением уравнения

$$z_0 = \frac{dg}{2pkTf(z_0)} - \beta.$$

Учитывая это, получим из (12)

$$j = \frac{4\pi me kT}{h^3} \exp\left(-\frac{\Delta + eu_c}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{eu}{kT}\right) - 1\right) dg \times \\ \times \left\{ \frac{kT}{dg} \exp\left(z_m \frac{dg}{kT}\right) + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{pf}} \times \right. \\ \times \left[\text{Erf}\left[\sqrt{pf}\left(\frac{1}{g} - z_0\right)\right] + \text{Erf}\left[\sqrt{pf}(z_0 - z_m)\right] \right] \times \\ \left. \times \exp\left(\frac{1}{4pf}\left(\frac{dg}{kT}\right)^2 + 4pf\beta - \frac{dg}{kT}\beta\right) \right\}, \quad (13)$$

где $f = f(z_0)$.

Можно найти область параметров, в которой оправдана формула (13). Границы искомой области построим, например, для GaAs ($eu_c + \Delta = 0.7$ эВ, $\epsilon = 13.1$). На рис. 3 эта область ограничивается тремя линиями — 1, 2 и 3. На линии 1 ширина области

обеднения вокруг металла равна радиусу металлической сферы ($l = R - a = a$). При удалении от этой линии вниз (где $a \ll l$) попадаем в область параметров, где концентрация примеси не важна. Наоборот, при уходе вверх (где $a \gg l$) не важны кривизна контакта и краевые эффекты — это приближение плоского случая. Приближенное выражение для потенциала (8) справедливо ниже линии 1. На линии 2 максимум подынтегральной функции второго интеграла в выражении (12) достигается при $z_0 = 0.7$. Справа от этой линии $z_0 < 0.7$, и можно считать, что здесь $f(z) = \text{const}$. На линии 3 максимум в распределении электронов, прошедших область барьера, совпадает с энергией Ферми, ниже этой линии максимум расположен выше уровня Ферми и здесь оправдано выражение (12). Описанные выше границы построены для нулевого смещения ($u = 0$) и для простоты считалось, что $\Delta = 0$ и не зависит от температуры и концентрации легирующей примеси. На линии 4 $\lim_{u \rightarrow 0} j_T / j_{TE} = 1$, что соответствует равенству двух слагаемых в фигурных скобках выражения (13). Эта линия делит область параметров, в которой справедлива формула (13), на две части: слева от линии 4 (область параметров I) плотность тока определяет в основном термополевая компонента, справа (область параметров II) — термоэлектронная. Границы 2, 3 и 4, показанные сплошными линиями, построены для температуры $T = 300$ К. При понижении температуры до 77 К они сдвигаются в положения, показанные штриховыми линиями. Свойства термоэлектронного токопереноса в наноконтактах были представлены в [19]. Основными отличиями термоэлектронного токопереноса в наноконтактах от плоского случая являются более сильное понижение высоты барьера за счет сил изображений и слабая зависимость всех эффектов от уровня легирования. Ниже мы более подробно рассмотрим наноконтакты, где существенную роль играет термополевой токоперенос.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ЭФФЕКТОВ ТУННЕЛИРОВАНИЯ В НАНОКОНТАКТАХ

Рассмотрим нанокontakt с параметрами, лежащими внутри области I (рис. 3) и вдали от ее границ. В этом случае термоэлектронной компонентой тока можно пренебречь и упростить выражение для тока. Используя формулу (13), подставляя значения p, β, d, c , считая сумму интегралов вероятности равной двум, $f \approx 1, g \approx 1$ и пренебрегая малыми членами

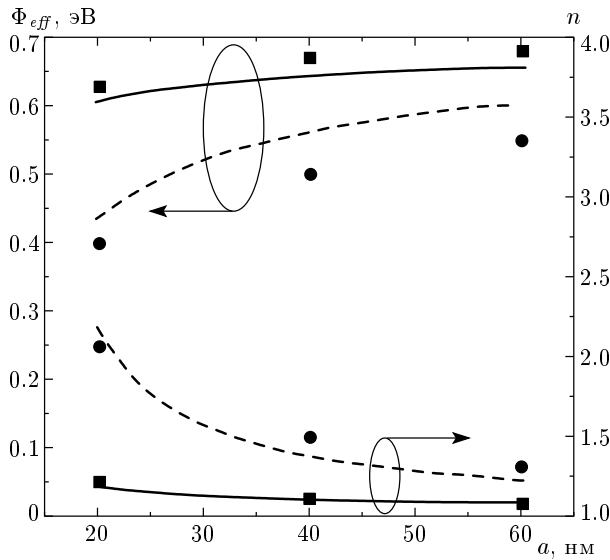


Рис. 4. Зависимости эффективной высоты барьера Φ_{eff} и фактора неидеальности n от радиуса наноконтакта

