

# 金属-半导体接触势垒高度的理论计算\*

李书平 王仁智 蔡淑惠

(厦门大学物理系, 厦门, 361005)

2003-03-11 收稿, 2003-05-17 收改稿

**摘要:** 采用平均键能作为参考能级计算了十种金属-半导体接触势垒高度, 其计算结果与实验值的符合程度不亚于 Tersoff 和 Mönch 所采用的电中性能级方法, 计算结果表明平均键能方法和 Tersoff 提出的电中性能级方法一样, 可作为金属-半导体接触势垒高度的一种理论计算方法。

**关键词:** 势垒高度; 平均键能方法; 费米能级

**中图分类号:** O471.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-3819(2003)04-412-04

## Theoretical Calculation of Barrier Height of Metal-semiconductor Contacts

LI Shuping WANG Renzhi CAI Shuhui

(Dept. of Phys., Xiamen Univ., Xiamen, 361005, CHN)

**Abstract:** Taken the average-bond-energy as the reference level, ten barrier heights of metal-semiconductor contacts are calculated. The coincident degree of our calculational values and experimental values is not less than that of charge-neutrality point method, adopted by Tersoff and Mönch. It shows that the average-bond-energy method, similar to Tersoff's charge-neutrality point method, can be used as one of the methods in theoretical calculation of metal-semiconductor contacts.

**Key words:** barrier height; average-bond-energy method; Fermi level

**PACC:** 3120A; 7115A; 7125

## 1 引言

金属-半导体接触在技术上十分重要。在半导体和集成电路中广泛地利用着各种不同性质的金属-半导体接触, 主要有肖特基(Schottky 势垒)二极管和欧姆接触。同时, 如何将大块半导体材料电子态研究中的能带计算方法应用于异质结带阶和金属-半导体接触势垒高度的计算是近十几年来一直关注和研究的问题。笔者在异质结带阶理论计

算<sup>[1]</sup>和平均键能的物理内涵研究<sup>[4]</sup>的基础上, 结合金属-半导体接触势垒模型, 提出了一种采用平均键能  $E_m$  作为参考能级的金属-半导体接触势垒高度的计算方法, 本文介绍该方法的主要研究结果。

## 2 金属-半导体接触势垒模型

图 1(a)、(b) 分别表示 Schottky<sup>[3]</sup> 最早提出的接触势垒模型和目前在半导体器件物理中采用的 Bardeen 接触势垒模型<sup>[4]</sup>。图中  $\phi$  和  $\chi_s$  是金属的

\* Email: lsp@yanan.xmu.edu.cn

基金项目: 厦门大学校级自选课题(Y07010)资助

功函数和半导体的亲和势,  $E_F^m$  和  $E_F^s$  是金属和半导体的费米能级,  $E_c$ 、 $E_v$  和  $E_g$  是半导体的导带底、价带顶和禁带宽度。在两种接触模型中在零偏压时, 半导体费米能级  $E_F^s$  与金属费米能级处于同一能量水平线上, 电子和空穴的接触势垒高度  $\phi_n$  和  $\phi_p$  可表示为:

