材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2021.03.013

WSe_2 场效应晶体管的源漏接触特性研究

张　璐[1,2]，张亚东[1]，孙小婷[1,3]，贾昆鹏[1,2]，吴振华[1,2]，殷华湘[1,2]*

（1. 中国科学院微电子研究所 微电子器件与集成技术重点实验室，北京 100029；2. 中国科学院大学，北京 100049；
3. 河北工业大学 电子信息工程学院 电子材料与器件天津重点实验室，天津 300401）

摘　要： 二硒化钨（WSe_2）具有双极导电特性，可以通过外界掺杂或改变源漏金属来调节载流子传输类型，是一类特殊的二维纳米材料，有望在未来集成电路中成为硅（Si）的替代材料。文章采用理论与实验相结合的方式系统分析了 WSe_2 场效应晶体管中的源漏接触特性对器件导电类型及载流子传输特性的影响，通过制备不同金属作为源漏接触电极的 WSe_2 场效应晶体管，发现金属/WSe_2 接触的实际肖特基接触势垒高低极大地影响了晶体管的开态电流。源漏金属/WSe_2 接触特性不仅取决于接触前理想的费米能级差，还受到界面特性，特别是费米能级钉扎效应的影响。

关键词： 二硒化钨；双极特性；金属功函数；肖特基势垒；源漏接触；费米能级钉扎

中图分类号： TN386　**文章编号：** 1001－5868(2021)03－0371－04

Research on Source/Drain Contact Characteristics of WSe_2 Field Effect Transistors

ZHANG Lu[1,2], ZHANG Yadong[1], SUN Xiaoting[1,3], JIA Kunpeng[1,2], WU Zhenhua[1,2], YIN Huaxiang[1,2]

(1. Key Lab. of Microelectronics Devices and Integration Technol., Institute of Microelectronics of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, CHN; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, CHN; 3. Tianjin Key Lab. of Electronic Materials and Devices, College of Electronic and Information Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, CHN)

Abstract: Tungsten diselenide (WSe_2) has ambipolar conductivity characteristics, which can be adjusted by external doping or changing source/drain metals. It is a special type of two dimensional nanomaterials and is expected to replace silicon (Si) in integrated circuits in the future. In this paper, the theory and experiments were combined to systematically analyze the influence of the source/drain contact characteristics of WSe_2 field effect transistor on the conductivity type and carrier transport characteristics of the device. By preparing WSe_2 field effect transistors with different metals as the source/drain contact electrodes, it is found that the actual Schottky contact barrier height of the metal/WSe_2 contact greatly affects the on-state current of the transistor. The source/drain contact characteristics of the metal/WSe_2 depend on the ideal Fermi level difference before contact, and also they will be affected by the interface characteristics, especially the Fermi level pinning effect.

Key words: tungsten diselenide; ambipolar behavior; metal work function; Schottky barrier; source/drain contact; Fermi level pinning

0　引言

随着半导体集成电路工艺进入 3 nm 及以下技术节点，传统硅（Si）基晶体管的尺寸微缩面临漏电功耗大幅攀升、短沟道效应愈加严重等关键挑战，对集成电路的性能与可靠制造产生严重影响。近年来，以过渡金属硫族化合物（TMD）为代表的单层二维纳米材料因具有原子级的物理厚度、较高的载流子密度以及可以媲美 Si 的载流子迁移率，成为在未

收稿日期：2021－03－10.
基金项目：国家重点研发计划项目（2016YFA0202300）；国家自然科学基金项目（61774168）.
* **通信作者：**殷华湘

来替代传统 Si 基材料以延续摩尔定律发展的重要候选新材料之一[1-2]。

在低功耗数字集成电路中，通常由 CMOS 反相器构成最基本的电路单元。其中，CMOS 反相器由一个 n 型晶体管和一个 p 型晶体管构成互补逻辑以实现极低功耗的信号反相操作。大多数的 TMD，如二硫化钼(MoS_2)、二硫化钨(WS_2)等，具有电子导电特性，可以作为 n 型晶体管的沟道材料[3-4]。然而，为实现低功耗 CMOS 集成电路，研究空穴导电的 p 型 TMD 并制备稳定、性能优良的 p 型晶体管成为重要挑战。二硒化钨(WSe_2)是一类特殊的 TMD，具有电子和空穴的双极导电特性。利用金属与 WSe_2 的接触特性可以在场效应晶体管中实现 n 型和 p 型的不同载流子传输[5-7]，深入研究晶体管中不同金属的源漏接触特性以实现沟道导电类型调控并优化相应器件特性成为亟待解决的重要课题。

