## 06 Численное моделирование электрических свойств структуры Si-SiO,-VO,

## © Н.А. Кулдин, А.А. Величко, А.Л. Пергамент, Г.Б. Стефанович, П.П. Борисков

Петрозаводский государственный университет E-mail: kuldin@psu.karelia.ru

## Поступило в Редакцию 24 августа 2004 г. В окончательной редакции 21 февраля 2005 г.

Проведено численное моделирование протекания переменного тока в структуре Si-SiO<sub>2</sub>-VO<sub>2</sub>, в которой эффект электрического переключения с S-образной BAX обусловлен фазовым переходом металл-полупроводник в диоксиде ванадия. Показана возможность управления динамикой электрического переключения структуры на высоких частотах ( $10^5 - 10^9$  Hz), что делает ее перспективным элементом для использования в высокочастотной микроэлектронике в качестве близкого аналога тиристоров и фототиристоров.

Фазовый переход металл-полупроводник (ФПМП) в диоксиде ванадия и обусловленный им эффект электрического переключения с S-образной вольт-амперной характеристикой (ВАХ) перспективны для создания самых разнообразных электронных устройств [1]. При комнатных температурах переключение хорошо описывается моделью критической температуры [1,2]. В этой модели при достижении критического тока  $I_{th}$ , проходящего через структуру, происходит джоулев разогрев токового канала до температуры прямого  $\Phi\Pi M\Pi T_t \sim 340 \,\mathrm{K}$ , вследствие чего проводимость канала резко возрастает, а величина установившегося тока I определяется напряжением внешнего источника и ограничительным сопротивлением. При снижении I до тока поддержания I<sub>h</sub> канал остывает до температуры обратного ФПМП  $T'_t \sim 320-338 \,\mathrm{K}$  $(T'_t < T_t$  из-за гистерезиса [1]) и структура переходит в высокоомное состояние. В [3] нами была описана схема включения структуры  $Si-SiO_2-VO_2$  (рис. 1, *a*, *b*), динамикой электрического переключения которой можно управлять, меняя либо напряжение смещения на Siподложке  $(U_{s_i})$  относительно земли, либо интенсивность освещения (J).

63

Управление переключением заключается в переводе структуры из "включенного" состояния, когда динамическая BAX имеет S-образный вид (с характерными всплесками тока на осциллограмме), в "выключенное", когда переключение на ВАХ отсутствует. Механизм управления переключением заключается в пространственном перераспределении переменного тока в структуре (за счет изменения внутренней емкости структуры) таким образом, что во "включенном" состоянии амплитуда тока через  $VO_2$ -канал выше  $I_{th}$ , а в "выключенном" ниже  $I_{th}$ . В экспериментально изучаемой схеме ( $R_1 = 100 \,\mathrm{k\Omega}, R_2 = 10 \,\Omega, R_3 = 560 \,\mathrm{k\Omega},$  $C_1 = 0.022 \,\mu\text{F}$ ) и конфигурации переключателя ( $h = 40 \,\mu\text{m}, \, l = 13 \,\mu\text{m},$  $D=1\,{
m mm},\,{
m Si}$ -*р*-типа,  $ho_{
m Si}=1\,{
m \Omega}\cdot\,{
m cm},\,d_{
m SiO_2}\sim 1000\,{
m A},\,d_{
m VO_2}\sim 3000\,{
m A})$  наиболее эффективное управление переключением проводилось при подаче на структуру питающего переменного напряжения с частотой f порядка  $1-10\,\mathrm{kHz}$  и амплитудой  $U = 15\,\mathrm{V}$ , так как увеличение f свыше  $10\,\mathrm{kHz}$ вело к сильному шунтированию тока VO2-канала внутренней емкостью структуры и невозможности достижения величины тока  $I_{th}$  через канал [4].

Возможно ли управление переключением в Si–SiO<sub>2</sub>–VO<sub>2</sub> структуре на более высоких частотах и какова оценка максимального порядка этих частот? Для ответа на эти вопросы было проведено численное моделирование протекания переменного тока в структуре, что и являлось целью настоящей работы.