$$\phi_{n0} = E_c - E_F^s \quad (1a)$$

$$\phi_{p0} = E_F^s - E_v \quad (1b)$$

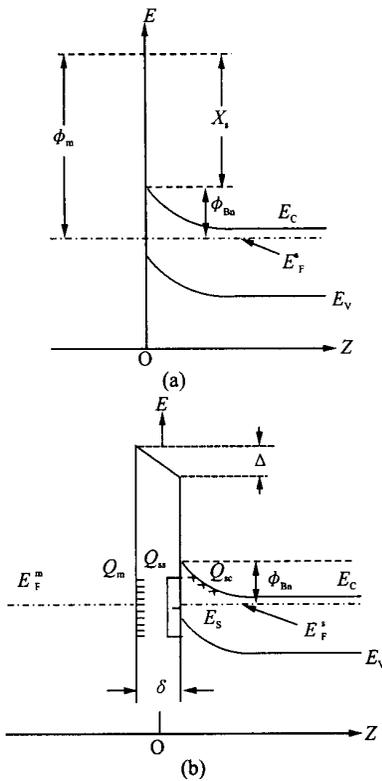


图 1 (a) Schottky 模型; (b) Bardeen, Cowly and Sze 模型

Fig 1 (a) The model of Schottky; (b) The model of Bardeen, Cowly and Sze

显然,  $\phi_n + \phi_p = E_c - E_v - E_{g0}$  在图 1(a) 的 Schottky 势垒模型中,  $\phi_n = \phi_m - \chi$ , 接触势垒高度  $\phi_n$  应该与金属功函数  $\phi_m$  密切相关。但是在许多共价键半导体的研究中发现, Schottky 势垒高度  $\phi_n$  或  $\phi_p$  值几乎与金属的功函数  $\phi_m$  无关, Schottky 模型不能适用。随后 Bardeen 提出, 半导体表面态的存在可以严重影响 Schottky 势垒, 如果半导体表面费米能级“钉扎”于高表面态的能级位置, 将使得 Schottky 势垒高度不受金属功函数的影响。Cowley 和 Sze<sup>[4]</sup> 基于 Bardeen 的费米能级“钉扎”模型, 在接触界面附近金属表面电荷  $Q_m$ 、半导体表面电荷  $Q_{ss}$  以及半

导体区的耗尽层电荷  $Q_{sc}$  相互平衡条件下(即  $Q_m + Q_{ss} + Q_{sc} = 0$ ), 导出半导体器件物理中通常采用的接触势垒表达式, 同时给出图 1(b) 所示的接触势垒示意图。

目前, 在异质结带阶理论计算中, 已建立了多种采用不同参考能级的理论计算方法, 采用的参考能级有  $sp^3$  杂化能 ( $E_h$ )、电中性能级 ( $E_B$ )<sup>[5]</sup>、介电函数隙中能级 ( $E_D$ )、以及平均键能 ( $E_m$ )<sup>[1]</sup> 等参考能级。如果把这些参考能级与接触势垒中半导体界面附近的费米能级  $E_F^s$  联系在一起, 就可以由式 (1a) 的  $E_c - E_F^s$  确定接触势垒高度  $\phi_n$  值。且已注意到, 这些方法中的参考能级  $E_h$ 、 $E_B$ 、 $E_D$  或  $E_m$  值是根据完整半导体带能带结构(能带本征值)确定(计算)的。计算中不考虑半导体掺杂(施主或受主杂质)的作用, 所有将这些参考能级用来计算接触势垒高度时, 所计算的应该是金属-本征半导体接触的势垒高度。对于金属-本征半导体接触, 接触势垒中的电荷  $Q_{sc} = 0$ , 图 1(b) 的接触势垒模型应该简化为图 2。图 2 中半导体的导带底  $E_c$ 、价带顶  $E_v$  和费米能级  $E_F^s$ , 是三条互相平行的水平线, 因此势垒界面处的半导体费米能级  $E_F^s$  也就是本征半导体的费米能级, 换句话说, 接触势垒高度决定于本征半导体的费米能级的位置。

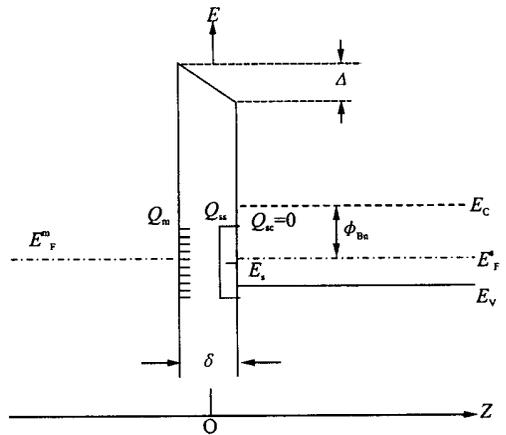


图 2 金属-本征半导体接触势垒模型

Fig 2 The model of barrier height of metal-semiconductor contact

### 3 金属-半导体接触势垒高度计算中的电中性能级和平均键能

Tersoff<sup>[5]</sup> 根据金属-半导体接触势垒高度几乎与金属种类无关的实验事实以及表面态对费米能

级的“钉扎”作用,提出计算金属诱生能隙态(MIGS)的电中性能级 $E_B$ 方法,并用于确定接触势垒高度。在 Tersoff 的计算中,先采用 LAPW 能带计算方法计算半导体材料的能带本征值 $E_n(k)$ ,再由 $E_n(k)$ 构成实空间格林函数:

$$G(R, E) = \int_{n,k} d^3r \frac{\Psi_{nk}^*(r) \Psi_{nk}(r+R)}{E - E_n(k)} = \int_{n,k} \frac{e^{ikR}}{E - E_n(k)} \quad (2)$$

