

Адаптация модели туннелирования в системе металл/CaF₂/Si(111) к использованию в симуляторах МДП-приборов

© М.И. Векслер*[¶], Ю.Ю. Илларионов*⁺, С.Э. Тягинов*⁺, Т. Grasser⁺

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

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

(Получена 20 мая 2014 г. Принята к печати 20 июня 2014 г.)

Предложен вариант упрощения модели туннельного переноса электронов через тонкий слой кристаллического фторида кальция в кремний (111) для последующей имплементации в симуляторы полупроводниковых приборов. Состоятельность подхода доказана сопоставлением данных моделирования по упрощенным формулам с точными расчетами и экспериментальными данными. Подход применим для вычисления туннельных токов в структурах с любыми кристаллическими диэлектриками на Si(111).

1. Введение

Фторид кальция (CaF₂) — кристаллический диэлектрик, успешно выращиваемый в виде тонких пленок на подложках кремния ориентации (111) благодаря близости постоянных решетки. Когда-то этот фторид воспринимался как экзотический материал со спорными перспективами приборных применений, но относительно недавно был достигнут прогресс в технологии его роста методом молекулярно-лучевой эпитаксии и показана возможность использования CaF₂ для барьерных слоев в резонансно-туннельных диодах (РТД) и сверхрешетках (в комбинации с Si [1] или CdF₂ [2]). Также стала актуальной и старая идея применения фторида как подзатворного диэлектрика в полевом транзисторе [3].

Результаты, достигнутые в технологии, естественным образом выдвигают и ряд новых задач в сфере моделирования. Недавно нами были выполнены расчеты вольт-амперных характеристик (ВАХ) структур металл–CaF₂–кремний без подгоночных параметров [4]. Следующий этап — подготовка к привлечению промышленных программ–симуляторов для анализа поведения приборов со слоями фторидов. Теория туннельного транспорта через кристаллический изолятор при ориентации Si(111) заметно сложнее, чем для (100), а симуляторы задействуют и без того значительные вычислительные ресурсы. С целью их разумного снижения необходимо провести оптимизацию модели туннелирования, что и составляет предмет настоящей работы.

Далее будет предложена упрощенная формула для вероятности туннелирования и введена эффективная толщина пленки CaF₂. Для демонстрации состоятельности подхода результаты будут сопоставлены с точным решением и с данными измерений. Кроме того, мы рассмотрим пример одной из физических ситуаций, на которые нацелен упрощенный подход (случай утечки горячих носителей из канала транзистора с фторидом).

2. Параметризация МДП-системы с CaF₂

Значения параметров барьеров CaF₂/Si можно считать надежно известными. Как и в предыдущих работах [4–6], примем, что разрыв зоны проводимости составляет $\chi_e = 2.38$ эВ, а валентной зоны $\chi_h = 8.6$ эВ. Эффективная масса для обеих разрешенных зон фторида $m_e = m_h = 1.0m_0$ ($m_F = 1.2m_0$ для закона Франца). Низкочастотная проницаемость равна $\epsilon_I = 8.43$, ширина запрещенной зоны $E_{gI} = 12.1$ эВ, а сродство к электрону $\xi_I = 1.67$ эВ.

Высота барьера золото/CaF₂ составляет $\chi_m = 2.63$ эВ, это значение установлено на основе опыта изготовления структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) с фторидом. С учетом значительного превышения χ_h над χ_e и χ_m (левый рис. 1), туннелирование всегда осуществляется через „верхний“ барьер, а его вероятность записывается как

$$T(E, k_{\perp}^2) = \exp \left[-2\hbar^{-1} \int \sqrt{2m_e (E_{cI}(z) - E + \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_e)} dz \right], \quad (1)$$

в том числе для транспорта в валентную зону Si или из нее. Здесь E обозначает энергию носителя, k_{\perp} — поперечную (к направлению переноса z) компоненту его волнового вектора, E_{cI} — край зоны проводимости CaF₂. Для электронов около минимума зоны проводимости Si(111) значения k_{\perp} велики ($\sim k_{0\perp}$, рис. 1), а для дырок у потолка валентной зоны малы, поэтому дырочный ток может конкурировать с электронным и должен учитываться.

