

Cálculo do Coeficiente de Transmissão de uma Junção Metal-Semicondutor Usando a Aproximação WKB

Alexandre Marletta e Euclides Marega Jr.

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

Caixa Postal 369, São Carlos, SP 13560-970, Brazil

e-mail: euclides@uspfs.c.ifqsc.sc.usp.br

Trabalho recebido em 7 de agosto de 1996

Neste trabalho apresentamos o cálculo do coeficiente de transmissão para elétrons incidindo numa barreira Schottky formada por uma junção metal-semicondutor. Para a solução da equação de Schrödinger foi utilizada a aproximação WKB (Wentzel, Kramers e Brillouin), a qual apresentou resultados que mostram a natureza quântica desta estrutura quando o nível de impurezas no semicondutor fica próximo de 10^{18}cm^{-3} .

Abstract

In this work we present the calculations of the transmission coefficient for colliding electrons in a Schottky barrier due to a metal-semiconductor junction. To solve the Schrödinger equation we use the WKB (Wentzel, Kramers and Brillouin) approximation. The results shown the quantum behavior of this structure when the doping level exceeds 10^{18}cm^{-3} .

I. Introdução

A expectativa da tecnologia de integração que vêm sendo desenvolvida nos dias de hoje, é a entrada na produção industrial a partir de 1996 de estruturas CMOS com $0,35\mu\text{m}$ e de 3 a 4 camadas de metal, chegando a $0,25\mu\text{m}$ de gate na estrutura CMOS com 4 a 5 níveis de metalização para alguns milhões de gates por chip em meados de 1997, e finalmente à $0,18\mu\text{m}$ com 5 camadas de metalização e 5 milhões de gates até final de 1999. A pesquisa das próximas gerações será a de otimizar os processos litográficos que permitam a manufatura de estruturas tão minúsculas, a fim de que possam entrar em produção industrial compatível com a demanda de mercado. A miniaturização cada vez maior destas estruturas acaba por revelar a natureza quântica do transporte de cargas entre as junções que as compõem.

O cálculo do coeficiente de transmissão em Mecânica Quântica pode tornar-se um problema insolúvel, dependendo da forma da barreira de potencial em estudo. Para contornar este problema foram desenvolvidos vários métodos aproximativos, que dentro de

certos limites de validade, permitem obter resultados confiáveis e que representam as propriedades físicas do sistema considerado. Infelizmente muitos destes métodos não são explorados durante o período de graduação, devido principalmente à falta de tempo.

Neste trabalho realizamos um estudo sistemático do cálculo do coeficiente de transmissão para elétrons incidindo numa barreira de potencial formada pela junção de um metal com um material semicondutor (barreira Schottky), utilizando a aproximação WKB (Wentzel, Kramers e Brillouin), como uma aplicação ao estudo de métodos aproximativos em Mecânica Quântica. Para o determinado problema foi observado a natureza quântica dos elétrons ($T = 0K$), a qual não pode ser explicada simplesmente pela emissão termiônica da barreira para o material semicondutor.

II. Formação e propriedades da barreira Schottky

Ao formar-se uma junção metal-semicondutor com funções trabalho diferentes é criado um potencial de contato devido à transferência de elétrons entre os materiais (sempre do que tiver função trabalho maior).

Devido ao ordenamento das cargas, as bandas de condução e de valência no semicondutor próximas a interface da junção, são distorcidas pela criação de uma região de cargas espaciais. A Fig. 1 mostra um esquema da formação da junção metal-semicondutor (tipo n), considerando a função trabalho do metal Φ_m maior que a afinidade eletrônica do semicondutor χ . A diferença de potencial que surge na interface é mantida pelo campo eletrostático criado pelas cargas espaciais na região da junção metal-semicondutor (MS).