其中, $k$ 是布里渊区中的波矢, $n$ 是能带序号, $R$ 是格矢量, $\Psi_{nk}$ 是能带本征值 $E_n(k)$ 的布洛赫波函数。Tersoff 考虑到能带计算中采用局密度泛函交换关联势所引起带隙计算值比实验值偏小的问题,先根据带隙实验值对能带 $E_n(k)$ 计算值进行修正,然后代入式(2)由 $G(R, E) = 0$ 计算出电中性能级 $E_B$ 值。Tersoff 认为半导体表面费米能级“钉扎”于电中性能级 $E_B$ 位置,即 $E_F^s = E_B$ ,根据式(1b)将接触的势垒高度 $\phi_p$ 表示为:

$$\phi_p = E_B - E_v \quad (3)$$

Tersoff 在论文中<sup>[5]</sup>采用价带顶作为能量原点(即 $E_v = 0$ ),所以式(3)简化为 $\phi_p = E_B$ 。

Mönch<sup>[6]</sup>根据 Tersoff<sup>[5]</sup>的电中性能级计算结果,在紧束缚近似的能带中研究了复数能带支点 $E_{bp}$ 与介电带隙 $W_{dg}$ 的关系,提出一个计算接触势垒高度 $\phi_p$ 的关系式:

$$E_{bp} - E_v = 0.449W_{dg} - [E_v - E_v(k_{mv})] \quad (4)$$

其中, $E_v$ 和 $E_v(k_{mv})$ 分别是布里渊区 $k = (0, 0, 0)$ 和 $k_{mv} = \frac{2\pi}{a_0}(0.6223, 0.2953, 0)$ 的价带带边,其数值取自紧束缚近似的能带计算结果。复数能带支点 $E_{bp}$ 相当于 Tersoff 模型中的电中性能级 $E_B$ , $W_{dg}$ 是介电函数能隙。

在半导体合金结能带和的异质结能带排列的研究中<sup>[11]</sup>,曾对于整个布里渊区的能带本征值 $E_n(k)$ ,计算其4个价带和若干( $M_c$ )个较低导带的能带(本征值)平均值并称为平均键能 $E_m$ 。在采用特殊 $k$ 点方法<sup>[7]</sup>的实际计算中, $E_m$ 的计算公式为<sup>[11]</sup>:

$$E_m = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k \in BZ} \alpha(k) \left[ \frac{1}{4} \sum_{n=1}^4 E_n(k) + \frac{1}{M_c} \sum_{n=5}^{4+M_c} E_n(k) \right] \right\} \quad (5)$$

其中, $k \in BZ$ 指在简约布里渊区中选取的特殊 $k$ 点, $\alpha(k)$ 是特殊 $k$ 点的权重, $E_n(k)$ 是半导体能带的能量本征值。对于布里渊区的每一个 $k$ 点的 $E_n$

( $k$ ),将能量由小到大依次排列,式(5)右边方括号内第一项计算一个指定 $k$ 点的4最低能量本征值的平均值,第二项计算紧接着的 $M_c$ 个能量本征值的平均值。笔者在平均键能的物理内涵探讨中发现<sup>[2]</sup>,当式(5)的 $M_c = 5$ 时,晶体的自由电子能带中 $E_m$ 值与费米能级 $E_F$ 值极其接近,在金属晶体能带中的 $E_m$ 值也和 $E_F$ 值非常接近。仿效 Tersoff<sup>[5]</sup>方法,假定图2中的本征半导体费米能级 $E_F^s = E_m$ ,由下式计算金属-半导体的接触势垒高度:

$$\phi_p = E_m - E_v \quad (6)$$

如果将计算式(3)、(4)、(6)与式1(b)进行比较可以看到,Tersoff, Mönch 和本文都是将参考能级 $E_B$ 、 $E_{bp}$ 和 $E_m$ 的计算值作为图2中确定接触势垒高度的 $E_F^s$ 值,从而得出接触势垒高度的计算结果。

