

Общая процедура расчета электрических характеристик туннельных МДП-структур

© М.И. Векслер*[¶], С.Э. Тягинов⁺, Ю.Ю. Илларионов^{**}, Yew Kwang Sing[‡], Ang Diing Shenp[‡],
В.В. Федоров*, Д.В. Исаков*

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

⁺ TU Vienna, Institute for Microelectronics,
1040 Wien, Austria

[•] Singapore Institute of Manufacturing Technology,
638075 Singapore

[‡] Nanyang Technological University,
639798 Singapore

(Получена 6 августа 2012 г. Принята к печати 28 августа 2012 г.)

Предлагается алгоритм расчета вольт-амперных характеристик системы металл–туннельно-тонкий диэлектрик–полупроводник, управляемой напряжением или током. Обсуждаются физические модели, взятые за основу. Работоспособность алгоритма подтверждается сопоставлением результатов моделирования с данными измерений, как полученными непосредственно авторами, так и заимствованными из литературы, для нескольких различных структур. Предполагается, что изложенных сведений достаточно для проведения расчетов электрических характеристик интересующих структур с самыми различными сочетаниями материалов: металлический или поликремниевый затвор, одно- или многослойный диэлектрик, любые тип и уровень легирования полупроводника.

1. Введение

Структуры металл–туннельно-прозрачный диэлектрик–полупроводник (МДП) являются важнейшими объектами исследований полупроводниковой электроники. С позиции сегодняшнего дня такие структуры являются одномерным срезом затворной секции полевого транзистора классической архитектуры [1]. Существует и множество других применений, например, транзистор с туннельным МОП эмиттером [2,3], фотодетектор [4]. Если понятие „диэлектрик“ в данном контексте расширить, допуская наличие нескольких последовательных диэлектрических слоев, то такие структуры также широко используются в полевых транзисторах (gate stack [5]) и ячейках памяти [6]. Сюда же попадают резонансно-туннельные системы, в частности, на основе слоев $\text{CaF}_2/\text{CdF}_2$ [7]. Наконец, МДП-структуры с тонкими диэлектрическими пленками являются удобным объектом исследования свойств самого диэлектрического материала. Таким образом, можно однозначно констатировать широкий круг применения.

Насколько известно авторам, в литературе нет работы, которая бы систематизировала и последовательно рассматривала все подзадачи, связанные с моделированием токов в туннельной МДП-структуре. Как правило, в публикациях в центре внимания находился один тот или иной важный аспект, в то время как остальные моменты не анализировались. Например, в последнее время очень подробно исследовался процесс утечки электронов из n -канала полевого транзистора в поликристаллический Si (polySi) (например, [8,9]).

Однако ток валентной зоны при этом обычно даже не упоминался. Наиболее целостный подход к проблеме дают исследования транзистора с туннельным МДП эмиттером [3,10], но в них охватывается только режим инверсии структур.

В такой ситуации представляется очень важным алгоритмически представить конкретную процедуру расчета, пригодную для широкого круга туннельных МДП систем. Наличие таких проверенных практикой алгоритмов было бы полезно для работы с любой новой структурой такого типа, так как появляется возможность предсказания характеристик для общего случая — подход должен быть единым для любых режимов смещения и любых диэлектриков. Представлению такого алгоритма и посвящена данная работа. При этом физическая сторона затронута лишь кратко — в порядке напоминания.

2. Подход к моделированию туннельной МДП-структуры

При расчетах электрических характеристик туннельных МДП-структур во всех случаях необходимо решение трех основных физических задач-блоков, обсуждаемых далее.

Задача первая — известны напряженность поля F_l в диэлектрике и разница ΔE_{Fp} между квазиуровнями Ферми зоны проводимости (E_{Fn}) и валентной зоны (E_{Fp}) кремния. Требуется определить распределение потенциала $q\phi(z)$ в Si; параллельно находится распределение заряда.

Наиболее известными методами расчета зонных диаграмм являются самосогласованное решение уравнений

[¶] E-mail: shulekin@mail.ioffe.ru

Шредингера и Пуассона [11] и „классический“ подход [12]. Однако первый метод достаточно трудоемок, а второй не учитывает эффекты приповерхностного квантования. Удобным компромиссом представляется модель [13,14], в рамках которой во всех режимах — от слабых ($F_l < 10^6$ В/см) до предельно сильных (более 10^7 В/см) полей — учитывается только один эффективный квантовый уровень E_0 . Частицам приписывается волновая функция $\psi_0 = (b^3/2)^{1/2} z \exp[-bz/2]$ с параметром b (см⁻¹), который определяется как

$$b = \left[\frac{12q^2 m_{sz}}{\epsilon_0 \epsilon_s \hbar^2} \left(\frac{11N_s}{32} + N_{dop} w \right) \right]^{1/3},$$

где N_s (см⁻²) — концентрация индуцированных носителей в яме, а w — ширина области изгиба зон в Si. Через m_{sz} обозначена эффективная масса носителя, через ϵ_s — проницаемость кремния. Энергия уровня при этом

$$E_0 = \left(\frac{3}{2} \right)^{5/3} \left[\frac{q^2 \hbar}{\sqrt{m_{sz} \epsilon_0 \epsilon_s}} \right]^{2/3} \frac{N_{dop} w + (55/96)N_s}{[N_{dop} w + (11/32)N_s]^{1/3}}. \quad (1)$$

Величины N_s и w наряду с легированием N_{dop} входят в соотношение

$$F_l = \frac{q(N_s + N_{dop} w)}{\epsilon_0 \epsilon_l},$$

где ϵ_l — проницаемость диэлектрика. Такой подход обычно используется для режимов обеднения-инверсии, анализируемых совместно; тогда w — ширина обедненной области. Но представляется возможным применить ту же процедуру и для обогащения (хотя есть более надежные методы [15]). Величина N_{dop} при этом будет отражать плотность заряда на несвязанных состояниях выше ямы; заряд ионов не учитывается ввиду низкой степени ионизации в области аккумуляционного изгиба зон. Эта плотность грубо равна плотности носителей в толще Si, а значит, концентрации примеси. Для заданного поля F_l значение N_s устанавливается итерацией, чтобы обеспечить нужный сдвиг ΔE_{Fpn} . Квазиуровень Ферми в толще (E_{FB}) диктуется легированием, а в яме (E_{FW}) определяется из

$$N_s = \frac{\nu_{\perp} m_{s\perp} k_B t}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \frac{E_{FW} - E_0}{k_B t} \right], \quad (2)$$