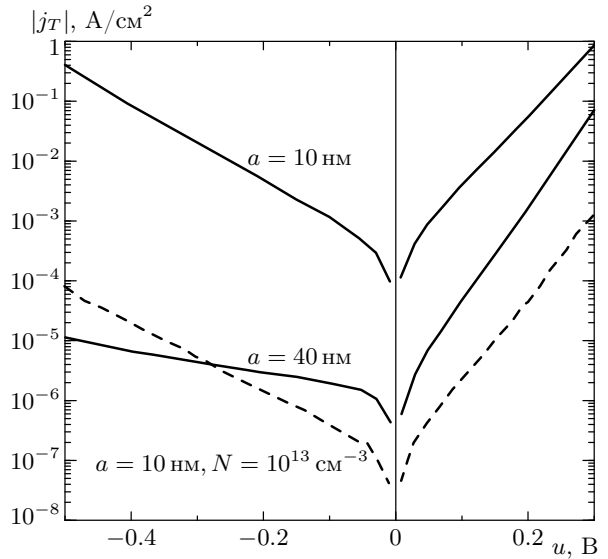


Рис. 5. ВАХ через наноконтакты с двумя различными радиусами при температуре $T = 300$ К

порядка β , получим приближенное выражение для плотности тока через наноконтакт:

$$j \approx j_T \approx \frac{4\pi m e k T}{h^3} \exp\left(-\frac{\Delta + e u_c}{k T}\right) \times \left(\exp\left(\frac{e u}{k T}\right) - 1\right) \frac{\sqrt{3\hbar} e^{3/4} (u_c - u)^{3/4}}{2\sqrt{5} (2m)^{1/4} \sqrt{a}} \times \exp\left(\frac{3\hbar e^{3/2} (u_c - u)^{3/2}}{80\pi \sqrt{2m} a (k T)^2}\right). \quad (14)$$

Выражение сохраняет сильную температурную зависимость, характерную для процессов термополевой эмиссии. Возможность пренебречь слагаемыми порядка β в показателе экспоненты выражения (13) для наноконтактов с радиусами меньше или порядка 50 нм связана с уменьшением роли сил изображения в прозрачности барьера.

Запишем для небольших прямых напряжений $3kT/e < u < u_c$ ток, рассчитанный по формуле (14), в виде, характерном для контакта Шоттки [16]:

$$j = AT^2 \exp\left[-\frac{\Phi_{eff}}{kT}\right] \exp\left[\frac{eu}{nkT}\right]. \quad (15)$$

Величины Φ_{eff} и n , конечно, зависят от температуры, радиуса наноконтакта и имеют слабую зависимость от прямого напряжения. При фиксированной

температуре это выражение позволяет оценить величины «кажущейся» эффективной высоты барьера Φ_{eff} и фактора неидеальности n , например, для GaAs $e u_c + \Delta = 0.7$ эВ, $\epsilon = 13.1$, концентрация примеси $N = 10^{16}$ см⁻³. На рис. 4 показаны зависимости Φ_{eff} и n от радиуса наноконтакта для двух температур: $T = 300$ К — сплошные линии, $T = 77$ К — штриховые линии. Как видно из графиков, с уменьшением размера нанокластера и температуры эффективная высота барьера уменьшается, а фактор неидеальности растет и может быть больше двух. На том же рисунке квадратными и круглыми метками показаны значения Φ_{eff} и n , рассчитанные по точным вольт-амперным характеристикам (ВАХ), полученным численно: $T = 300$ К — квадраты, $T = 77$ К — кружки. Видно, что даже сильно упрощенное выражение (14) дает результаты близкие к точным.