#### 4 平均键能方法对金属-半导体接触势垒高度的计算结果

对于在金刚石和闪锌矿结构的 Si Ge、GaP、InP、AlAs、GaAs、InAs、AlSb、GaSb 和 InSb 等面心立方半导体,采用第一原理赝势能带计算方法<sup>[8]</sup>,计算它们的能带结构 $E_n(k)$ 值。计算中,晶格常数取自表1,采用“Ceperley-Alder”交换-关联势,模守恒赝势直接由Bachelet 等的BHS 表得到。对于平面波最高截断能量 $E_{cut}$ 值,除 AlSb、GaSb 和 InSb 三种晶体取 20.5Rdy 外,其它晶体都是取 22.5Rdy,该取值保证了所计算的能带收敛。因为采用的能带计算程序没有计入自旋-轨道(SO)分裂作用(裂距 $\Delta_0$ ),考虑 SO 分裂作用的价带顶 $E_v$ 应该上移 $\Delta_0/3$ 。对于表1列出十种半导体材料,由能带计算得到的结构 $E_n(k)$ ,再考虑表1列出的 SO 裂距 $\Delta_0$ 实验值的作用,最后得到的直接带隙 $E_{g,dir}$ 、间接带隙 $E_{g,ind}$ 列入表1(LDA 栏中)。表1Expt 栏中列出直接带隙 $E_{g,dir}$ 、间接带隙 $E_{g,ind}$ 的有关实验值。从表1可以看到,半导体直接带隙 $E_{g,dir}$ 及间接带隙 $E_{g,ind}$ 的计算值(LDA)比实验值(Expt)小得多。这是能带计算中采用局域密度泛函交换-关联势(LDA)的必然结果。Tersoff<sup>[5]</sup>在计算 $E_B$ 值时,考虑到能带计算中采用局域密度泛函交换-关联势(LDA)所得到带隙 $E_{g,dir}$ 、 $E_{g,ind}$ 偏小,对导带本征值 $E_n(k)$ 的计算值进行修正,研究中还发现<sup>[11]</sup>,采用间接带隙 $E_{g,ind}$ 实验值对 $E_B$ 值的修正



结果更加合适。根据 Tersoff 的研究结果, 采用类似的带隙修正方法, 即根据表 1 间接带隙  $E_{g, ind}$  中计算值 (LDA) 与实验值 (Expt) 之间的差值, 将第一原理赝势带计算得到的  $E_n(k)$  中 5 个导带的本征值刚性上移, 使其带隙等于实验值, 然后再采用式 (5) 计算平均键能  $E_m$  值。在上述能带自洽计算和平均键能计算均采用 60 个  $k$  点。表 2 给出平均键能方法的接触势垒高度  $E_m - E_v$  的计算结果, 表中同时列出 Tersoff 的电中性能级方法<sup>[5, 11]</sup>及 Mönch<sup>[6]</sup>的接触势垒高度  $E_B - E_v$  及  $E_{Bp} - E_v$  的计算结果, 表中还列出接触势垒高度的有关实验值  $\Phi_p^{pt}$ 。

表 1 晶格常数  $a_0$  和  $S_0$  裂距  $\Delta_0$  的实验值 (eV); 直接带隙  $E_{g, dir}$ 、间接带隙  $E_{g, ind}$  的实验值 (Expt) 和本文的计算值 (LDA)

Tab 1 Lattice constants  $a_0$ , experimental values of  $S_0$  split  $\Delta_0$ ; the experimental and the calculated values of direct band gap  $E_{g, dir}$ , indirect band gap  $E_{g, ind}$

Semiconductor	Lattice constants		Direct band gap		Indirect band gap	
	$a_0/nm$	$S_0$ split $\Delta_0/eV$	$E_{g, dir}/eV$	$E_{g, ind}/eV$	$E_{g, dir}/eV$	$E_{g, ind}/eV$
			(LDA)	Expt	(LDA)	Expt
Si	0.543	0.04	2.51		0.63	1.12 <sup>a</sup>
Ge	0.565	0.29	-0.02		0.09	0.66 <sup>a</sup>
GaP	0.545	0.08	1.95		1.63	2.27 <sup>a</sup>
InP	0.587	0.11	0.80	1.34 <sup>b</sup>	1.54	2.03 <sup>a</sup>
AlAs	0.565	0.28	1.94		1.29	2.15 <sup>a</sup>
GaAs	0.565	0.34	0.50	1.43 <sup>b</sup>	0.94	1.71 <sup>a</sup>
InAs	0.606	0.39	-0.17	0.36 <sup>b</sup>	0.93	1.52 <sup>a</sup>
AlSb	0.614	0.70	1.36		0.96	1.63 <sup>b</sup>
GaSb	0.608	0.75	0.03	0.70 <sup>b</sup>	0.26	0.80 <sup>b</sup>
InSb	0.648	0.98	-0.33	0.18 <sup>b</sup>	0.34	0.62 <sup>b</sup>