Оценим сначала время электрического переключения  $t_s$ . Как показано в [5], время развития ФПМП составляет менее  $10^{-13}$  s. Поэтому основной вклад в  $t_s$ , при тепловом механизме переключения, будет давать время остывания канала до  $T'_t$  ( $\tau$  — постоянная теплосброса). Представим канал исследуемой структуры в виде прямоугольного стержня с длиной l и металлическими контактами на концах, имеющими постоянную температуру окружающей среды  $T_0$ . При учете ухода джоулева тепла только через контакты решение уравнения теплопроводности для конечного стержня [6] дает выражение для оценки  $\tau$  как

$$\tau = \frac{l^2 \cdot c \cdot \rho}{\pi^2 \cdot \lambda},\tag{1}$$

где *c*, *ρ*,  $\lambda$  — теплоемкость, плотность и теплопроводность VO<sub>2</sub> в металлической фазе. Подставив *c* ~ 770 J · kg<sup>-1</sup> · K<sup>-1</sup>, *ρ* = 4340 kg · m<sup>-3</sup>,  $\lambda = 9.8 \, \text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  [7] и предполагая *l* = 100 nm, получим величину  $\tau \approx 3.5 \cdot 10^{-10}$  s. Например, времена переключения ~  $10^{-9}$  s

с  $l \sim 100$  nm в сэндвич конфигурации переключателя были экспериментально зафиксированы в работе [8]. Таким образом, мы убедились в возможности наблюдения переключения на частотах до  $10^9$  Hz.

Для ответа на вопрос о возможности управления электрическим переключением в Si-SiO<sub>2</sub>-VO<sub>2</sub> структуре в этом диапазоне частот рассмотрим ее упрощенную эквивалентную схему включения (рис. 1, с). Здесь мы пренебрегаем малым токовым сопротивлением  $R_2$ , а также фильтром C1R3 и источником 2, которые составляют цепь подачи постоянного управляющего напряжения Usi на Si-подложку и мало влияют на прохождение переменного тока от Si-подложки на землю. Через  $R_{VO_2}$  обозначено сопротивление  $VO_2$ -канала в полупроводниковой фазе при  $T \sim T_t$ , емкости под левым (рис. 1, *a*) контактом:  $C_{ox}$  — емкость подзатворного диэлектрика  ${\rm SiO}_2,\ C_{sc}$  — емкость области пространственного заряда (ОПЗ) на границе Si-SiO<sub>2</sub>, C<sub>ss</sub> емкость поверхностных состояний (ПС). Следует отметить, что под заземленным правым (рис. 1, a) контактом емкость не учитывается, так как она не участвует в токопереносе. Следует также отметить некоторое упрощение, связанное с отсутствием в схеме (рис. 1, c) емкости ОПЗ  $VO_2$ -слоя  $C_{VO_2}$ , что в идеале соответствует случаю расположения Alконтактов непосредственно на SiO<sub>2</sub>. Это упрощение является адекватным также и в силу более высокой концентрации n<sub>e</sub> основных носителей (электронов) в VO<sub>2</sub>-пленке ( $n_e \sim 10^{18} \, {\rm cm^{-3}}$  [2],  $T_0 \sim 300 \, {\rm K}$ ) в полупроводниковой фазе по сравнению с концентрацией  $n_p$  основных носителей (дырок) в Si-подложке (Si-*p*-типа,  $n_p \sim N_A = 10^{16} \, {\rm cm}^{-3}$ ,  $T_0 \sim 300 \,{\rm K}, \, N_A$  — концентрация акцепторов), в результате чего длина Дебая в ОПЗ VO2-пленки почти на порядок меньше, чем в ОПЗ Siподложки, и дает меньший вклад в результирующую емкость структуры.

Управление амплитудой тока, проходящего через  $R_{\rm VO_2}$ , осуществляется варьированием общей емкости *C* за счет изменения величины поверхностного потенциала  $\psi_s$ , который является функцией  $U_{\rm Si}$  [9]. По схеме (рис. 1, *c*) легко видеть, что выражение для *C* имеет вид

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{sc} + C_{ss}}.$$
(2)

Если представить  $C_{sc}$  в виде трех слагаемых:  $C_p$  — емкости ОПЗ в области обогащения,  $C_B$  — емкости ОПЗ в области обеднения и слабой инверсии,  $C_n$  — емкости ОПЗ в области сильной инверсии, а также



**Рис. 1.** Схема включения структуры Si-SiO<sub>2</sub>-VO<sub>2</sub> (*a*) ( $d_{VO_2}$  — толщина VO<sub>2</sub>-пленки,  $d_{SiO_2}$  — толщина SiO<sub>2</sub>-слоя, *I* — источник переменного сигнала с частотой *f* и амплитудой *U*, *2* — источник постоянного напряжения смещения на Si-подложке,  $R_1$  и  $R_2$  — ограничительное и токовое сопротивления,  $C_1R_3$  — фильтр,  $U_{\nu}$  и  $I_{\nu}$  — выходы для измерения BAX); вид сверху (*b*) (*l*, *h* — длина и ширина канала переключения, *D* — диаметр Al-контактов); эквивалентная схема (*c*).