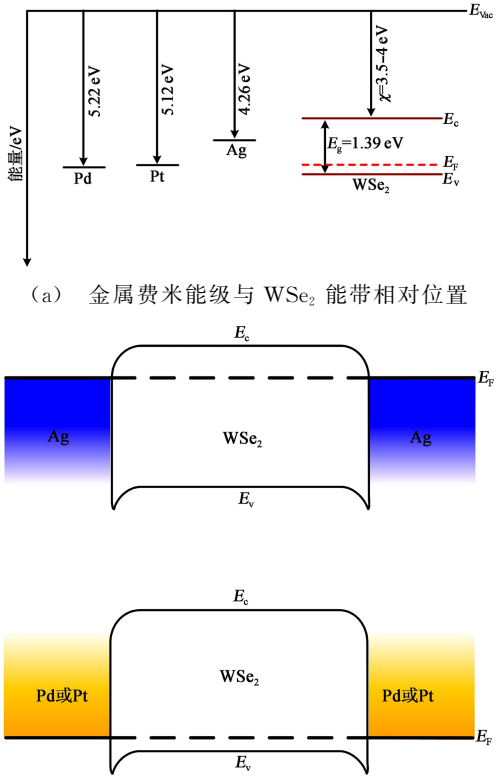
本文先从理论方面分析了金属与 WSe_2 之间的接触原理，再结合实验制备了以钯(Pd)、铂(Pt)和银(Ag)作为源漏金属电极的 WSe_2 场效应晶体管，通过对比分析金属/WSe_2 接触界面的电学参数，发现金属与 WSe_2 之间的接触特性不仅与金属功函数有关，还受到接触界面费米能级钉扎效应的影响。

1 WSe_2 与金属的接触理论

由于半导体与金属之间存在费米能级差，当两者紧密接触时会形成统一费米势，在接触界面产生能带弯曲，由此形成肖特基势垒。该势垒的存在降低了载流子的注入效率，从而产生较大的寄生电阻。

根据肖特基接触理论，金属费米能级与半导体费米能级的相对位置可以影响接触界面的肖特基势垒高度。当金属费米能级高于 WSe_2 费米能级时，电子会从金属注入 WSe_2；相反，当金属费米能级低于 WSe_2 费米能级时，电子则会从 WSe_2 注入金属中，即在 WSe_2 中形成空穴注入。

在本文中，我们选择 Pd，Pt，Ag 三种不同自由电子真空能级的金属作为源漏接触电极，其功函数分别为 5.22，5.12 和 4.26 eV[8]。图 1(a)展示了不同金属与 WSe_2 之间费米能级的相对位置，其中 Pd 和 Pt 两种金属的费米能级低于 WSe_2 的费米能级，因此当 Pd 或 Pt 与 WSe_2 相接触时，根据肖特基理论，可以形成 p 型载流子，即空穴传输。由于 Ag 的功函数值与 WSe_2 的电子亲和势相差很小，使得两者接触时更容易形成 n 型载流子，即电子传输。



(a) 金属费米能级与 WSe_2 能带相对位置

(b) 金属与 WSe_2 接触形成的理论势垒模型

图 1 三种金属与 WSe_2 接触前能带的相对位置图与接触时形成的理论势垒图

2 不同金属接触实验与结果分析

为了研究第 1 节所描述的 WSe_2 与金属间的接触理论在实际器件制备中的有效性，在本节中我们通过工艺实验分别制备了以 Pd，Pt，Ag 作为源漏接触电极的 WSe_2 场效应晶体管，以开展电学特性分析，深入研究其实际接触特性。

2.1 WSe_2 场效应晶体管的制备与表征

实验过程中所使用的薄层 WSe_2 材料由传统的微机械剥离法[2,9]制备。该方法可以高效、高质量地形成二维薄层材料，是二维纳米材料最常用的制备方法之一。其主要方法步骤与工艺原理是通过蓝膜胶带施加机械力粘附 WSe_2 原子材料晶体，通过克服二维材料的层间范德华相互作用，经过反复剥离将块状的二维材料逐渐减薄从而获得少层甚至单层的二维薄层材料。通过微机械剥离法制备的二维材料结晶质量好，具有较高的载流子迁移率。