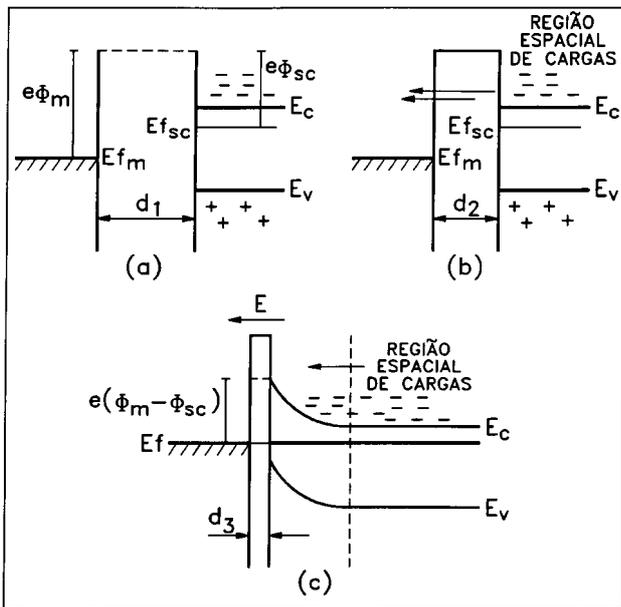


Figura 1. Formação da barreira Schottky. (a) Materiais separados. (b) Formação da barreira (difusão de cargas) $d_2 < d_1$. (c) Barreira Schottky $d_3 \ll d_2, d_1$.

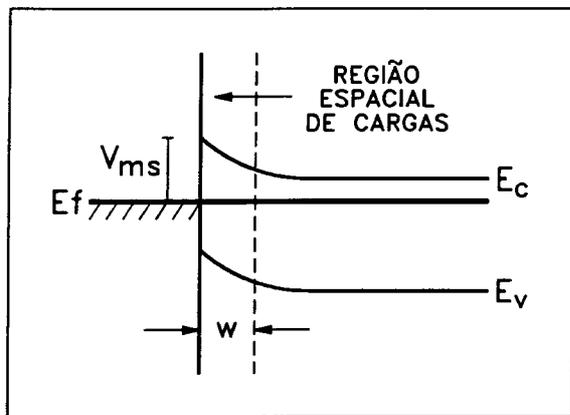


Figura 2. Diagrama de bandas da barreira Schottky.

O diagrama de bandas desta estrutura no equilíbrio está mostrado na Fig. 2, onde observa-se a formação

da barreira de potencial^[1-5] de largura efetiva w (camada de depleção) e altura $e\Phi_{ms}$ em relação ao nível de Fermi E_f . Este tipo de junção é conhecida como barreira Schottky, em homenagem a M. Schottky que em 1920 deu o primeiro passo à sua compreensão.

No modelo teórico de Schottky a forma do potencial é obtida resolvendo-se a equação de Poisson^[4] no semicondutor. A altura da barreira é obtida pela diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do semicondutor. Similar ao cálculo de uma junção p^+n ^[1-5], a camada de depleção w , é obtida considerando-se uma densidade de doadores N_D uniforme:

$$w = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{e^2 N_D} (e\phi^{ext} - e\phi_{bi} + K_B T)} \quad (1)$$

onde, e é a carga elementar, ϵ_s a permissividade elétrica no semicondutor, K_B constante de Boltzmann, T a temperatura, $V_{bi} = -e\Phi_{bi}$ é a diferença de energia entre a altura da barreira ($V_{ms} = -e\Phi_{ms}$ na Fig. 2) e o material semicondutor e $V^{ext} = -e\Phi^{ext}$ representa o potencial externo aplicado à junção. Resolvendo-se a equação de Poisson na região w , a energia potencial para os elétrons obtida é dada por:

$$V(x) = \frac{e^2 N_D}{\epsilon_s} \left(\frac{1}{2} x^2 - wx \right) + V_{ms} \quad (2)$$

com a condição aproximada de neutralidade da carga elétrica, ou seja, para $x > w$ a densidade total de cargas é aproximadamente zero. O que implica em:

$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=w} = 0 \quad (3)$$

como pode ser verificado pela equação (1).

III. A Aproximação WKB

A solução da equação de Schrödinger (ES), pode tornar-se um problema complicado e insolúvel de Física Matemática, dependendo do potencial de interesse. O poço de potencial quadrado e o oscilador harmônico são exemplos importantes de problemas que admitem solução exata da ES, entretanto há vários exemplos de potenciais unidimensionais que se aproximam da realidade Física, mas que não possuem solução exata da ES. Um exemplo deste fato é o potencial formado pela carga imagem na interface metal-vácuo. Para solucionar estes problemas surgiram métodos numéricos, que

se viabilizaram com o desenvolvimento da informática e métodos aproximativos, como exemplos: a aproximação de Rayleigh-Ritz, teoria da perturbação e aproximação semiclássica^[6-8]. Estas por sua vez, possuem limites na sua aplicação.