<sup>a</sup>引文[9]; <sup>b</sup>转引自引文[10]引用的实验值

## 5 讨 论

从表 2 本文接触势垒高度  $\Phi_p = (E_m - E_v)$  计算值与实验值 ( $\Phi_p^{pt}$ ) 的比较中看到, 除 Ge 和 AlSb 计算值与实验值的差别稍大于 0.1 eV 外, 其他半导体材料的接触势垒高度计算值与实验值的差别都比较小, 计算结果与实验结果符合较好; 对于大多数半导体, 表 2 本文的  $E_m - E_v$  计算值与 Tersoff、Mönch 的  $E_B - E_v$ 、 $E_{Bp} - E_v$  计算值都是比较接近的。结果表明, 所建议的平均键能方法和 Tersoff 提出的电中性能级方法一样, 可作为金属-半导体

接触势垒高度的一种理论计算方法。

表 2 本文的带阶参数  $E_m - E_v$  计算结果和相应  $E_B - E_v$ <sup>[5, 11]</sup>、 $E_{Bp} - E_v$ <sup>[6]</sup> 的计算结果以及文献[10]所引用 Au-P 型半导体势垒高度  $\Phi_p^{pt}$  实验值

Tab 2 The calculated values of  $E_m - E_v$  on this paper and the corresponding values of  $E_B - E_v$ <sup>[5, 11]</sup>,  $E_{Bp} - E_v$ <sup>[6]</sup>, and the experimental values of Au-P type barrier height  $\Phi_p^{pt}$  in reference<sup>[10]</sup>

Semiconductor	This paper	CNL	ETB	p-type barrier height
	$E_m - E_v$ /eV	$E_B - E_v$ /eV	$E_{Bp} - E_v$ /eV	$\Phi_p^{pt}$ (Au) /eV
Si	0.30	0.36	0.03	0.32
Ge	-0.05	0.18	-0.28	0.07
GaP	0.86	0.81	0.83	0.94
InP	0.83	0.86	0.86	0.77
AlAs	1.00	1.05	0.92	0.96
GaAs	0.57	0.50	0.52	0.52
InAs	0.56	0.50	0.50	0.47
AlSb	0.42	0.45	0.53	0.55
GaSb	0.03	0.07	0.16	0.07
InSb	-0.01	0.01	0.22	0.00

在已建立的 Schottky 势垒高度的计算中, 最典型是 Tersoff 的电中性能级  $E_B$  方法, 该方法计算中只用到完整半导体晶体 (即本征半导体) 的能带本征值  $E_n(k)$ , 不涉及半导体的掺杂 (施主或受主) 问题, 所以可以认为, 电中性能级方法和平均键能方法一样, 所计算的是金属-本征半导体的接触势垒高度 (图 2 所示)。图 2 金属-本征半导体的接触势垒模型中, 半导体费米能级  $E_F^\dagger$  不同于半导体物理中的“本征费米能级”。因为根据载流子密度 ( $n = p$ ) 所定义的“本征费米能级”基本上位于禁带中央  $E_v$ 。如果图 1(b) 中的  $E_F^\dagger$  就是本征费米能级  $E_i$ , 那么由式 1(a)、(b) 得到的接触势垒高度  $\Phi_p$  与实验事实不符, 实际上大多数金属-半导体的接触势垒高度  $\Phi_p$  与  $\Phi_n$ 。接触势垒模型图 2 中的半导体费米能级  $E_F^\dagger$  表示的是本征半导体价电子处于基态 (能带中价带全满, 导带全空不存在载流子,  $n = 0, p = 0$ ) 时的费米能级, 为区别于半导体物理中的“本征费米能级”, 把这个  $E_F^\dagger$  称为“本征半导体基态费米能级”。在电中性能级  $E_B$  计算方法中用到的“费米能级钉扎”, 实际上是假设电中性能级  $E_B$  就是本征半导体基态费米能级  $E_F^\dagger$  的另一种说法。也就是说, 电中性能级  $E_B$  方法和平均键能  $E_m$  方法一样, 都认为他们采用的参考能级  $E_B$  或  $E_m$  在数值上等于本征半导体的基态费米能级  $E_F^\dagger$  的。