учесть зависимость  $C_n$  и  $C_{ss}$  от частоты [9], то (2) примет следующий вид:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_p + C_B + \frac{C_n}{1 + \omega^2 \cdot \tau_n^2} + \frac{C_{ss}}{1 + \omega^2 \cdot \tau_{ss}^2}},$$
(3)

где  $\tau_n$  — времени жизни неосновных носителей в ОПЗ,  $\tau_{ss}$  — время перезарядки ПС,  $\omega = 2\pi f$ . Суммирование  $C_p$ ,  $C_B$  и  $C_n$  имеет место не потому, что они включены параллельно, а для придания универсализма формуле (3) при проведении численных расчетов, так как при разных  $\psi_s$  одна из емкостей имеет превалирующее значение по сравнению с другими [9], и их сумма адекватно описывает зависимость  $C_{sc}$  от  $\psi_s$ .

Из схемы (рис. 1, c) легко найти выражение для амплитуды тока I, проходящего через  $R_{VO_2}$ :

$$I = \frac{U}{\sqrt{\left(R_1 + R_{\text{VO}_2}\right)^2 + \left(\omega \cdot C \cdot R_1 \cdot R_{\text{VO}_2}\right)^2}}.$$
(4)

Учитывая, что  $C_p$ ,  $C_B$  и  $C_n$  есть функции  $\psi_s$  [9], и предполагая, что энергетический спектр распределения ПС на границе раздела Si-SiO<sub>2</sub> является квазинепрерывным [9], на основании формул (4) и (3) мы рассчитали зависимость I от  $\psi_s$  на частоте f = 6 kHz (рис. 2, кривая I). В модельных расчетах использовались значения: U = 14 V,  $R_1 = 100$  kΩ,  $R_{VO_2} = 160$  kΩ,  $h = 40 \,\mu$ m,  $l = 13 \,\mu$ m, D = 1 mm ( $S = 7.85 \cdot 10^{-3}$  cm<sup>2</sup> — площадь контакта),  $d_{VO_2} = 3000$  A,  $\varepsilon_s = 11.9$  — диэлектрическая проницаемость Si,  $\varepsilon_{ox} = 3.82$  — диэлектрическая проницаемость SiO<sub>2</sub>,  $L_d = 4.06 \cdot 10^{-6}$  cm — дебаевская длина,  $T_0 = 290$  K,  $d_{SiO_2} = 10^{-5}$  cm,  $\varphi_0 = 0.35$  V — расстояние между уровнем Ферми и серединой запрещенной зоны в квазинейтральном объеме Si,  $N_A = 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> (Si p-типа),  $N_{ss} = 10^{-11}$  cm<sup>-2</sup> eV<sup>-1</sup> — энергетическая плотность ПС,  $\tau_n = 2.5 \cdot 10^{-4}$  s,  $\tau_{ss} = 10^{-4}$  s,  $j_{th} = 4.17 \cdot 10^2$  A · cm<sup>-2</sup> — критическая плотность тока ( $I_{th} = 5 \cdot 10^{-5}$  A).

Как видно, кривая I пересекает уровень  $I_{th}$  (пунктирная линия 2) в двух рабочих точках  $\psi_s = 0.1$  V и  $\psi_s = 0.84$  V, которые соответствуют двум экспериментально определенным критическим управляющим напряжениям смещения  $U_{\text{Si}} = 4.6$  V и  $U_{\text{Si}} = -12.2$  V [3] соответственно. Численное моделирование показало, что при увеличении



**Рис. 2.** Рассчитанная зависимость амплитуды тока *I*, проходящего через  $R_{\text{VO}_2}$  от  $\psi_s$  для двух частот *f* (кривые *I* и *I'*) с соответствующими уровнями значений  $I_{th}$  (пунктирные линии 2 и 2'); I - f = 16 kHz,  $2 - I_{th} = 5 \cdot 10^{-5}$  A (правая шкала);  $I' - f = 10^9$  Hz,  $2' - I_{th} = 3.75 \cdot 10^{-7}$  A (левая шкала).

частоты сигнала, подаваемого на структуру, происходит уменьшение максимальной амплитуды тока  $I_{\max}$  ( $I_{\max}$ ,  $I_{\min}$  — максимальное и минимальное значение амплитуды тока I при варьировании  $\psi_s$ ), что при условии  $I_{\max} < I_{th}$  приводит к исчезновению переключения. Однако если уменьшить геометрические размеры переключателя, а именно площадь контакта S, то  $I_{\max}$  снова превысит  $I_{th}$ .