运用原子力显微镜(AFM)来较精确地表征 WSe_2 薄层材料厚度、粗糙度等关键薄膜参数。图 2 为 AFM 表征的薄层 WSe_2 样品表面形貌。从图中

可知，薄层 WSe_2 样品的厚度约为 42 nm，由于单层 WSe_2 的厚度约为 0.67 nm，故该样品包含约 62 层理想的单层 WSe_2 薄膜[7]。此外，WSe_2 样品的表面粗糙度约为 0.5 nm，表明通过微机械剥离法制备的薄层 WSe_2 表面平整、结晶质量高。

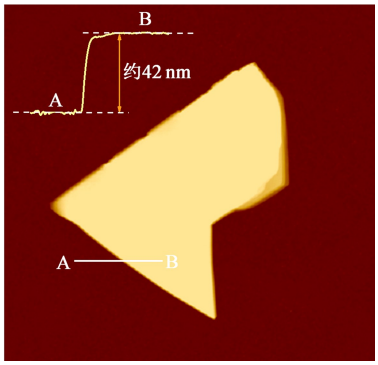


图 2　薄层 WSe_2 样品的 AFM 表征图

制备 WSe_2 晶体管的集成工艺流程如图 3 所示。实验中使用 p 型重掺杂的 8 inch Si 晶圆作为初始衬底，同时作为晶体管的背栅电极。在去除 Si 晶圆表面的自然氧化物后，通过原子层沉积(ALD)技术在衬底上沉积 20 nm 高介电常数的氧化铪(HfO_2)薄膜作为栅介质层，并在 450 ℃氮气环境下进行快速热退火(RTA)处理，以提高绝缘薄膜的结晶度与致密性。然后，通过微机械剥离法将块状 WSe_2 剥离成薄层材料再转移至 HfO_2/Si 衬底上作为场效应晶体管的沟道材料。接下来，通过光刻定义源漏接触区域，使用电子束蒸发法分别沉积源漏金属电极 Pd/Au，Pt/Au 和 Ag/Au，厚度均为 10/40 nm。最后，使用丙酮和无水乙醇进行金属剥离工艺(lift-off)，再经过去离子水清洗并用氮气枪吹干，最终得到全局背栅结构的 WSe_2 场效应晶体管。所制备的 WSe_2 晶体管顶视光学显微镜照片如图 4 所示。器件制备完成后，使用 Keithley 公司生产的 4200-SCS 系列半导体电学参数测试仪对 WSe_2 晶体管进行详细电学测试与分析。

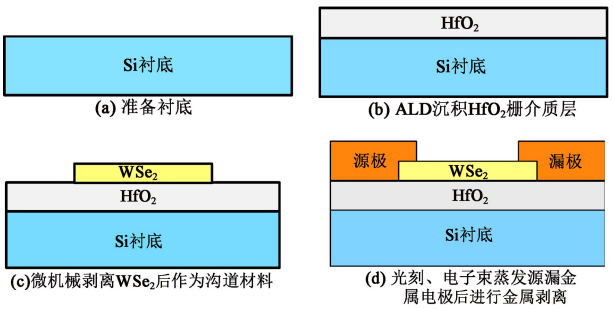


图 3　WSe_2 场效应晶体管的制备流程

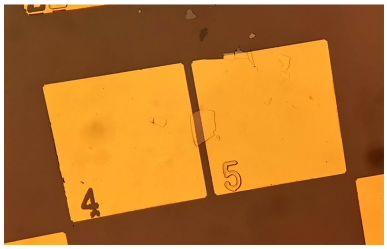
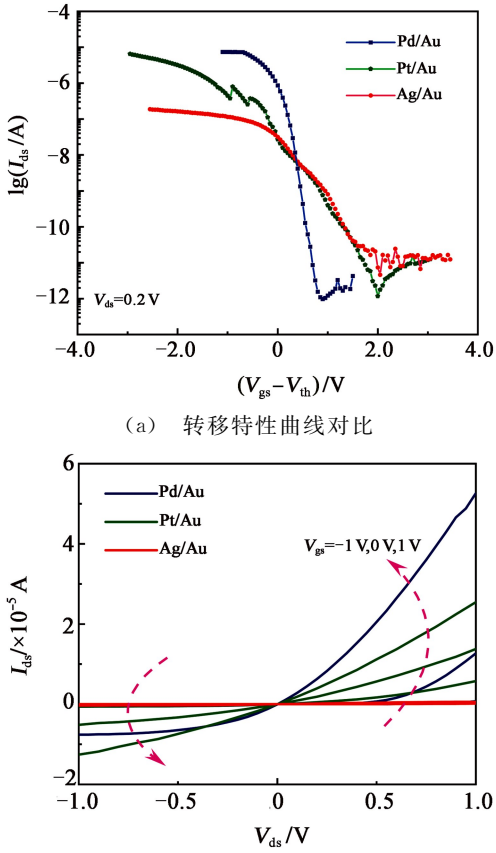