Em particular, a solução do problema do cálculo do coeficiente de transmissão através de uma barreira de potencial, desde que esta varie suavemente em um comprimento de onda de De Broglie (λ_D) (para partículas incidentes), é possível de se obter a partir da aproximação semi-clássica. Esta aproximação é também conhecida como aproximação WKB em homenagem a Wentzel, Kramers e Brillouin por terem sido os primeiros a aplicarem em problemas de Mecânica Quântica.

O limite de transição entre a Mecânica Quântica (MQ) e a Mecânica Clássica (MC) é análogo ao da transição entre a Ótica Física e a Ótica Geométrica, e que foi utilizada nos primeiros trabalhos que levaram a construção da MQ.

Consideremos a ES dependente do tempo para uma partícula movendo-se em um potencial unidimensional independente do tempo ($V(x)$):

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t) \quad (4)$$

Para examinar a transição da MQ para a MC considere a seguinte forma para a função de onda:

$$\Psi(x, t) = \exp \left\{ \frac{iS(x, t)}{\hbar} \right\} \quad (5)$$

Substituindo a expressão (5) na equação (4) obtém-se:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (6)$$

Da MC é conhecido que a equação de Hamilton - Jacobi é escrita como:

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + V(x) \quad (7)$$

com o momentum para a partícula dado por:

$$p_x = \frac{\partial S_0}{\partial x} \quad (8)$$

o que mostra que a função $S_0 = S_0(x, t)$, chamada de ação, define basicamente a trajetória da partícula. As equações (6) e (7), diferem apenas pelo termo que envolve a constante de Planck \hbar e portanto, o limite clássico é obtido, formalmente, fazendo-se $\hbar \rightarrow 0$.

Como o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, a dependência temporal de $S(x, t)$ pode ser escrita como $S(x, t) = \sigma(x) - Et$. Na aproximação WKB^[6-8] a função $\sigma = \sigma(x)$ é expandida numa série de potência de \hbar , ou seja, na forma:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots \quad (9)$$

o que resulta no seguinte sistema infinito de equações de mesma potência de \hbar ,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \sigma_0}{\partial x} \right)^2 + 2m[V(x) - E] &= 0 \\ \left(\frac{\partial \sigma_1}{\partial x} \frac{\partial \sigma_0}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma_0}{\partial x^2} &= 0 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (10)$$

cuja solução para o cálculo de $\Psi(x)$, até a primeira ordem em \hbar , é:

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right\} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right\} \quad (11)$$

onde, C_1 e C_2 são constantes arbitrárias e $p(x)$ o momentum da partícula dado por:

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad \text{se } E > V(x)$$

e ou

$$p(x) = i\sqrt{2m[V(x) - E]} \quad \text{se } V(x) > E$$

Nos pontos x_i onde, a função de onda (eq. (11)) tem uma singularidade, a aproximação WKB deixa de ser válida. Entretanto, se considerarmos o ponto de inversão x_0 em um ponto x próximo, a aproximação WKB será válida desde satisfaça a seguinte desigualdade:

$$|x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2}{m \left| \frac{dV(x)}{dx} \right|} \right] = \frac{\lambda}{4\pi} \quad (12)$$

onde λ é o comprimento de onda de De Broglie referente ao momentum da partícula no ponto x .

Considere o problema do cálculo da transmissão^[6-8] através de uma barreira de potencial descontínua. Se esta barreira não conter nenhum ponto de inversão e sua descontinuidade for uma função suave de x , como a barreira da Fig. 3, pode-se usar a aproximação WKB na região separada pela descontinuidade. O potencial nesta região poderá ter qualquer forma desde que varie suavemente.