где ν_{\perp} — вырождение (число долин, равное 6 для электронов и 3 для дырок), t — температура. В зависимости от типа легирования и полярности, один из уровней E_{FW} , E_{FB} — это E_{Fn} , а другой E_{Fp} . Профиль зон дается формулой ($z_m = \min(z, w)$):

$$q\phi(z) = \frac{q^2 N_s}{\epsilon_0 \epsilon_s} \left(\exp(-bz) \left[-\frac{bz^2}{2} - 2z - \frac{3}{b} \right] + \frac{3}{b} \right) + \frac{q^2 N_{dop} w}{\epsilon_0 \epsilon_s} \left(z_m - \frac{z_m^2}{2w} \right), \quad (3)$$

а полный изгиб зон в Si составит

$$q\phi_s = \pm q^2 (\epsilon_0 \epsilon_s)^{-1} \left(3N_s b^{-1} + N_{dop} \frac{w^2}{2} \right).$$

После нахождения N_s и E_0 вместо одного „усредненного“ уровня E_0 по квазиклассической формуле

$$\int (E_{ji} - q\phi(z))^{1/2} dz = (i - \xi) \pi \hbar (2m_j)^{-1/2}$$

можно определить все уровни легких и тяжелых носителей (разные m_j). Параметр ξ (около 1/4) подбирается так, чтобы сумма концентраций на уровнях при том же E_{FW} равнялась N_s . Метод применим и к поликристаллическому кремнию. На рис. 1 даны примеры рассчитанных зонных диаграмм.

Задача вторая — заданы все детали зонной диаграммы МДП-структуры: профили зон в Si и poly-Si, напряжение на диэлектрике U , положения квазиуровней Ферми. Требуется вычислить величины всех компонент туннельного тока.

Ток, протекающий через диэлектрик в структуре с металлическим электродом, включает в себя электронную (металл–зона проводимости полупроводника, j_{cm}) и дырочную (металл–валентная зона, j_{vm}) компоненты. В зависимости от режима одна из компонент j_{cm} , j_{vm} содержит лишь непрерывную составляющую, а другая еще и дискретную — с уровня E_0 . В случае поликремниевое электрода помимо токов j_{cc} и j_{vv} между зонами проводимости и валентными зонами кремниевых областей при высоких U возникают „перекрестные“ токи j_{cv} , а дискретная составляющая одновременно содержится и в j_{cc} , и в j_{vv} . Туннелирование через диэлектрик может сочетаться с транспортом в кремнии, что расширяет диапазон задействованных энергий. При изгибе зон в подложке $q\phi_s > E_g$ может также иметь место транспорт зона–зона в Si [16]. Выражения для непрерывной и дискретной составляющих любой компоненты — будь то j_{cc} , j_{vv} , j_{vm} , j_{cm} или (только для j^{cont}) j_{cv} — имеют форму

$$j^{cont} = \frac{4\pi q \nu_{\perp} m_{s\perp}}{\hbar^3} \int_{E_{min}}^{E_{max}} (f_S(E) - f_G(E)) dE \times \int_0^{E_{\perp max}} T(E, E_{\perp}) dE_{\perp}, \quad (4a)$$

$$j^{disc} = \pm \frac{q \nu_{\perp} m_{s\perp}}{\pi \hbar^2 \tau_{ar}(E_0)} \int_{E_0}^{\pm \infty} (f_S(E) - f_G(E)) dE \times T(E, |E - E_0|) dE. \quad (4b)$$

Здесь E — полная энергия частицы; f_S , f_G — функции Ферми в подложке и затворе для тех областей, транспорт между которыми анализируется; E_{\perp} — энергия в плоскости структуры; $m_{s\perp}$ — масса частицы в плоскости там, где выбрано E_{\perp} ; τ_{ar} — время между соударениями со стенкой барьера ($\sim \hbar/E_0$). Знак в выражении j^{disc} зависит от зоны: для зоны проводимости нужен „+“. Постановка пределов в j^{cont} диктуется наличием состояний с соответствующей парой E , E_{\perp} по обе стороны барьера. На нее также влияет

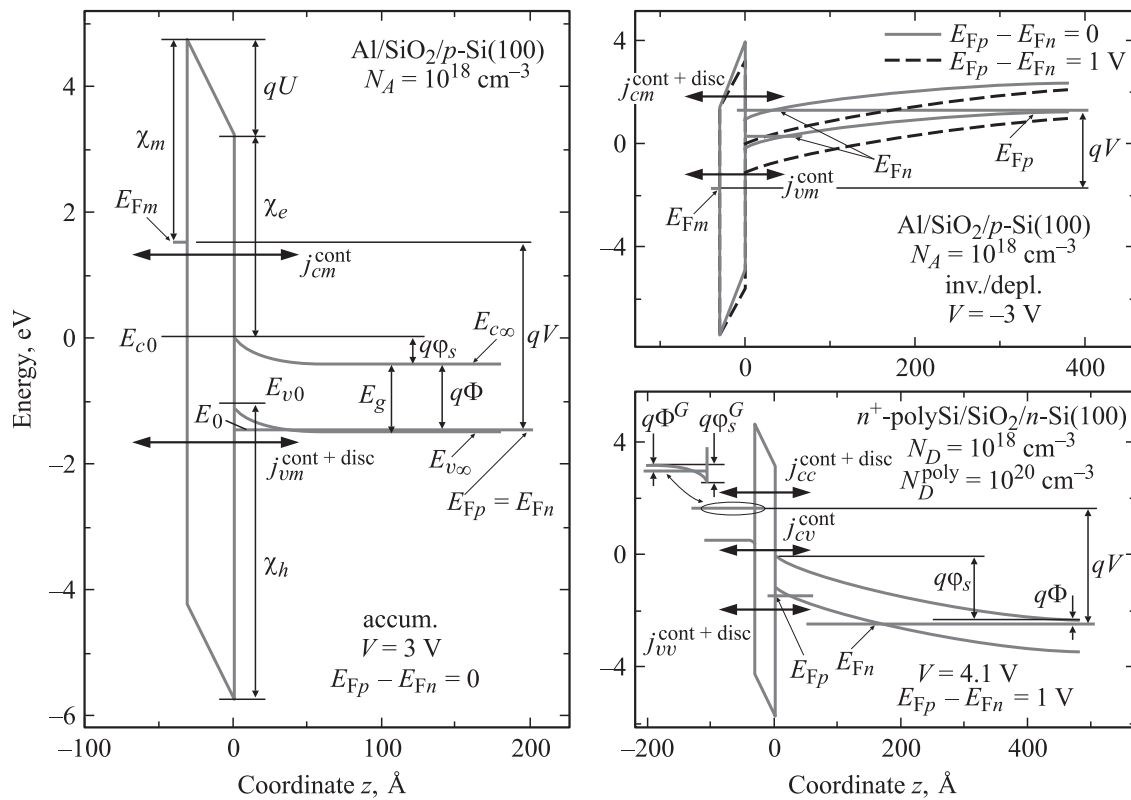


Рис. 1. Энергетические диаграммы МДП-структур с указанием величин, используемых при моделировании. Слева показан режим обогащения, справа — инверсии-обеднения подложки (сверху — для металлического, снизу — для поликристаллического электрода).