3. Стандартная процедура расчета токов в МДП-структуре

Подходы к расчету туннельных токов в МДП-системе разработаны достаточно детально [5–6]. Кратко сфор-

[¶] E-mail: shulekin@mail.ioffe.ru

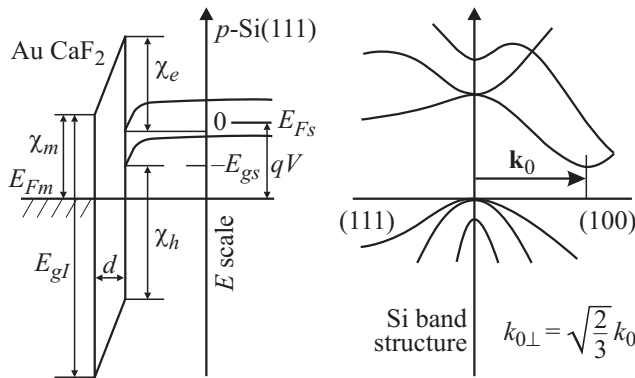


Рис. 1. Зонная диаграмма МДП-структуры с CaF₂ (pSi, обогащение). Фрагмент зонной структуры Si.

мулируем основные моменты. В наиболее общем виде ток записывается как интеграл по полной энергии и поперечному волновому вектору:

$$j = \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int (f_s(E) - f_m(E)) dE \iint T(E, k_{\perp}^2) d^2k_{\perp}, \quad (2)$$

где f_m и f_s — функции заполнения возможных состояний для металла и полупроводника (в случае равновесных носителей используются функции Ферми). Однако самой традиционной и широко применяемой в этой сфере формулой стала (см. [5–7] и др.):

$$j = \frac{4\pi q}{h^3} \int v_{\perp} m_{\perp} (f_s(E) - f_m(E)) dE \int T(E, E_{\perp}) dE_{\perp}, \quad (3)$$

где интегрирование проводится, наряду с E , по „поперечной“ энергии e_{\perp} . Через m_{\perp} и v_{\perp} обозначены масса частицы в Si в плоскости структуры и кратность вырождения. Диапазон интегрирования в (3) определяется наличием состояний с заданной комбинацией E, E_{\perp} , причем — в такой записи — он разрывается на электронную и дырочную области. Перенос с приповерхностных уровней может быть учтен дополнительными „дискретными“ членами [6] или сужением диапазона по энергии в квантовой яме, или использованием „квантовых коррекций“ (поправочного фактора $\xi(E)$ в интеграле по E — это типично для симуляторов, например [8]). Полный алгоритм вычислений изложен нами в статье [6].

Переход от (2) к (3) допустим лишь для аморфного диэлектрика или при параболическом законе дисперсии в полупроводнике и отсутствии сдвига экстремума зоны в поперечной плоскости ($k_{0\perp} = 0$). Это случаи дырочных зон и электронных зон для Si(100). Однако при кристаллическом диэлектрике на кремнии ориентации (111), чтобы пользоваться выражением (3) для электронов, следует усреднять вероятность по состояниям с данной парой E, E_{\perp} — другими словами, подставлять

вместо T значение

$$T^*(E, E_{\perp}) = \langle T(E, k_{\perp}^2(E, E_{\perp}, \alpha)) \rangle_{\alpha} \quad (4)$$

(параметр α фиксирует состояние в k -пространстве). Его получение вполне осуществимо отдельно [4], но слишком трудоемко для симулятора, так как потребуется производить дополнительное интегрирование для каждой пары E, E_{\perp} .

При вычислении туннельного тока через слой любого диэлектрика необходимо учитывать конечное значение среднеквадратичного отклонения толщины σ_d :

$$\langle j \rangle = \int_0^{+\infty} j(d) \Gamma(d, d_n, \sigma_d) \delta d, \quad (5)$$

где через $\Gamma(d, d_n, \sigma_d)$ обозначена плотность нормального распределения с номинальной толщиной d_n . Такой вид распределения толщины для CaF₂ неоднократно подтверждался нами с помощью атомно-силового микроскопа. Указанная процедура элементарна, но приводит к значительному росту времени вычисления.