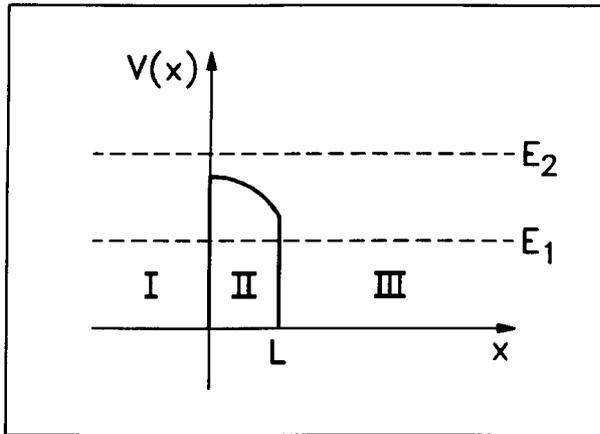


Figura 3. Barreira de potencial suave.

Seja uma partícula de energia E , movendo-se em uma barreira como a indicada na Fig. 3. Nas regiões I e II a partícula é livre, portanto as funções de onda são:

$$\Psi_I = Ae^{ik_0x} + Be^{-iK_0x} \quad \text{e} \quad \Psi_{III} = Ce^{iK_0x} \quad (13)$$

Na região II a função de onda, na aproximação WKB, é dada pela equação (11), onde $x_1 = 0 < x < L$. Através das condições de continuidade de Ψ e $d\Psi/dx$ em $x = 0$ e $x = L$ para os coeficientes A, B, C, C_1 e C_2 encontra-se a seguinte expressão para T :

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx \right\} \quad (14)$$

onde x_1 e x_2 são tais que $V(x_1) = V(x_2) = E$. A aproximação WKB^[6] para o cálculo de T , através de expressão (14), é válida para na condição em que $T \ll 1$.

IV. Cálculo do coeficiente de transmissão

Para exemplificar o método proposto anteriormente, vamos considerar a estrutura de um fotodiodo^[4] formada por uma junção metal-semicondutor (do tipo n), como está diagramado na Fig. 4. Para se evitar perdas por reflexão ou absorção, geralmente a camada de metal é muito fina (da ordem de 100 Å) e ainda revestida com uma camada anti-refletora.

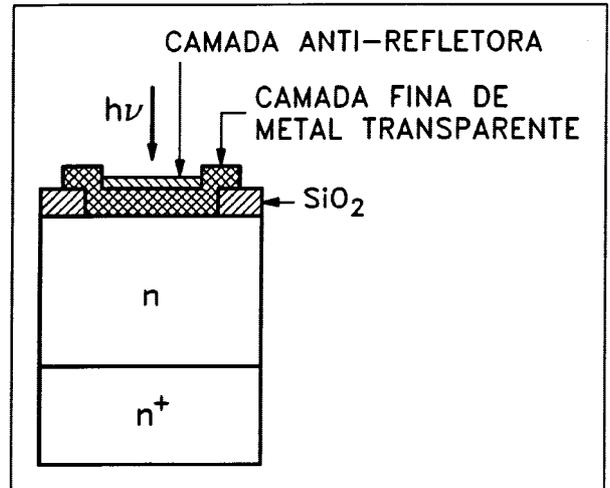


Figura 4. Fotodiodo formado por uma junção metal-semicondutor.

Este fotodiodo pode operar de vários modos, dependendo de como é polarizado e da energia do fóton incidente. Se polarizado diretamente, terá seu funcionamento similar a um diodo comum, sendo interessante sua análise quando este estiver polarizado reversamente. Se Φ_B for a tensão reversa de ruptura, E_g a energia do "gap" do semicondutor e $h\nu$ a energia do fóton incidente, suponha então, que o fotodiodo esteja operando sob as seguintes condições:

- i. $E_g > h\nu > V_{ms}$, $\Phi^{ext} > \Phi_B$. Os únicos elétrons que podem absorver os fótons incidentes, são os do metal e como esta energia é maior que da altura da barreira, estes elétrons têm energia suficiente para transpô-la.
- ii. $E_g > h\nu$, $V_{ms} > h\nu$, $\Phi^{ext} > \Phi_B$. Os fótons incidentes ainda são absorvidos no metal, mas não tem energia para transpor a barreira. Entretanto, pelo efeito Quântico de tunelamento, estes elétrons podem vir a transpor a barreira de potencial.