учет туннелирования в Si. Так, в условиях левого рис. 1, применительно к компоненте j_{cm} , для j^{cont} : $E_{min} = E_{c0}$, $E_{max} = +\infty$, $E_{Lmax} = E - E_{c0}$ при переносе только через диэлектрик. А если учесть и транспорт в кремнии, то изменения: $E_{min} = E_{c\infty}$, $E_{Lmax} = E - E_{c\infty}$. Через T обозначена вероятность туннелирования. Она вычисляется методом матриц переноса (Transfer Matrix, TM) [17] или Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (Wentzel–Kramers–Brillouin, WKB) [18]. Область барьера разбивается на секции, в рамках которых высота барьера считается неизменной, а интегрирование выполняется (например) методом прямоугольников; как показывает практика, это выгодно даже при WKB-вычислениях. Тогда

$$T(E, E_{\perp}) = \exp\left[-2\Delta z \sum_i \min(k_{cz}^*(z_i), k_{vz}^*(z_i))\right], \quad (5)$$

т. е. частица в каждой точке „выбирает“ более слабый барьер — верхний или нижний. В случае параболического закона дисперсии в барьере

$$k_{cz}^* = \sqrt{2m_{cz}} \hbar^{-1} \sqrt{\max[0, (E_c - E + m_{s\perp} m_{c\perp}^{-1} E_{\perp})]},$$

$$k_{vz}^* = \sqrt{2m_{vz}} \hbar^{-1} \sqrt{\max[0, (E - E_v + m_{s\perp} m_{v\perp}^{-1} E_{\perp})]}, \quad (6)$$

где $m_c = m_c(z_i)$, $m_v = m_v(z_i)$ — вообще говоря, зависящие от координаты эффективные массы, а $E_c = E_c(z_i)$,

$E_v = E_v(z_i)$ — энергии краев зон в соответствующем элементе разбиения профиля барьера. При непараболическом законе дисперсии, в частности, по модели Франца [19], k_{cz}^* , k_{vz}^* для подстановки в (5) будут выражены через энергии иначе. Если барьер имеет многослойную структуру с промежуточными ямами, то необходим более сложный ТМ-подход, хотя формулы для токов остаются в силе.

Задача третья — даны напряжение затвор-подложка V и (для режима обеднения/инверсии в подложке) величина внешнего воздействия — интенсивность освещения или ток j_{ext} , поданный в область инверсии. Найти поле в диэлектрике и энергию квазиуровня Ферми неосновных носителей в стационарной ситуации.

Очевидно, что необходимо обеспечить выполнение закона Кирхгофа для напряжений:

$$\varphi_s + \varphi_s^G + U = V - V_{FB}, \quad (7)$$

где V_{FB} — напряжение плоских зон. Знак φ_s , φ_s^G и U положителен, если поле направлено в сторону затвора. В случае металлического электрода $V_{FB} = (-\chi_m + \chi_e)/q + \Phi$ (обозначения см. на рис. 1), а для polySi мы имели бы $V_{FB} = -\Phi^G + \Phi$. Предполагается, что квазиуровни Ферми для электронов и дырок на каждой стороне барьера не зависят от координаты и совпадают в затворе всегда, а в подложке — в режиме

ее обогащения. В случае обеднения-инверсии в подложке (стационарный режим) создается баланс между потерями и поступлением неосновных носителей; ему отвечает регулируемое самой МДП системой значение ΔE_{Fpn} . При расчете следует подбирать U ($|U| = F_l/d$, d — толщина диэлектрика) и ΔE_{Fpn} так, чтобы это отвечало балансу. Для определенности рассмотрим прибор на n -Si. Приток неосновных носителей — дырок — обеспечивается током тепловой генерации j_{th} , пропорциональным ширине w области обеднения, фототоком j_{ph} (часто тоже $\sim w$) и внешним током j_{ext} , подаваемым через исток. Также может происходить ударная ионизация: инжекция каждого электрона из затвора в зону проводимости подложки при протекании тока j_e (равного j_{cm} или j_{cc}) вызывает появление $M-1$ электронно-дырочных пар, что создает дырочный ток $j_e \cdot (M-1)$. Отток дырок из инверсного слоя, кроме туннельного тока j_h (равного j_{vm} или j_{vv}), обеспечивается диффузионно-дрейфовым током j_{dd} интерфейса-толща. Оговорим, что ток j_{dd} аналогичен току $p-n$ -перехода, и он может менять знак, становясь источником поступления дырок. Уравнение баланса записывается:

$$j_h + j_{dd} = j_{th} + j_{ph} + j_{ext} + j_e(M-1). \quad (8)$$

Коэффициент умножения, используемый в формуле (8), рассчитывается как [20]

$$M = [1 + P(E_{inj})] \left[1 + \frac{a_0 q N_{dop} w^2}{b_0 \epsilon_0 \epsilon_s} \exp\left(-\frac{b_0 \epsilon_0 \epsilon_s}{q N_{dop} w}\right) \right], \quad (9)$$

где $a_0 = 4 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$, $b_0 = 10^6 \text{ В/см}$, функция квантового выхода P табулируется согласно [21] и энергия инжекции равна

$$E_{inj} = E_{Fm} - E_{c0} + q^2(\epsilon_0 \epsilon_s)^{-1}(3N_s b^{-1});$$

последний член здесь описывает вклад инверсного слоя в изгиб зон. Ток j_{dd} находится просто как

$$j_{dd} = A \left[\exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B t}\right) - 1 \right];$$

предэкспоненциальный фактор

$$A = n_i^2 N_D^{-1} \left(\frac{q \mu_p k_B t}{\tau_p} \right)^{1/2}$$

содержит подвижность и время жизни дырок μ_p , τ_p , а также собственную концентрацию n_i . В случае кремния p -типа подход аналогичен, но обычно можно положить $P = 0$.

Мы очертили три базовые задачи, возникающие при моделировании характеристик МДП-структур. На практике они не всегда решаются независимо, потому что туннельная утечка из инверсного слоя входит в уравнение баланса.