Сильная зависимость высоты барьера от обратного напряжения приводит к росту обратного тока с уменьшением радиуса наноконтакта. Из оценок на основании формулы (14) прямой и обратный токи сравниваются при напряжениях $\pm u$, когда радиус наноконтакта уменьшается до 5 нм при $T = 300$ К и до 21 нм при $T = 77$ К. Таким образом, вольт-амперные характеристики с уменьшением радиуса становятся все более симметричными. На рис. 5 показаны ВАХ через наноконтакты с двумя различными радиусами при температуре $T = 300$ К. Видно, что плотность обратно-

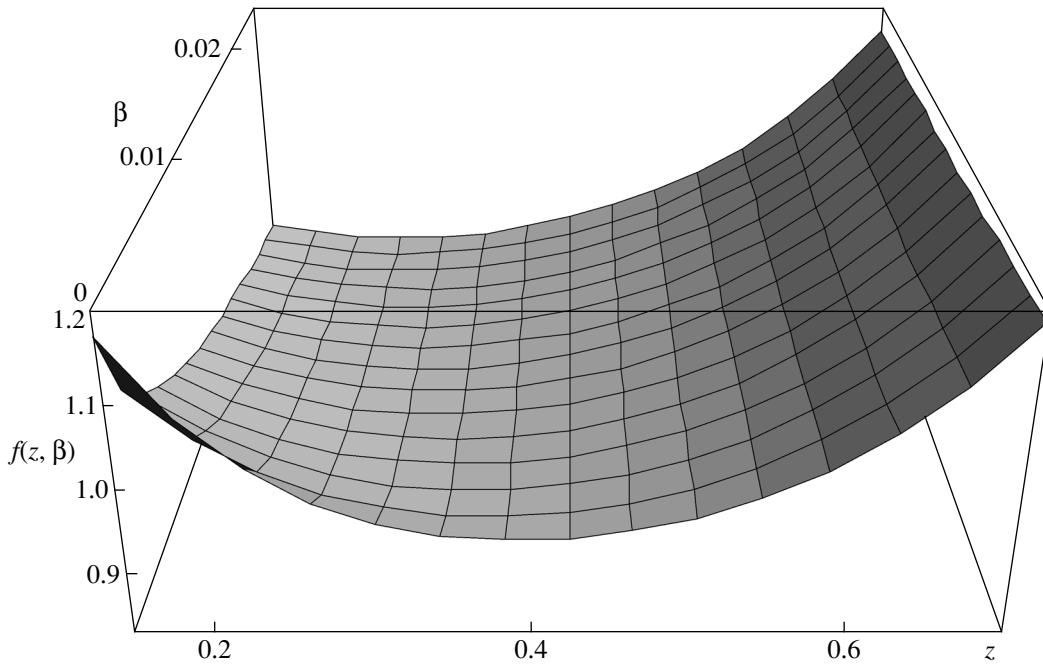


Рис. 6. График функции $f(z, \beta)$

го тока носит экспоненциальный характер. Штриховыми линиями показана ВАХ наноконтакта с заведомо малой концентрацией легирующей примеси $N = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ — плотности прямого и обратного токов остаются сравнимыми.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена теория термополевого токопереноса в наноконтактах металл–полупроводник на основе ВКБ-приближения, с учетом снижения высоты барьера за счет сил изображения. Получены аналитические выражения для ВАХ через функцию Аппеля. Построена область параметров, в которой токоперенос через барьер определяет термополевая компонента. Показано, что при термополевым токопереносе плотность как прямого, так и обратного тока носит, в основном, экспоненциальный характер. С уменьшением радиуса наноконтакта до $a \sim 5 \text{ нм}$ при $T = 300 \text{ К}$ величина обратного тока растет и может стать сравнимой с величиной прямого тока. Вольт-амперные характеристики становятся при этом более симметричными. Эффективная высота барьера существенно снижается с уменьшением радиуса наноконтакта — на десятые доли электронвольт. Все перечисленные выше эффекты сохраняются при сколь угодно малом уровне легирования полупроводника.