Na situação i, os foto-elétrons são os responsáveis pela corrente elétrica reversa do fotodiodo. Entretanto, na situação ii, a única possibilidade de corrente através da junção MS é devido ao efeito de tunelamento (Fig. 5).

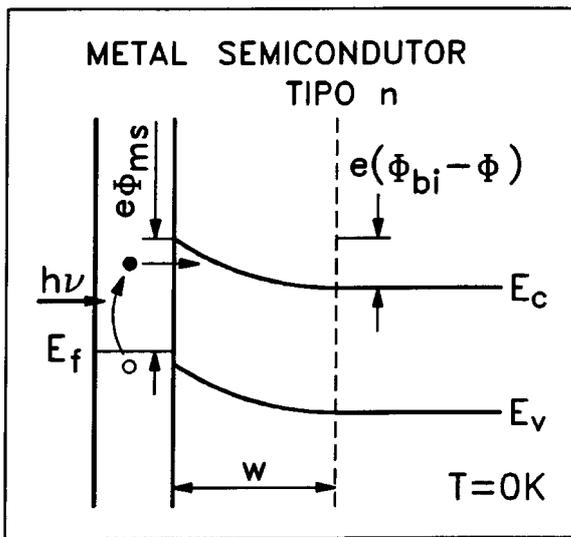


Figura 5. Altura efetiva da barreira Schottky para o fotodiodo.

Deste modo, é interessante calcular a taxa de transmissão de elétrons foto-gerados do metal para o semicondutor em função da energia e do potencial Φ^{ext} aplicado ao semicondutor. Para tanto devemos resolver a ES unidimensional, considerando a barreira de potencial indicada na Fig. 6, onde a energia E será medida a partir do nível de Fermi. Para facilitar os cálculos

mas sem perda na natureza dos resultados finais vamos considerar $E_f = 0$ no metal.

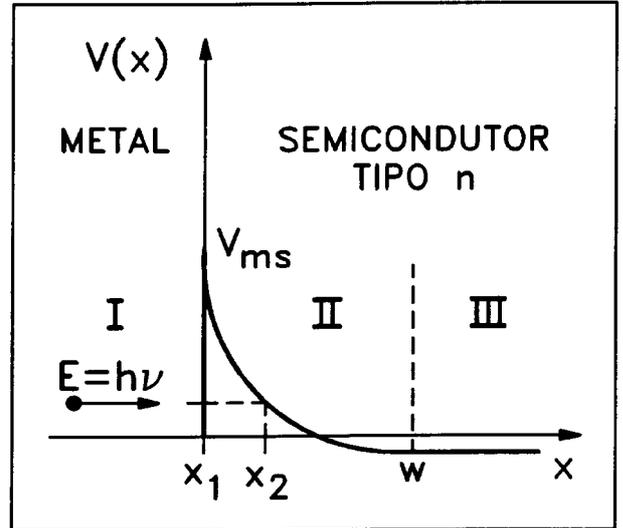


Figura 6. Modelamento da barreira Schottky para o cálculo do coeficiente de transmissão usando a aproximação WKB.

A solução da ES para este problema é complicada, não tendo uma forma analítica, mas pode ser calculada utilizando-se a aproximação WKB proposta anteriormente onde o coeficiente de transmissão T pode ser calculado através da expressão (14).

Consideremos um fotodiodo formado por uma junção Au(Ouro)-nGaAs^[9] e com $N_D = 10^{16}/\text{cm}^3$, $10^{17}/\text{cm}^3$ e $10^{18}/\text{cm}^3$. Nesta situação $V_{ms} = 0.8\text{eV}$ e $V_{bi} = 0.75\text{eV}$.

A barreira de potencial $V(x)$ na junção MS, em função de N_D e V^{EXT} , calculada a partir das equações (1) e (2), é apresentada na Fig. 7. Através dos gráficos representativos é fácil notar que se a concentração N_D aumentar, a espessura efetiva da barreira diminui.

O cálculo do coeficiente de transmissão para as barreiras de potenciais apresentadas na Fig. 7, utilizando a expressão (14), é representado pela Fig. 8. Observa-se que, a energia necessária para que o coeficiente de transmissão aumente consideravelmente é cada vez menor, para valores maiores de N_D ou $|V^{ext}|$, devido ao fato de que estes parâmetros diminuem o valor efetivo de w , formando uma barreira mais estreita.