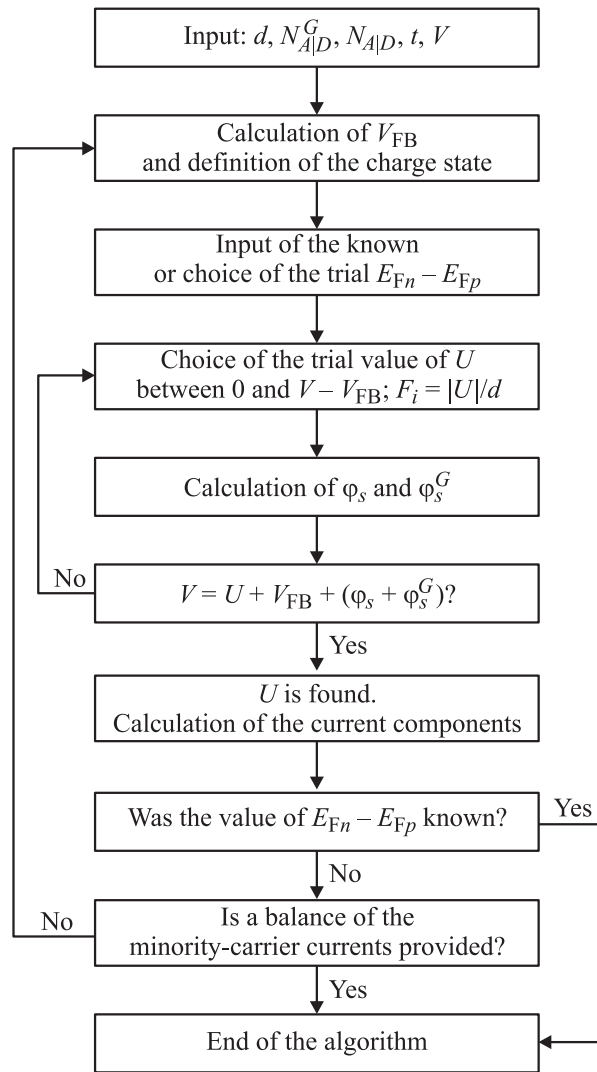


Рис. 2. Блок-схема математического алгоритма расчета вольт-амперной характеристики МДП-структуры.

3. Математический алгоритм расчета вольт-амперной характеристики МДП-структуры

Предполагается, что параметры структуры — толщины диэлектрических слоев, уровень легирования подложки, уровень легирования поликремния, ориентация — известны. Также считаются известными диэлектрические постоянные и параметры туннельных барьеров (разрывы зоны проводимости и валентной зоны на границе с кремнием, эффективные массы). Если параметры барьера неизвестны с надлежащей точностью, то модель может быть использована для их определения на основе данных измерений [10]. Влияние дефектов интерфейса не рассматривается.

Математический алгоритм расчета вольт-амперной характеристики (ВАХ) состоит из двух вложенных циклов. Блок-схема представлена на рис. 2. Если струк-

тура работает в режиме обогащения подложки или же разность квазиуровней Ферми ΔE_{Fpn} в подложке является наперед заданной величиной, то выполняется только один внутренний цикл. Алгоритм применим к расчетам приборов как с металлическим затвором, так и с затвором из поликристаллического кремния; в первом случае вычисления упрощаются ввиду $\phi_s^G = 0$.

На первом шаге вводятся известные величины. Далее вычисляется напряжение плоских зон V_{FB} и — для заданного напряжения на клеммах V — определяются зарядовые состояния, в которых находятся затвор и подложка. Значение $E_{Fp} - E_{Fn}$ может быть задано или выбрано пробным. Затем выбирается пробное значение напряжения на диэлектрике U из интервала между 0 и $V - V_{FB}$ и находится в поле в диэлектрике $F_i = |U|/d$. После этого вычисляются изгибы зон $q\phi_s$ (для поликремниевых затворов) $q\phi_s^G$ и проверяется равенство суммы напряжений по всей структуре приложенному напряжению V . Если равенство с желаемой точностью достигнуто, то решение для U считается найденным и вычисляются токи, а если нет, то выбирается новое пробное значение U и цикл повторяется сначала. Если сумма падений напряжения оказалась слишком большой по сравнению с $|V - V_{FB}|$, то для следующего шага итерации $|U|$ следует снизить. Как показано в предыдущем разделе, для режимов аккумуляции и обеднения-инверсии можно использовать единую методику, но если применяются разные, то для выполнения действий цикла с перебором значений U необходимо запускать отдельные подпрограммы.

В варианте, когда значение $E_{Fp} - E_{Fn}$ изначально задано, выполнение алгоритма завершается после нахождения правильного значения U и вычисления токов, а если было выбрано пробное значение, то нужно проверять условие баланса токов неосновных носителей (см. формулу (8) или аналогичное соотношение для p -Si). Если при найденном напряжении U и вычисленных (с учетом j_{ph}, j_{ext}) токах оно не выполняется, то необходимо выбрать иное пробное значение $E_{Fp} - E_{Fn}$ и повторить все действия с начала.

Поскольку в режиме обеднения-инверсии подложки одному и тому же напряжению V может соответствовать несколько различных значений $E_{Fp} - E_{Fn}$ (мультистабильность), цикл по $E_{Fp} - E_{Fn}$ целесообразно предварить вычислениями для серии $E_{Fp} - E_{Fn}$ в пределах от $\pm E_g$ до $\pm |V|$ с небольшим шагом. Это поможет выделить диапазон(ы) для основной итерации. Выбор знака основан на том, что „ p - n -переход“ интерфейс–толща не должен быть слишком сильно смещенным в прямом направлении, отсюда и ограничение через E_g , исключающее нерелистично большие токи j_{dd} . Игнорирование проблемы мультистабильности может привести к потере решений, особенно для случая n -подложки, когда роль ударной ионизации велика. Тем не менее, иногда можно ограничиться схемой рис. 2 без каких-либо дополнений. Для этого надо быть уверенным в том, что ионизация в конкретном приборе не проявится (например, из-за сильно-

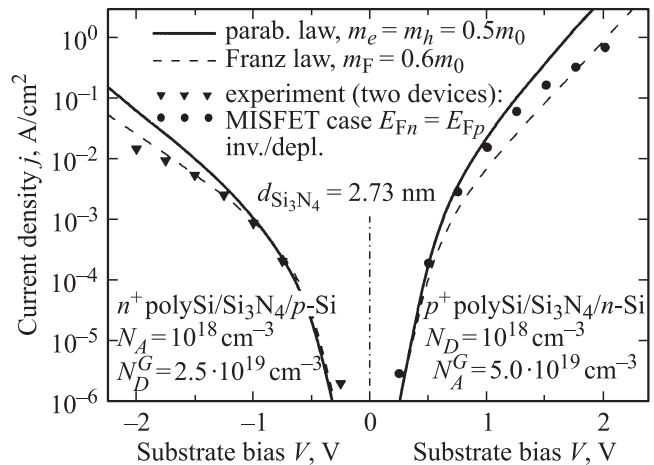


Рис. 3. ВАХ структур polySi/Si₃N₄/Si (обеднение-инверсия в подложке). Результат расчета с разными законами дисперсии сопоставлен с экспериментальными данными.