4. Оптимизация модели для имплементации в промышленный симулятор

Основная деталь, обусловленная структурой зоны проводимости кремния, состоит в том, что для электронов с энергиями E около нуля вероятность туннелирования снижается из-за большого поперечного волнового вектора. При повышении E эффект нивелируется, а ситуация мало отличается от случая прямозонного материала. Этому способствует и общее усложнение законов дисперсии при удалении от минимума. Чтобы отразить идею математически простым способом, примем, что наличие составляющей k_{\perp} , различной для разных состояний с заданными величинами E и E_{\perp} , равносильно определенному сдвигу ΔE энергии туннелирующих электронов. Наибольший сдвиг ($\Delta E_0 = 2.44$ эВ) реализуется для $E = E_{\perp} = 0$, а с ростом энергии имеем $\Delta E \rightarrow 0$. В итоге вероятность для CaF₂/Si(111) запишем в виде

$$T^*(E, E_{\perp}) = \exp \left[-2\hbar^{-1} \times \int \sqrt{2m_e (E_{cI}(z) - E + m_{\perp} m_e^{-1} E_{\perp} + m_0 m_e^{-1} \Delta E(E))} dz \right], \quad (6)$$

где для зависимости $\Delta E(E)$ предлагается эмпирическое соотношение

$$\Delta E = \Delta E_0 \exp(-E/E_s). \quad (7)$$

Выражение (6) тогда подставляется во внутренний интеграл в (3). Такие вычисления в сопоставлении с результатами по формуле (2) и по формуле (3) с (4)

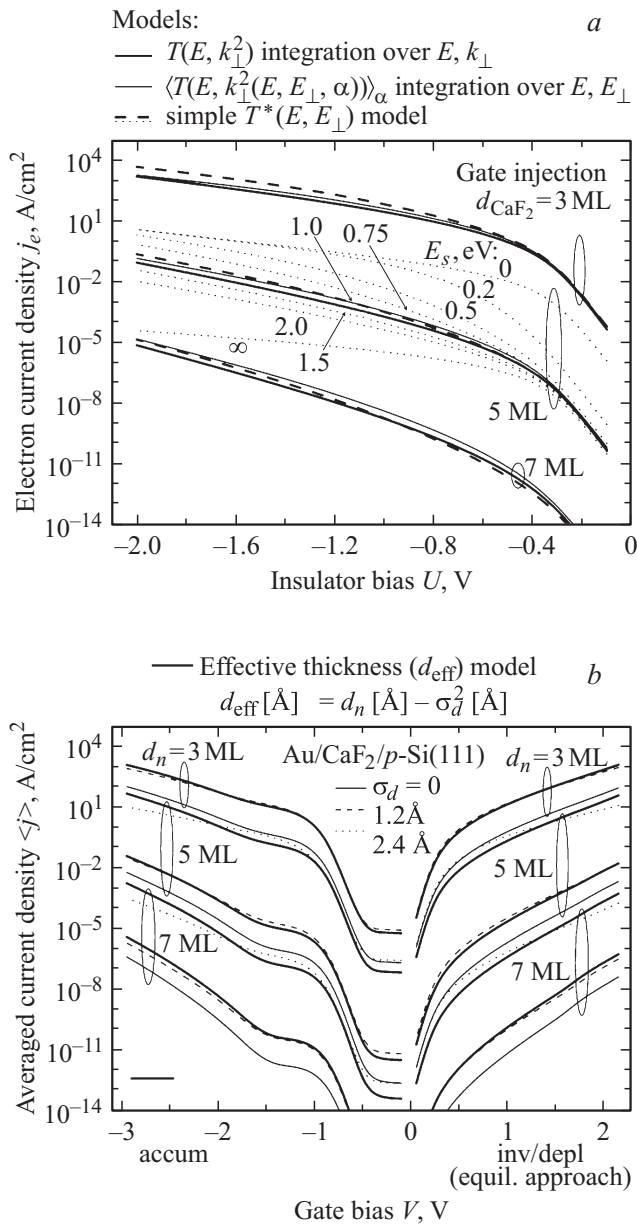


Рис. 2. *a* — подбор параметра E_s , характеризующего сдвиг энергии туннелирующих в Si(111) электронов; *b* — вычисление тока в модели эффективной толщины фторида. 1 ML (монослой) = 0.315 nm.