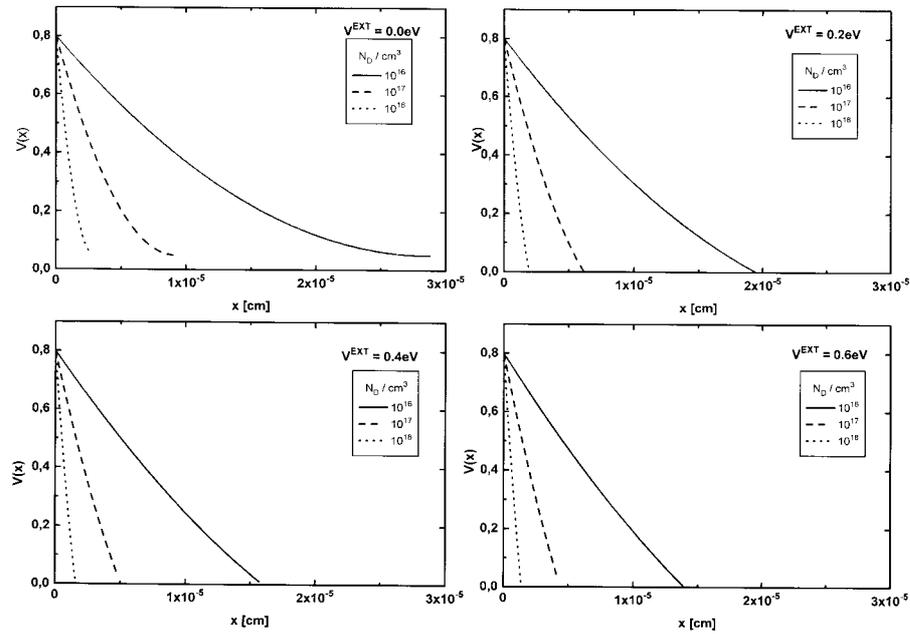


Figura 7. Barreira de potencial obtida para vários potenciais externos aplicados.

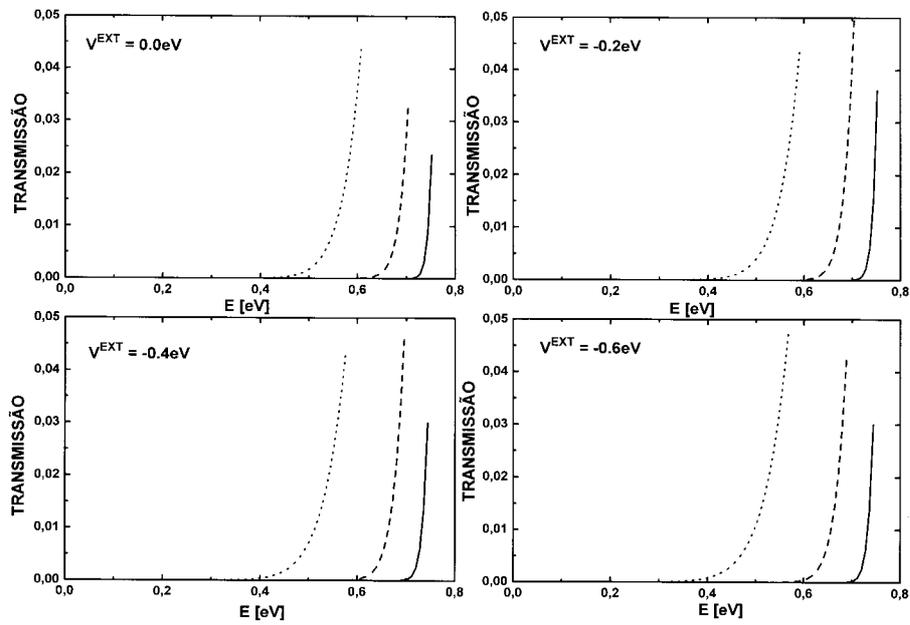


Figura 8. Coeficiente de transmissão em função do potencial externo aplicado.