го рассеяния на интерфейсе) и что ток утечки неосновных носителей как функция $|U|$ монотонно растет.

Распространение методики расчета на случай многослойного диэлектрика (слои d_1, d_2, \dots, d_N с проницаемостями $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ и разрывами зон на границах $\xi_{e12}, \xi_{e23}, \dots, \xi_{h12}, \xi_{h23}, \dots, \xi_{h(N-1),N}$) представляется тривиальным. Изменения коснутся лишь записи соотношения между напряжением на всей совокупности диэлектрических слоев U и величиной поля, задействованного при анализе изгиба зон, т. е. решении первой задачи предыдущего раздела. В этом случае используются поля первого (1) и последнего (N) слоев, вычисляемые как

$$F_{1|N} = \frac{|U|}{\epsilon_{1|N}} \left[\frac{d_1}{\epsilon_1} + \frac{d_2}{\epsilon_2} + \dots + \frac{d_N}{\epsilon_N} \right]^{-1}.$$

Наличие разрывов будет учтено в значении напряжения V_{FB} .

В большинстве случаев точность итерации 0.005 эВ по qU и ΔE_{Fpn} можно считать вполне достаточной. С большей точностью реальные барьеры практически никогда не известны.

4. Примеры расчетов вольт-амперных характеристик туннельных МДП-структур

Задачей работы является изложение и демонстрация универсальности подхода к расчету ВАХ туннельных МДП-структур. Поэтому далее для целей тестирования используются данные, полученные для приборов с тремя совершенно разными сочетаниями материалов: polySi/Si₃N₄/Si (рис. 3), TiN/HfO₂/SiO₂/Si (рис. 4), Al/SiO₂/Si (рис. 5). Кроме того, будут представлены результаты для систем с кристаллическим диэлектриком CaF₂ (см. следующий раздел). Данные для структур с

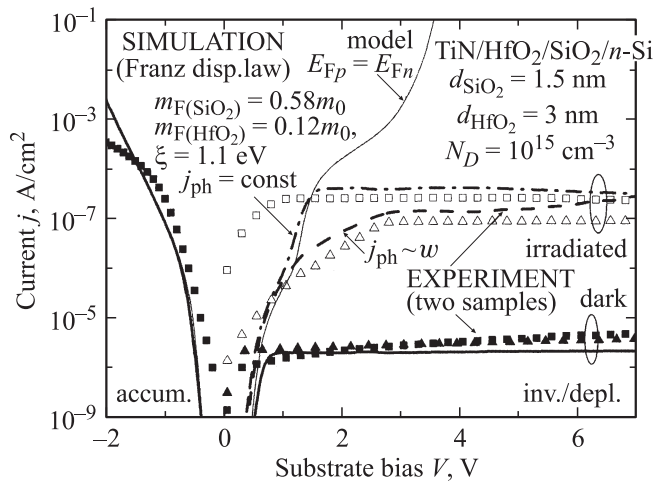


Рис. 4. ВАХ структур TiN/HfO₂/SiO₂/n-Si. Для обратной полярности показаны результаты измерений и расчета в отсутствие и при наличии внешнего освещения.

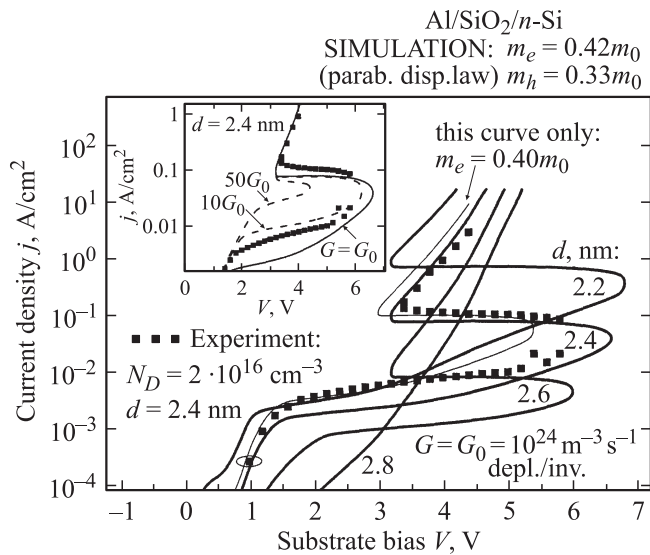


Рис. 5. Воспроизведение расчетом S-образной ВАХ структуры Al/SiO₂/n-Si в режиме обеднения-инверсии.

нитридом заимствованы из литературы [22], а остальные образцы были изготовлены и измерены нами с применением обычных технологических и измерительных процедур, на описании которых мы не останавливаемся.

Рис. 3 демонстрирует ВАХ структур polySi/Si₃N₄/Si, выполненных на подложках n- и p-типа; условие $E_{Fn} = E_{Fp}$ намеренно поддерживалось в конфигурации полевого транзистора. В этом случае не требуется решать уравнение баланса токов неосновных носителей (8), и ситуация в представленном режиме инверсии-обеднения близка к случаю аккумуляции (единный уровень Ферми), что приводит к экспоненциальному росту тока с напряжением. Параметры барьера: $\chi_e = 2.1$ эВ [22], $\epsilon_I = 7.5$, $E_g(\text{Si}_3\text{N}_4) = 5.1$ эВ [23]. Эффективные массы в диэлектрике вписаны на рисунке.

Заметим, что при применении закона дисперсии Франца теоретические ВАХ получаются более пологими, что во многих ситуациях, в том числе на рис. 3, лучше согласуется с экспериментом.

Данные для образцов TiN/HfO₂/SiO₂/Si показаны на рис. 4. В режиме аккумуляции имеет место типичный экспоненциальный рост тока. Но при обратной полярности, в отличие от ситуации рис. 3, условие $E_{Fn} = E_{Fp}$ не обеспечивалось. Поэтому подзадачи нахождения зонной диаграммы и туннельных токов решались совместно. Освещение структуры вызывает генерацию фототока j_{ph} , и при сильном освещении уравнение (8) сводится к $j_h = j_{ph}$, т.е. величина туннельной утечки определяется уровнем фотогенерации. При этом туннельный ток лишь слабо зависит от напряжения на структуре (рис. 4), особенно если j_{ph} считается не зависящим от ширины обедненной области. Константа в $j_{ph} = \text{const}$ или $J_{ph} = \text{const} \cdot w$ подбиралась для достижения наилучшего соответствия. Расчет производился с высотами барьеров: $\chi_e = 3.15$ эВ (разрыв зоны проводимости Si/SiO₂), $\chi_m = 2.6$ эВ (барьер металл/HfO₂), $\xi = 1.1$ эВ (разрыв зоны проводимости SiO₂/HfO₂; величина согласуется с [24]), $E_g(\text{HfO}_2) = 6.02$ эВ [25], $E_g(\text{SiO}_2) = 8.9$ эВ, и проницаемостями $\epsilon_{\text{HfO}_2} = 23$, $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3.9$. Эффективная масса m_F в HfO₂ примерно эквивалентна значениям m_e из [24].