дают для параметра E_s оптимальное значение 1.0 эВ (рис. 2, *a*). Тип легирования на рис. 2, *a* несуществен, так как аргументом там выступает напряжение на CaF₂. Заметим, что с $\Delta E = 0$ соотношение (6) приняло бы „традиционный“ вид, хорошо известный из многих работ по туннельным МДП-структурам [6–7].

Обратимся теперь к вопросу о флуктуациях толщины фторида. Наличие $\sigma_d \neq 0$ приводит к значительному росту тока, как это следует из вычислений по формулам (3)–(5) (рис. 2, *b*). Следовательно, эффектом пренебречь нельзя. Вместо этого имеет смысл ввести

эффективную толщину, как это делалось в свое время для МДП-структур с SiO₂ [9]:

$$d_{\text{eff}} = d_n - \eta \sigma_d^2, \quad (8)$$

где η — подгоночный параметр, а с d_{eff} оперировать как с толщиной однородного слоя. В основе подхода лежит приближение $j(d) \propto \exp(-2\kappa d)$ [$\kappa = (2m_e\chi)^{1/2}\hbar^{-1}$] для зависимости локальной плотности тока от толщины; эта плотность „взвешивается“ по Гауссу (5). В качестве характерной высоты барьера χ можно взять величину $\sim 3\text{--}3.5$ эВ. При этом мы учитываем, что типичные напряжения на фториде составляют около 1 В и что барьер для дырок соизмерим с барьером для электронов (нельзя забывать о ΔE). При реалистичных вариациях χ получаем $\eta \approx 0.95\text{--}1.00$, если величины d_n , σ_d и d_{eff} в (8) выражены в ангстремах. Как видно на рис. 2, *b*, выбор значения $\eta = 1$ обеспечивает хорошее соответствие, за исключением некоторого различия наклона кривых. Заметим, что эффект флуктуаций для CaF₂ при том же σ_d выражен сильнее, чем для SiO₂ (в последнем случае $\eta = 0.5$), что связано с меньшей эффективной массой ($0.42m_0$) [9].

Предложенные упрощения (для T^* и d_{eff}), как представляется, могут быть непосредственно использованы при имплементации в промышленные симуляторы полупроводниковых приборов. Одним из таких симуляторов в ближайшем будущем может выступить Minimos-NT [8]; его уровень соответствует самым современным требованиям, но он никогда ранее не применялся к приборам на основе фторида кальция.

5. Примеры рассчитанных вольт-амперных характеристик

На рис. 3 показаны примеры расчета ВАХ диодных МДП-структур Au/CaF₂/pSi(111) ($N_A = 10^{16}$ см⁻³) в сопоставлении с уже публиковавшимися экспериментальными данными [6]. Выбран режим обогащения, так как интерпретация данных в случае обратной полярности осложнена проблемой нехватки неосновных носителей [10]. Сами по себе результаты такого рода не представляют собой новизны, так как согласие уже было получено ранее (точная модель). Однако принципиален тот факт, что теперь расчет производился, в том числе, и с помощью адаптированной модели, пригодной для симуляторов.

Выясняется, что в последнем случае вычисления вероятности T^* и эффективной толщины дают удовлетворительное соответствие точным результатам. При этом отклонения связаны в основном с использованием d_{eff} , в то время как замена сложного усреднения (4) на эмпирические формулы (5), (6) почти не влечет дополнительных изменений. Тем не менее, конечно, соотношения (5), (6) должны восприниматься не как единственно возможные, а как допустимые для оптимизации модели.