Влиять на параметры переключателя, такие как критический ток  $I_{th}$ , критическое напряжение переключения  $U_{th}$  и  $R_{\rm VO_2}$ , можно при помощи варьирования размеров межэлектродного промежутка. Значение  $I_{th}$  можно оценить следующим образом:

$$I_{th} = j_{th} \cdot h \cdot d_{\rm VO_2}.\tag{5}$$

Значения  $U_{th}$  и  $R_{VO_2}$  оцениваются как

$$U_{th} = \rho_{\mathrm{VO}_2} \cdot j_{th} \cdot l, \tag{6}$$

$$R_{\rm VO_2} = \frac{\rho_{\rm VO_2} \cdot l}{h \cdot d_{\rm VO_2}},\tag{7}$$

где  $\rho_{\rm VO_2}$  — удельное сопротивление пленки VO<sub>2</sub> в полупроводниковой фазе при  $T \sim T_t~(\rho_{\rm VO_2} \sim 14.8~\Omega\cdot\,{\rm cm}).$ 

Используя (1)–(7), мы рассчитали зависимость I от  $\psi_s$  на частоте  $f = 10^9$  Hz (рис. 2, кривая I') со следующими измененными относительно расчетов на частоте f = 6 kHz параметрами: U = 8 V,  $R_{\rm VO_2} = 164$  k $\Omega$ ,  $h = 0.3 \,\mu$ m,  $l = 0.1 \,\mu$ m,  $D = 35 \,\mu$ m ( $S = 9.62 \cdot 10^{-6}$  cm<sup>2</sup>),  $I_{th} = 3.75 \cdot 10^{-7}$  A,  $U_{th} = 0.062$  V. Как видно (рис. 2), при переходе в гигагерцовый диапазон частот, когда  $f^{-1} \ll \tau_n, \tau_{ss}$ , наблюдается значительное смещение одной из рабочих точек в область больших значений  $\psi_s$  ( $\psi_s > 2$ ), реально недостижимых при любом  $U_{\rm Si}$  [9].

Таким образом, в данной работе мы показали, что если уменьшать геометрические размеры переключателя, например, с помощью разрабатываемого нами литографического процесса по оксидам ванадия [10], то уменьшается время электрического переключения Si–SiO<sub>2</sub>–VO<sub>2</sub> структуры с возможностью достижения гигагерцового диапазона рабочих частот. При условии  $f^{-1} \ll \tau_n$ ,  $\tau_{ss}$  переключатель имеет одно критическое управляющее напряжение смещения  $U_{Si}$ . Полученные результаты делают указанную структуру перспективным элементом для использования в высокочастотной микроэлектронике в качестве близкого аналога тиристоров и фототиристоров (возможность оптического управления была ранее продемонстрирована в [3]).

Исследования, описанные в данной работе, были проведены в рамках проекта № РZ-013-02, поддерживаемого Американским фондом гражданских исследований и развития (CRDF), грантов Министерства образования РФ № Y1-P-13-02, № А04-2.9-718, проектом "Нанопористые материалы, технологии и наноструктуры на основе полупроводниковых и оксидных соединений" по программе "Развитие научного потенциала высшей школы".

## Список литературы

- [1] Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. // Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. Л.: Наука, 1979. 183 с.
- Борисков П.П., Величко А.А., Пергамент А.Л. и др. // Письма в ЖТФ. 2002.
   Т. 28. В. 10. С. 13–18.
- Величко А.А., Кулдин Н.А., Стефанович Г.Б. и др. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. В. 12. С. 49–53.
- [4] Кулдин Н.А., Величко А.А. // Успехи современного естествознания. 2004. В. 4. С. 44-46.
- [5] Cavalleri A., Toth C., Siders C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 237 401– 237 404.
- [6] Очан Ю.С. // Методы математической физики. М.: Высш. школа, 1965. 383 с.
- [7] Самсонов Г.В. // Физико-химические свойства окислов. М.: Металлургия, 1978. 472 с.
- [8] Stefanovich G., Pergament A., Stefanovich D. // Journal of Physics: Condensed Matter. 2000. V. 12. P. 8837–8845.
- [9] Зи С. // Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984. Т. 1. 455 с.
- [10] Stefanovich G., Pergament A., Velichko A. et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. 2004. V. 16. P. 4013–4024.