В исследованной структуре HfO₂/SiO₂ практически не удалось выйти в режимы, в которых существен факт инжекции горячих электронов. Но в системе Al/SiO₂/n-Si ($\chi_m = 3.17$ эВ) ток ионизации $j_e(M-1)$ оказывает сильное влияние на баланс (рис. 5). Реализуется положительная обратная связь: более интенсивное туннелирование электронов приводит к усилению ударной ионизации, что изменяет значение $E_{Fp} - E_{Fn}$, увеличивает концентрацию неосновных носителей N_s и приводит к росту напряжения на диэлектрике, а это в свою очередь усиливает туннелирование. В итоге уравнение баланса имеет три решения, а ВАХ структур демонстрирует S-образность с выключенным и включенным состояниями, а также областью отрицательного дифференциального сопротивления. Такое поведение наблюдалось и нами (рис. 5), и в более ранних работах [3,26]. При малых толщинах, когда утечка дырок велика, область S-образности расширяется за счет ветви выключенных состояний, а инверсный слой, по сути, не формируется. Напротив, при толстом диэлектрике компонента j_h подавлена, однако $j_e(M-1)$ по-прежнему существенна из-за асимметрии барьера для электронов и дырок. В итоге ВАХ не демонстрирует S-образности, а прибор находится во включенном состоянии. Получается, что туннельная МДП-структура отличается от структур с толстым диэлектриком не только наличием тока, но и существенно иным распределением напряжения.

Заметим, что выбор параметров туннелирования исключительно важен, так как изменение эффективной массы носителей даже на сотые доли m_0 может заметно изменить величину туннельного тока (ср. ВАХ, полученные с $m_e = 0.40m_0$ и $0.42m_0$, на рис. 5).

Следует отдельно оговорить момент, связанный с воспроизведением темновой обратной ВАХ. Чаще всего время жизни, фигурирующее в выражении для j_{dd} (см. после формулы (9)), известно ненадежно. В такой ситуации можно его подобрать [27] и при этом вообще не рассматривать ток термогенерации j_{th} . Таким способом с $\tau_p = 3 \cdot 10^{-11}$ с была воспроизведена кривая на рис. 4. Альтернативный подход состоит в моделировании тока термогенерации j_{th} как $qG(w - w|_{V=0})$ с подбором темпа объемной генерации в подложке G (рис. 5), который обычно составляет порядка $G = 10^{23} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$, но иногда бывает больше; при этом для времени жизни берутся табличные величины, из-за чего j_{dd} оказывается очень малым. Параметр G , равно как и время жизни, определяется концентрацией ловушечных состояний в запрещенной зоне кремниевой подложки. На вставке к рис. 5 показано, что увеличение величины G может заметно сужать область бистабильности.

Резюмируя результаты, показанные на рис. 3–5, можно заключить, что методика расчета туннельных токов успешно работает для широкого класса МДП-структур. Аналогичным способом могут быть проведены вычисления ВАХ и других систем, в том числе с многослойными диэлектриками.

5. Дополнительно возникающие проблемы

Разумеется, при численном моделировании тех или иных туннельных систем появляются свои частные проблемы. Далее затронуты два вопроса, возникающие во многих случаях.

5.1. Кристаллический диэлектрик: сохранение поперечного волнового вектора

В рамках модели считалось, что поперечный волновой вектор k_{\perp} и компонента энергии E_{\perp} носителя в полупроводнике связаны как $E_{\perp} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_{s\perp}$. Такой подход правомерен при условии $k_{0\perp} = 0$ (k_0 — вектор экстремума зоны), но применяется и к транспорту электронов в кремнии. Оправданием служит отсутствие явных различий токов, измеряемых в МДП-структурах с окислами на Si(100) и (111), хотя в первом случае сдвиг $k_{0\perp}$ — для двух долин — равен нулю, а во втором он весьма велик ($\hbar^2 k_{0\perp}^2 / 2m_0 \approx 2.44 \text{ эВ}$), что должно было резко снизить вероятность туннелирования. Возможно, на границе Si и аморфной пленки происходит релаксация большого по величине волнового вектора [28].

Тем не менее, если диэлектрик кристаллический, можно ожидать, что туннельный процесс будет происходить с реальным сохранением k_{\perp} , каким бы большим он ни был. В таком случае при анализе переноса в зону проводимости подложки Si(111) или из нее следует внести изменения в выражение для вероятности T . Конкретно

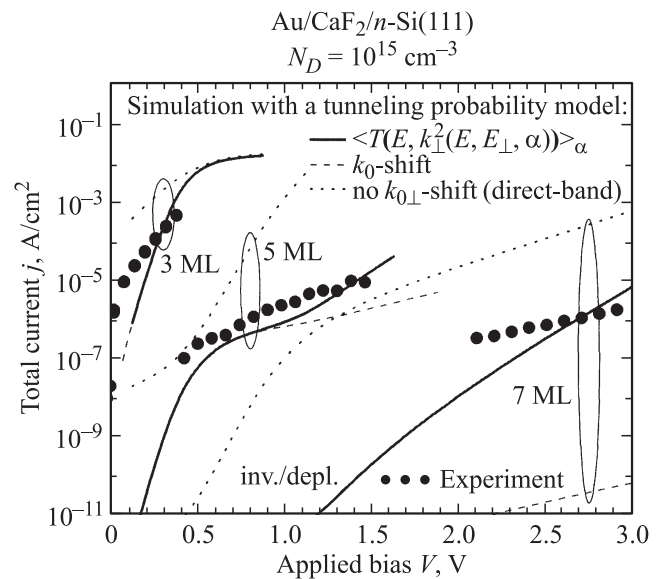


Рис. 6. ВАХ структур Au/CaF₂[3–7ML]/n-Si(111) в режиме обеднения-инверсии.

проводится усреднение [29] по всем состояниям α для заданной пары E, E_{\perp} :

$$T^*(E, E_{\perp}) = \langle T(E, k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \alpha)) \rangle_{\alpha}, \quad (10)$$

а в формулах (6) заменяется $m_{s\perp} E_{\perp}$ на $\hbar^2 k_{\perp}^2 / 2$. Вблизи минимума можно грубо ввести сдвиг $k_{\perp}^2 = 2m_{s\perp} \hbar^{-2} E_{\perp} + k_{0\perp}^2$ [30]. Для Si(100) применяется обычный подход $T = T(E, E_{\perp})$, но в (4) ставится $\nu_{\perp} = 2$. Выражения для тока и алгоритм (рис. 2) в целом остаются в силе.