图 4　制备完成的 WSe_2 器件光学照片

2.2　WSe_2 场效应晶体管的电学特性

图 5(a)与(b)展示了不同接触金属 WSe_2 场效应晶体管的源漏电流-栅电压转移特性曲线(I_{ds}-V_{gs})以及源漏电流-漏电压输出特性曲线(I_{ds}-V_{ds})。其中，在 I_{ds}-V_{gs} 曲线中为了进一步的特性对比，采用固定电流法绘制[10]。



(a)　转移特性曲线对比

(b)　输出特性曲线对比

图 5　不同源漏接触时 WSe_2 器件的电学特性对比

由图 5 可知，在 Pd，Pt 和 Ag 三种源漏金属接触下，WSe_2 器件都表现为 p 型载流子传输特性。其中以 Pd/WSe_2 接触时器件电学特性最优，电流开关比最大，亚阈值摆幅最小；Pt/WSe_2 接触时器件电学特性次之；Ag/WSe_2 接触时器件电学特性最差，开态电流远小于前两种器件。

根据前面的理论分析，Ag 与 WSe_2 接触类型应为 n 型，且已有报道预测单层 WSe_2 材料的导带边缘态主要源自金属钨(W)的 d 轨道，当 Ag 与 WSe_2 接触时，Ag 原子中 的 d 轨道电子可与 W 原子中的 d 轨道电子产生杂化，从而可以提高电子的注入效率，形成较低的接触电阻[5,11]。然而，在本文实验中，Ag 与 WSe_2 之间却形成 p 型接触。通过深入分析推测，这是由于金属与 WSe_2 的接触界面存在很强的费米能级钉扎效应，从而使得理想费米能级差较小的 Ag 与 WSe_2 接触偏离了原有理论预测，从而导致晶体管导电类型的偏移。

造成金属/WSe_2 接触界面费米能级钉扎的因素有很多，包括金属引入的间隙态、WSe_2 的表面缺陷以及光刻工艺过程中引入的有机残留等。这些因素会使得金属/WSe_2 界面产生大量的界面态，影响了正常载流子的注入及传输特性，从而将 WSe_2 表面的费米能级“钉扎”到带隙中间靠近价带顶的位置，使得器件表现为 p 型载流子传输，并在界面处形成较大的肖特基势垒。如图 5 所示，Ag/WSe_2 器件的开态电流远小于 Pd/WSe_2 器件和 Pt/WSe_2 器件的开态电流，这是因为 Ag/WSe_2 界面处费米能级钉扎效应最强，势垒最大，导致产生的接触电阻最大，影响了载流子整体传输效率。

2.3 金属与 WSe_2 沟道的接触特性分析

为了进一步分析不同源漏金属的 WSe_2 晶体管接触特性与实际接触金属之间的关系，我们采用传统的参数提取方法[12-14]分别提取了三种器件源漏区的接触电阻(R_C)与肖特基势垒高度(H_{SB})，如表 1 所示。

表 1 不同 WSe_2 器件源漏区 R_C 与 H_{SB} 参数对比

源漏金属	$R_C/(\Omega \cdot \mu m)$	H_{SB}/meV
Pd/Au	1.1×10^5	295
Pt/Au	7.65×10^4	330
Ag/Au	4.2×10^5	478