Este resultado pode ser melhor explorado através do cálculo de T em função de N_D e V^{ext} para um dado valor de energia do elétron incidente E , como é apresentado na Fig. 9.

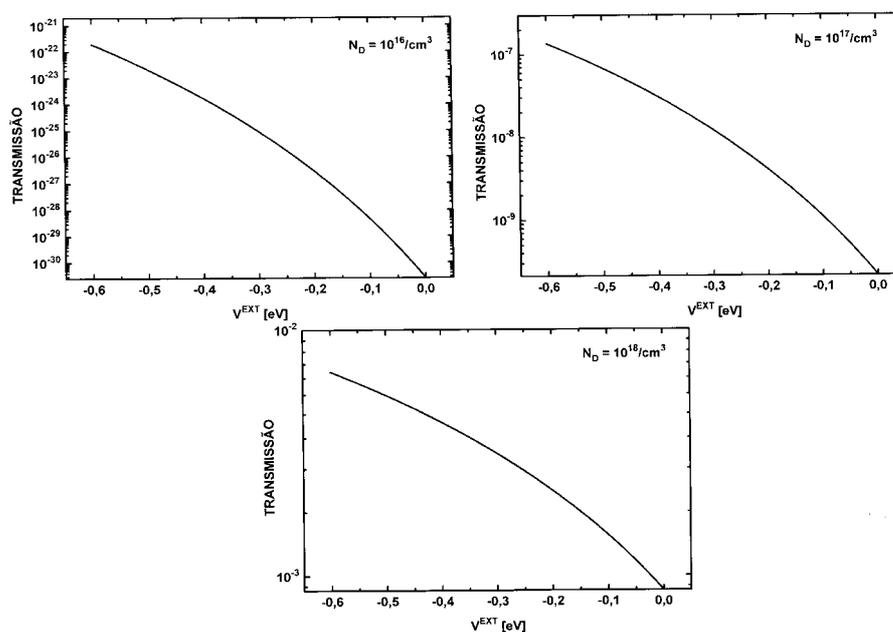


Figura 9. Coeficiente de transmissão em função do potencial externo aplicado, para várias concentrações de portadores no material semiconductor.

V. Conclusões

Mostramos nesta comunicação que o cálculo do coeficiente de transmissão, calculado a partir da solução da equação de Schrödinger, que para uma dada barreira de potencia pode se tornar um problema de Física Matemática analiticamente insolúvel e tão complicado quanto a forma funcional da própria barreira. Entretanto, existem métodos aproximativos para a solução destes problemas, dentro de certos limites de validade, e que fornecem soluções simples e tão confiáveis quanto a solução exata. Mas devido a falta de tempo durante o período de Graduação estes métodos não são abordados e é dentro deste contexto que foi apresentado. De modo a incentivar o seu estudo, foi apresentado a aplicação de um destes métodos, a aproximação WKB, em um problema de interesse tanto físico quanto tecnológico. O cálculo do coeficiente de transmissão através da barreira de potencial Schottky formada na junção metal-semiconductor, demonstra assim que estes métodos além de aplicação simples é uma importante ferramenta matemática para a solução da equação de Schrödinger, facilmente implementados tanto em pacotes matemáticos como o Mapple, ou o Matemática, quanto em linguagens de programação como o Fortran 77, além de forne-

cerem resultados que revelam a natureza quântica do movimento dos elétrons em estruturas semicondutoras.

Referências

1. B. L. Saara, *Metal - Semiconductor Schottky Barrier Junction and Their Application*, Plenum Press - NY(1984).
2. S. S. Li, *Semiconductor physical eletrinics*, Plenum Press - NY(1993).
3. J. P. McKelvey, *Solid State and Semiconductor Physics*, Harper & Row - NY(1966).
4. S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John While & Sons - NY(1981).
5. R. Dalven, *Introductions to Applied Solid State Physic*, Plenum Press - NY(1980).
6. N. Constantinescu and E. Magyari, *Problems in Quantum Mechanics*, Pergamon Press - NY(1971).
7. S. Borowitz, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin, INC. - NY(1967).
8. D. S. Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, Holden-Day, INC. - San Francisco(1980).
9. J. M. Borrego, R. J. Gutmann and S. Ashok, *Appl. Phys. Lett.* **3**, 30 1977.