Пример ситуации, в которой проявляются описанные особенности туннелирования, являют собой структуры Au/CaF₂[3–7ML]/n-Si(111). На рис. 6, помимо экспериментальных данных, представлены результаты расчета с учетом реальной зонной структуры кремния, с упомянутым выше сдвигом, а также в приближении прямозонного кремния. Очевидно, что соответствие лучше всего в первом из названных вариантов. На низких напряжениях неплохо работает и простой сдвиг. Параметры, использованные при вычислениях [30]: $m_e = 1.0m_0$, $\chi_e = 2.38 \text{ эВ}$, $\chi_m = 2.63 \text{ эВ}$, $E_{g(\text{CaF}_2)} = 12.1 \text{ эВ}$, $G = 10^{27} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $1 \text{ ML} = 3.15 \text{ \AA}$.

5.2. Неоднородность толщины диэлектрика вдоль площади

Очень распространенная проблема — особенно для пленок новых материалов, технология изготовления которых не отработана до уровня, сопоставимого с уровнем SiO₂, — связана с флуктуациями толщины диэлектрического слоя. В результате расчетные характеристики количественно не соответствуют измерениям при хорошем качественном согласии. Для моделирования в

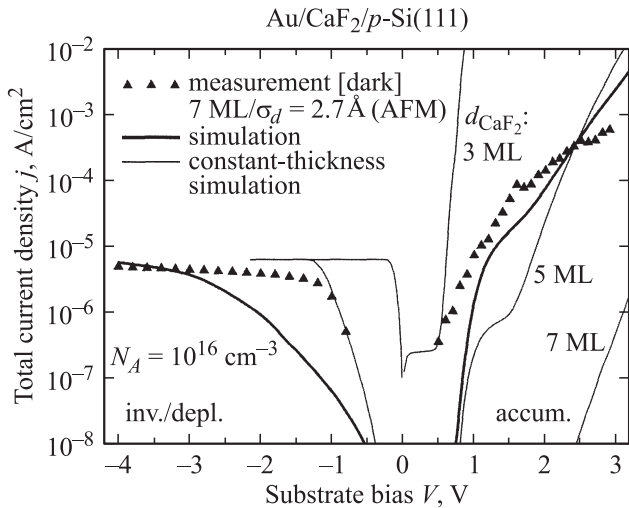


Рис. 7. ВАХ структур Au/CaF₂/p-Si(111) с неоднородно распределенной толщиной диэлектрического слоя.

таким случае можно принять, что толщина распределена по закону Гаусса

$$G_+(d) = (2\pi)^{-1/2} \sigma_d^{-1} \exp \left[-\frac{(d - d_n)^2}{2\sigma_d^2} \right]$$

с номинальным значением d_n и дисперсией σ_d^2 ; область $d < 0$ при этом игнорируется. Возможно и применение более сложных законов типа Г-распределения [31]. Для нанесенных пленок (грубо — и для SiO₂) имеет место $\sigma_d \approx rms$, причем если rms измерено для слоя того же материала толщины d_{rms} , отличной от d_n , то ориентировочно следует считать, что $\sigma_d = rms (d_n/d_{rms})^{1/2}$.

Обычно проводимость инверсионного или обогащенного слоя достаточно высока, так что положение (квази-)уровня Ферми приповерхностной квантовой ямы может считаться одинаковым по всей площади структуры. При этом, в отличие от E_{Fp} и E_{Fn} , локальное напряжение на диэлектрике U будет различным для разных локальных толщин d . Каждая компонента туннельного тока вычисляется как

$$j_{e|h} = \int_0^{+\infty} j_{e|h}(d, U(d)) G_+(d, d_n, \sigma_d) \delta d. \quad (11)$$

„Взвешиванию“ подлежат еще j_{th} и j_{ph} , поскольку ширина области обеднения зависит от d . На практике, если дана разность ΔE_{Fpn} , удобно заранее вычислить $j(V)$ для серии толщин.

На рис. 7 сопоставлены измеренные вольт-амперные характеристики структур Au/CaF₂/p-Si(111) и результаты моделирования с учетом конечного среднеквадратичного отклонения σ_d . Значение σ_d измерено с помощью микроскопа атомных сил и, в отличие от образцов на рис. 6, не является пренебрежимо малым. Учет неоднородности толщины слоя CaF₂ резко улучшает

соответствие эксперименту в режиме обогащения. Никаким подбором $d = \text{const}$ такое согласие достигнуто быть не могло ввиду различия наклона. В то же время в области „полочки“ в режиме обеднения-инверсии, если ток обеспечивается неосновными носителями и поэтому зависит от толщины слабо, роль флуктуаций менее принципиальна.

Следует оговорить, что любые неоднородности характеризуются корреляционной длиной [32] — минимальным расстоянием λ между точками, локальные толщины диэлектрика в которых независимы. Мы считали, что имеет место соотношение $L \gg \lambda$, где L — размер электрода. Если данное условие не обеспечено, появится разброс вольт-амперных характеристик между структурами [32]. Но средние значения тока от соотношения L/λ не зависят.

Авторы благодарны И.В. Грехову, А.Ф. Шулекину, Н.С. Соколову, С.М. Сутурину (ФТИ), А.е А.е и Y. Zhang (SIMTech) за поддержку на различных этапах работы. Ю.Ю.И. благодарит программу Erasmus Mundus за финансирование поездки в Сингапур.

6. Заключение

В работе изложена общая процедура вычисления характеристик туннельных МДП систем, применимая к структурам с самыми различными сочетаниями материалов: металлический или поликремниевый затвор, одно- или многослойный диэлектрик, любые тип и уровень легирования — при управлении током или напряжением. Вычленены отдельные подзадачи-блоки, даны комментарии к физическим моделям, взятым за основу. Важными моментами являются учет приповерхностного квантования единым способом в режимах обогащения и обеднения-инверсии, включение тока валентной зоны в анализ наряду с электронной компонентой, а также общая запись вероятности туннелирования одновременно через верхний и нижний барьеры. Эти моменты частично рассматривались в цитированных более ранних работах, но целостный алгоритм приведен впервые.