由表 1 可知，随着 Pd，Pt，Ag 三种金属功函数逐渐减小以及界面费米能级钉扎效应的影响，其与 WSe_2 接触界面的肖特基势垒高度逐渐增大，这说明金属与 WSe_2 沟道之间的接触特性可以通过改变接触金属的功函数进行调控。一方面，接触界面的电流传输效率受肖特基势垒高度影响极大，因此 Pd/WSe_2 源漏接触的器件开态电流最大，而 Pt/WSe_2 源漏接触的肖特基势垒高度和前者差不多，因此表现出类似的导电电流；另一方面，Ag/WSe_2 源漏接触的肖特基势垒高度远大于前两者，所以器件开态电流最小。

3 结论

本文结合理论与实验，探究了 WSe_2 与 Pd，Pt，Ag 三种不同金属接触时场效应晶体管的源漏接触特性。结果表明金属与 WSe_2 的接触特性可以有效调节器件的导电类型及传输特性，显著影响开态电流。经过深入分析，还发现对于具有双极特性的 WSe_2 材料，其理论费米能级差较小的晶体管的导电类型不完全决定于功函数差，还与金属与 WSe_2 接触界面态产生的费米能级钉扎效应有密切关系。

参考文献：

[1] Moore G E. Progress in digital integrated electronics[C]// Proc. of Electron Devices Meeting, 1975: 11-13.

[2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306(5696): 666-669.

[3] Chhowalla M, Shin H S, Eda G, et al. The chemistry of two dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets [J]. Nature Chem., 2013, 5(4): 263-275.

[4] Sahin H, Tongay S, Horzum S, et al. Anomalous Raman spectra and thickness-dependent electronic properties of WSe_2 [J]. Phys. Rev. B, 2013, 95(12): 165409.

[5] Liu W, Kang J, Sarkar D, et al. Role of metal contacts in designing high-performance monolayer n-type WSe_2 field effect transistors[J]. Nano Lett., 2013, 13(5): 1983-1990.

[6] Fang H, Chuang S, Chang T C, et al. High-performance single layered WSe_2 p-FETs with chemically doped contacts [J]. Nano Lett., 2012, 12(7): 3788-3792.

[7] Das S, Appenzeller J. WSe_2 field effect transistors with enhanced ambipolar characteristics[J]. Appl. Phys. Lett., 2013, 103(10): 103501.

[8] Kang W M, Lee S, Cho I-T, et al. Multi-layer WSe_2 field effect transistor with improved carrier-injection contact by using oxygen plasma treatment[J]. Solid State Electron., 2018, 140: 2-7.

[9] Li H, Wu J, Yin Z, et al. Preparation and applications of mechanically exfoliated single-layer and multilayer MoS_2 and WSe_2 nanosheets[J]. Accounts of Chemical Research, 2014, 47(4): 1067-1075.

[10] Ortiz-Conde A, Garcia Sanchez F J, Liou J J, et al. A review of recent MOSFET threshold voltage extraction methods[J]. Microelectron Reliab., 2002, 42(4/5): 583-596.

(下转第 384 页)

MRS Internet J. Nitride Semicond. Res., 1997, 2(27-31): U32-U42.

[4] Chichibu S, Azuhata T, Sota T, et al. Spontaneous emission of localized excitons in InGaN single and multiquantum well structures[J]. Appl. Phys. Lett., 1996, 69(27): 4188-4190.

[5] Narukawa Y, Kawakami Y, Fujita S, et al. Recombination dynamics of localized excitons in $In_{0.20}Ga_{0.80}N$-$In_{0.05}Ga_{0.95}$ multiple quantum wells[J]. Phys. Rev. B., 1997, 55(4): R1938-R1941.

[6] Hangleiter A. Optical properties and polarization fields in the nitrides [C]// International Conf. on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter, Osaka, Japan, 2000: 130-140.

[7] Kim M H, Schubert M F, Dai Q, et al. Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 91(18): 183507.

[8] Schmidt M C, Kim K C, Farrell R M, et al. Demonstration of nonpolar m-plane InGaN/GaN laser diodes[J]. Jpn. J. Appl. Phys., 2007, 46(8/11): L190-L191.

[9] Wei Lu, Wei Dahu, Yang Sheng, et al. Study on GaN-based light emitting diode with InGaN/GaN/InGaN multilayer barrier[J]. Opt. Quant. Electron, 2012, 44(35): 75-81.