ПРИЛОЖЕНИЕ

$$f(z) = \frac{3\pi}{40(1-z)^{3/2}} \frac{a}{x_2} \left(1 + \frac{a}{x_2}\right)^{-1/2} \times \\ \times F_1 \left[\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 3; 1 - \frac{x_1}{x_2}, \frac{1 - x_1/x_2}{1 + a/x_2} \right],$$

где

$$\frac{x_1}{x_2} = \frac{z - \beta - \sqrt{(z - \beta)^2 - 4\beta(1 - z)}}{z - \beta + \sqrt{(z - \beta)^2 - 4\beta(1 - z)}}, \\ \frac{a}{x_2} = \frac{2(1 - z)}{z - \beta + \sqrt{(z - \beta)^2 - 4\beta(1 - z)}},$$

F_1 — функция Аппеля [20]. Оказывается, что $f(z)$ — медленноменяющаяся функция z в актуальной области энергий ниже вершины барьера для любых разумных значений параметра β . Это подтверждается тем, что

$$\frac{\frac{d}{dz} [f(z)] (z^2 + 2\beta z - 4\beta + \beta^2)}{f(z) \frac{d}{dz} [z^2 + 2\beta z - 4\beta + \beta^2]} \ll 1$$

для всех значений $z_m \leq z \leq 0.7$. Кроме того, в этой области параметров $f(z, \beta) \approx 1$, что иллюстрирует график на рис. 6.

ЛИТЕРАТУРА

1. Takhee Lee, Jia Liu, Nien-Po Chen, R. P. Andres, D. B. Janes, and R. Reifengerger, *J. Nanoparticle Res.* **2**, 345 (2000).
2. G. D. J. Smit, S. Rogge, and T. M. Klapwijk, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 3852 (2002).
3. G. D. J. Smit, M. G. Flokstra, S. Rogge, and T. M. Klapwijk, *Microelectron. Eng.* **64**, 429 (2002).
4. Hideki Hasegawa, Taketomo Sato, and Chinami Kaneshiro, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17**, 1856 (1999).
5. Hideki Hasegawa, *Surf. Rev. Lett.* **7**, 583 (2000).
6. Ichiro Tanaka, I. Kamiya, and H. Sakaki, *J. Cryst. Growth* **201/202**, 1194 (1999).
7. Kian-Giap Gan, Jin-Wei Shi, Yen-Hung Chen, Chi-Kuang Sun, Yi-Jen Chiu, and John E. Bowers, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4054 (2002).
8. I. Aberg, K. Deppert, M. H. Magnusson, I. Pietzonka, W. Seifert, L.-E. Wernersson, and L. Samuelson, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2976 (2002).
9. V. Shashkin, V. Daniltsev, M. Drozdov, Yu. Drozdov, A. Murel, N. Vostokov, and S. Rushworth, in *Booklet of Extended Abstracts of 10th European Workshop on Metalorganic Vapour Phase Epitaxy*, Italy, Lecce (2003), p. 79.
10. A. C. Warren, J. M. Woodall, J. L. Freeout, D. Grischkowsky, D. T. McInturff, M. R. Melloch, and N. Otsubuka, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1331 (1990).
11. C. Kadow, A. W. Jackson, and A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3510 (2000).
12. Keiichiro Kumada, Tomohiro Murata, Yutaka Ohno, Shigeru Kishimoto, Koichi Maezawa, Takashi Mizutani, and Nobuhiko Sawaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **42**, 2250 (2003).
13. A. Dorn, M. Peter, S. Kicin, T. Ihn, K. Ensslin, D. Driscoll, and A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2631 (2003).
14. I. S. Gregory, C. Baker, W. R. Tribe, M. J. Evans, H. E. Beere, E. H. Linfield, A. G. Davies, and M. Missous, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4199 (2003).
15. C. Baker, I. S. Gregory, W. R. Tribe, I. V. Bradley, M. J. Evans, M. Withers, P. F. Taday, V. P. Wallace, E. H. Linfield, A. G. Davies, and M. Missous, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4113 (2003).
16. С. Зи, *Физика полупроводниковых приборов*, Мир, Москва (1984).
17. C. Donolato, *J. Appl. Phys.* **95**, 2184 (2004).
18. *Туннельные явления в твердых телах*, под редакцией Э. Бурштейна и С. Лундквиста, Мир, Москва (1973).
19. Н. В. Востоков, В. И. Шашкин, в сб. *Тез. докл. VI Российской конференции по физике полупроводников*, Санкт-Петербург (2003), с. 257.
20. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1965).