(下转 453 页)

## 参 考 文 献

- 1 李维諲, 郭 强 液晶显示应用技术[M], 北京: 电子工业出版社, 2000: 54~ 172
- 2 Lee Yeh **MLS Driving** 的工作原理, w3 Epson.com.tw/electronics/event/2-LeeYeh\_1.pdf[N], 2001: 2~ 11
- 3 殷之江 *MLS Driver*, w3 Epson.com.tw/electronics/event[N], 2000: 4~ 12
- 4 陈贵灿 **CMOS 集成电路设计**[M], 西安: 西安交通大学出版社, 2000: 206~ 209



钟 锐(ZHONG Rui) 男, 1975 年 10 月生, 东南大学微电子中心博士研究生, 现主要从事芯片可测性设计及测试技术的研究, 以及液晶显示应用技术和薄膜电子学等方面的研究工作。



魏同立(WEI Tongli) 男, 1934 年 4 月生, 东南大学微电子中心教授, 博士生导师, 微电子学与固体电子学学术带头人, 享受国务院颁发的政府特殊津贴, 主要研究方向为 ULSI 器件物理与新电路、新材料、新器件研究以及 ULSI 设计方法与系统集成技术研究等。

## (上接第 415 页)

大多数金属-半导体接触势垒高度的实验结果表明, 由金属-n 型半导体接触势垒实验得到  $\phi_n$  然后根据  $\phi_p = E_g - \phi_n$  [见式 1(c)] 计算  $\phi_p$  值, 和直接由金属-p 型半导体接触势垒测量得到  $\phi_p$  值, 两种做法得出的  $\phi_p$  值大致相同。这个结果表明,  $\phi_p$  (或  $\phi_n$ ) 与半导体掺杂(施主或受主杂质)没有明显的关系, n 型半导体接触势垒, p 型半导体接触势垒以及本征半导体接触势垒, 三者的  $\phi_p$  值(或  $\phi_n = E_g - \phi_p$  值)应该是大致相同的。所以在表 2 中, 才能够将由计算金属-本征半导体接触得到的势垒高度  $E_m - E_v$ ,  $E_B - E_v$  等计算值同  $\phi_p^{pt}$  (Au) 实验值进行比较。

## 参 考 文 献

- 1 王仁智, 黄美纯 异质结价带边不连续  $\Delta E_v$  的理论计算 物理学报, 1991; **40**(10): 1 683~ 1 688
- 2 王仁智, 郑永梅, 李书平 平均键能  $E_m$  的物理内涵探讨 物理学报, 2001; **50**(2): 273~ 277
- 3 Schottky W. Zur halbleiterttheorie der sperrschicht-und spitzengleichrichter *Z Phys.*, 1939; **113**: 367~ 414
- 4 Cowley A M, Sze S M. Surface states and barrier height of metal-semiconductor systems *J Appl Phys.*,

1965; **36**: 3 212~ 3 220

- 5 Tersoff J. Schottky barrier heights and the continuum of gap states *Phys Rev Lett*, 1984; **52**: 465~ 468
- 6 Mönch W. Empirical tight-binding calculation of the branch-point energy of the continuum of interface-induced gap states *J Appl Phys.*, 1996; **80**: 5 076~ 5 082
- 7 Chadi D J, Cohen M L. Special points in the brillouin zone *Phys Rev.*, 1973; **B8**: 5 747~ 5 753
- 8 Bachelet G B, Hamann D R, Schlüter M. Pseudopotentials that work: from H to Pu *Phys Rev.*, 1982; **B26**: 4 199~ 4 228
- 9 Landolt-Bornstein, New Series, Group III, Vol. 22, part a, edited by O. Madelung, Springer, New York (1982)
- 10 Tersoff J. Schottky barrier and semiconductor band structures *Phys Rev.*, 1985; **B32**: 6 968~ 6 971
- 11 Tersoff J. Calculation of schottky barrier heights from semiconductor band structures *Surface Science*, 1986; **168**: 275~ 284



李书平(LI Shuping) 1973 年 11 月出生, 男, 福建闽侯人, 1996 年毕业于厦门大学物理系, 现为厦门大学物理学系讲师, 主要从事半导体能带与电子态的理论研究。