Проведены расчеты вольт-амперных кривых ряда туннельных МДП-структур — Al/SiO₂/Si, TiN/HfO₂/SiO₂/Si, polySi/Si₃N₄/Si, Au/CaF₂/Si, достигнуто приемлемое согласие с результатами экспериментов. Иллюстрации при этом служили не только для демонстрации апробации алгоритма, но и для акцентирования существенных деталей моделирования, таких как варьирование эффективной массы носителя или (не)учет флуктуаций. Представляется, что изложенных в статье сведений достаточно для организации расчета электрических характеристик интересующих структур. Параметры барьеров новых изучаемых образцов следует заимствовать из литературы; возможно также использование модели для оценки этих параметров. Учитывая, что МДП-структура является одним из важнейших объектов исследования современной полупроводниковой физики и электроники,

наличие общего проверенного алгоритма может иметь практическую ценность.

Список литературы

- [1] K. Kuhn, Ch. Kenyon, A. Kornfeld, M. Liu, A. Maheshwari, W.-k. Shih, S. Sivakumar, G. Taylor, P. VanDerVoorn, K. Zawadzki. *Intel Technology J.*, **12** (2), 93 (2008).
- [2] E. Aderstedt, I. Medugorac, P. Lundgren. *Sol. St. Electron.*, **46** (4), 497 (2002).
- [3] Е.В. Остроумова, А.А. Рогачев. *ФТП*, **28** (8), 1411 (1994).
- [4] А.Я. Vul', А.Т. Dideikin. *Sensors Actuators A*, **39** (1), 7 (1993).
- [5] Th. Kauerauf, B. Govoreanu, R. Degreave, G. Groeseneken, H. Maes. *Sol. St. Electron.*, **49** (5), 695 (2005).
- [6] H. Bachhofer, H. Reisinger, E. Bertagnolli, H. von Philipsborn. *J. Appl. Phys.*, **89** (5), 2791 (2001).
- [7] T. Kanazawa, R. Fujii, T. Wada, Y. Suzuki, M. Watanabe, M. Asada. *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 092101 (2007).
- [8] A. Ghetti, J. Bude, P. Silverman, A. Hamad, H. Vayda. *IEICE Trans. Electron.*, **E83-C** (8), 1175 (2000).
- [9] N. Yang, W.K. Henson, J.R. Hauser, J.J. Wortman. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-46** (7), 1464 (1999).
- [10] I.V. Grekhov, G.G. Kareva, S.E. Tyaginov, M.I. Vexler. *Microelectron. Reliab.*, **47** (4–5), 669 (2007).
- [11] P. Palestri, N. Barin, D. Brunel, C. Buseret, A. Campera, P.A. Childs, F. Driussi, C. Fiegna, G. Fiori, R. Gusmeroli, G. Iannaccone, M. Karner, H. Kosina, A.L. Lacaita, E. Langer, B. Majkusiak, C. Monzio Compagnoni, A. Poncet, E. Sangiorgi, L. Selmi, A.S. Spinelli, J. Walczak. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **54** (1), 106 (2007).
- [12] С.М. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984) т. 2, гл. 8.
- [13] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985) гл. 3.
- [14] A.F. Shulekin, M.I. Vexler, H. Zimmermann. *Semicond. Sci. Technol.*, **14** (5), 470 (1999).
- [15] M.I. Vexler. *Sol. St. Electron.*, **47** (8), 1283 (2003).
- [16] G.A.M. Hurkx, D.B.M. Klaassen, M.P.G. Knauers. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-39** (2), 331 (1992).
- [17] B. Jonsson, S.T. Eng. *IEEE J. Quant. Electron.*, **QE-26** (11), 2025 (1990).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (М., Наука, 1989).
- [19] W. Franz. In: S. Flügge, ed. *Handbuch der Physik* (Springer, Berlin, 1956) v. XVIII, p. 155.
- [20] S.E. Tyaginov, M.I. Vexler, A.F. Shulekin, I.V. Grekhov. *Microelectron. Eng.*, **83** (2), 376 (2006).
- [21] W.E. Drummond, J.L. Moll. *J. Appl. Phys.*, **42** (13), 5556 (1971).
- [22] Y.-C. Yeo, Q. Lu, W.C. Lee, T.-J. King, C. Hu, X. Wang, X. Guo, T.P. Ma. *IEEE Electron. Dev. Lett.*, **EDL-21** (11), 540 (2000).
- [23] H. Yu, Y.-T. Hou, M.-F. Li, D.-L. Kwong. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-49** (7), 1158 (2002).
- [24] S. Monaghan, P.K. Hurley, K. Cherkaoui, M.A. Negara, A. Schenk. *Sol. St. Electron.*, **53** (4), 438 (2009).
- [25] J. Robertson. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **18** (3), 1785 (2000).
- [26] S.K. Lai, P.V. Dressendorfer, T.P. Ma, R.C. Barker. *Appl. Phys. Lett.*, **38** (1), 41 (1981).
- [27] J.P. Shiely. *Simulation of tunneling in MOS devices* (Ph.D. thesis, Duke Univ., 1999).
- [28] A. Schenk. *Advanced physical models for silicon device simulations* (Springer, Wien, N.Y., 1998) chap. 5.
- [29] Y.Y. Illarionov, M.I. Vexler, S.M. Suturin, V.V. Fedorov, N.S. Sokolov, K. Tsutsui, K. Takahashi. *Microelectron. Eng.*, **88** (7), 1291 (2011).
- [30] M.I. Vexler, N.S. Sokolov, S.M. Suturin, A.G. Banshchikov, S.E. Tyaginov, T. Grasser. *J. Appl. Phys.*, **105**, 083716 (2009).
- [31] В. Феллер. *Введение в теорию вероятностей и ее приложения* (М., Мир, 1984) т. 2.
- [32] S.E. Tyaginov, M.I. Vexler, A.F. Shulekin, I.V. Grekhov. *Sol. St. Electron.*, **49** (7), 1192 (2005).

Редактор Т.А. Полянская

A general simulation procedure for the electrical characteristics of MIS tunnel structures

M.I. Vexler*, S.E. Tyaginov⁺⁺, Yu.Yu. Illarionov*[•],
Yew Kwang Sing[‡], Ang Diing Shenp[‡],
V.V. Fedorov*, D.V. Isakov[•]

* Ioffe Physical-Technical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

+ TU Vienna, Institute for Microelectronics,
1040 Wien, Austria

• Singapore Institute of Manufacturing Technology,
638075 Singapore

‡ Nanyang Technological University,
639798 Singapore

Abstract The algorithm for simulation of I - V characteristics of a current- or voltage-controlled metal–tunnel–thin insulator–semiconductor system, is proposed. The basic underlying physical models are discussed. A functionality of the algorithm is confirmed by a comparison of the simulation results with the measurement data, obtained directly by the authors or borrowed from literature, for several different structures. The presented information is supposed to suffice for carrying out the calculation of the electrical characteristics of studied structures with the various material combinations: metal or poly-Silicon gate, single-layer of stacked insulator, any type and doping level of a semiconductor.