[10] Karan H, Saha M, Biswas A, et al. Analysis of luminescence spectra of rectangular and trapezoidal InGaN/GaN multiple quantum wells under varying bias conditions [J]. Opt. Mater., 2018, 86: 247-255.

[11] Ryu H Y, Lee S H. Simulation of the effects of AlGaN electron blocking layers on the characteristics of InGaN blue light-emitting diodes[J]. J. Korean Phys. Soc., 2012, 61(9): 1395-1399.

[12] Yang Bin, Guo Zhiyou, Xie Nan, et al. A GaN-AlGaN-InGaN last quantum barrier in an InGaN/GaN multiple-quantum-well blue LED[J]. Chin. Phys. B, 2014, 23(4): 1-4.

[13] Park S H, Moon Y T, Han D S, et al. Comparison of light emission in InGaN/GaN light-emitting diodes with graded, triangular and parabolic quantum-well structures[J]. J. Korean Phys. Soc., 2012, 60(3): 505-508.

[14] Yu Huabin, Chen Dian, Ren Zhongjie, et al. Enhanced performance of an AlGaN-based deep-ultraviolet LED having graded quantum well structure[J]. IEEE Photon. J., 2019, 11(4): 30-36.

[15] Chung H Y, Woo K Y, Kim S J, et al. Improvement of blue InGaN/GaN light-emitting diodes with graded indium composition wells and barriers[J]. Opt. Commun., 2014, 311: 280-286.

[16] Piprek J. Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation[M]. WileyVCH: Weinheim, 2007.

[17] Li H, Chang C J, Kuo S Y, et al. Improved performance of near UV GaN-based light emitting diodes with asymmetric triangular multiple quantum wells[J]. IEEE J. Quantum. Electron., 2018, 55(1): 1-4.

[18] Karan H, Biswas A, Saha M. Improved performance of InGaN/GaN MQW LEDs with trapezoidal wells and gradually thinned barrier layers towards anode[J]. Opt. Commun., 2017, 400: 89-95.

[19] Wang L, Li R, Yang Z W, et al. High spontaneous emission rate asymmetrically graded 480 nm InGaN/GaN quantum well light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett., 2009, 95(21): 1-4.

[20] Neamen Donald A. Semiconductor Physics and Devices Basic Principles[M]. Fourth Edition. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2013: 445-464.

[21] Bernardini F, Fiorentini V. Spontaneous versus piezoelectric polarization in Ⅲ-Ⅴ nitride: conceptual aspects and practical consequences[J]. Physica Status Solidi (b), 1999, 216: 391.

[22] Mishra P, Tien Khee N G, Janjua Bilal, et al. Extending quantum efficiency roll-over threshold with compositionally graded InGaN/GaN LED[C]// Proc. of 27th IEEE Photonics Conf. (IPC), 2014: 22-23.

作者简介：

张　杰(1998－)，男，硕士研究生，主要从事InGaN/GaN量子阱LED发光特性的研究；

刘　炜(1982－)，男，博士，副教授，毕业于中国科学院半导体研究所，主要从事GaN基宽禁带半导体光电子材料与器件的研究。

(上接第374页)

[11] Gholami S, Khakbaz M. Measurement of *I-V* characteristics of a PtSi/p-Si Schottky barrier diode at low temperatures[J]. World Academy of Science, Engineering and Technology, 2011, 57: 1001-1004.

[12] Mathai A J, Sumesh C K, Modi B P. Schottky barriers on layered anisotropic semiconductor-WSe_2-with 1 000 Å indium metal thickness[J]. Mater. Sci. Appl., 2011, 2(8): 1000-1006.

[13] Klein A, Tomm Y, Schlaf R, et al. Photovoltaic properties of WSe_2 single-crystals studied by photoelectron spectroscopy [J]. Sol. Energy Mater Sol. Cells, 1998, 51: 181-191.

[14] Popov I, Seifert G, Tomanek D. Designing electrical contacts to MoS_2 monolayers: A computational study[J]. Phys. Rev. Lett., 2012, 108(15): 156802.

作者简介：

张　璐(1997－)，女，硕士研究生，主要研究方向为基于二维材料的微电子器件与集成电路；

殷华湘(1974－)，男，湖南长沙人，博士，研究员，主要研究方向为纳米CMOS高级器件、低维纳米材料与器件、信息显示功能器件和硅基辐射传感器以及集成电路先进工艺技术等。