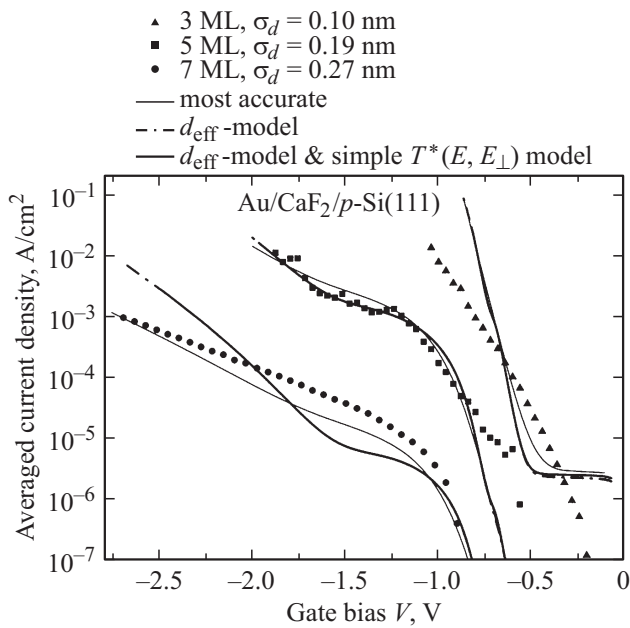


Рис. 3. Рассчитанные характеристики МДП-структур с фторидом кальция, сопоставленные с результатами измерений. Вычисления произведены тремя способами: точно (по формулам (3)–(5)), с эффективной толщиной ((3), (4), (8)) и по упрощенной формуле ((3), (6)–(8)).

Отметим, что представленный на рис. 3 диапазон толщин полностью покрывает область практического интереса: именно ультратонкие (2 нм и менее) слои фторида требуются и для РТД, и для полевых транзисторов, и для инжекционных МДП-приборов.

6. Расчет туннельного тока горячих электронов

В качестве примера реальной физической ситуации, для моделирования которой с помощью промышленного симулятора потребуется использовать адаптированную модель, рассмотрим случай горячих электронов в канале полевого транзистора. Сечение такого прибора представляет собой не что иное, как туннельную МДП-структуру.

Вычисление утечки горячих носителей производится путем использования в качестве f_s в формулах (2), (3) не функции Ферми, а неравновесной функции распределения, своей для каждой координаты вдоль канала. Она определяется как

$$f_s(E) = dn(E)/dE\rho_{3D}^{-1}(E), \tag{9}$$

где ρ_{3D} — плотность состояний в кремнии, а dn/dE (см⁻³ эВ⁻¹) — распределение электронов по энергии на интерфейсе Si/CaF₂. Для нахождения dn/dE необходимо решение транспортного уравнения Больцмана, что требует значительных вычислительных ресурсов [11]. В связи с этим, для расчета туннельных

токов целесообразно использовать оптимизированные формулы.

Серьезный расчет транспорта горячих электронов требует тщательного анализа геометрии прибора, эффектов рассеяния, подвижности. Простейшая иллюстрация далее служит только для демонстрации общего плана. Рассмотрим n -канальный транзистор (рис. 4) со слоем CaF₂. Напряжение исток–затвор обозначим U_{gs} , а исток–сток U_{sd} . Для простоты примем, что разность потенциалов между затвором и инверсным слоем квадратично изменяется с координатой x на прямой исток–сток. Энергия нагрева будет вести себя как $E_{heat}(x) = \beta q U_{sd} x^2 / L^2$, где L — длина канала, а β — условный фактор в пределах от 0 до 1. Также для простоты положим, что все электроны получают одинаковую добавку $E_{heat}(x)$ к энергии на истоке. В этом искусственном приближении функция f_s в точке x принимает „равновесный“ вид со сдвигом уровня Ферми на $E_{heat}(x)$ для энергий выше $E_{min} + E_{heat}(x)$ и равна нулю для меньших значений E . Под E_{min} понимается наименьшая энергия электрона у истока, а E в точке x отсчитывается от дна зоны проводимости Si в этой точке.

Для расчетов плотности тока (рис. 4) использованы формулы (3), (6), (7), (9). Считалось, что энергия E_{heat} на 2/3 (равнораспределение по направлениям) или полностью переходит в E_{\perp} . Изменения локальной плотности тока $j(x)$ при приближении к стоку определяются влиянием нагрева, приводящим к росту $j(x)$, и снижению напряжения на диэлектрике, вызывающим обратный эффект. Естественно, при $E_{\perp, heat} = E_{heat}$, рост тока с координатой менее выражен, но из-за особенностей системы CaF₂/Si(111) разогрев принципиален и в этом случае, так как все равно T^* увеличивается (см. (7)). Для намного более толстых изоляторов, чем на рис. 4, и высоких напряжений вблизи истока утечки обычно нет, но она резко появляется у стока из-за надбарьерной

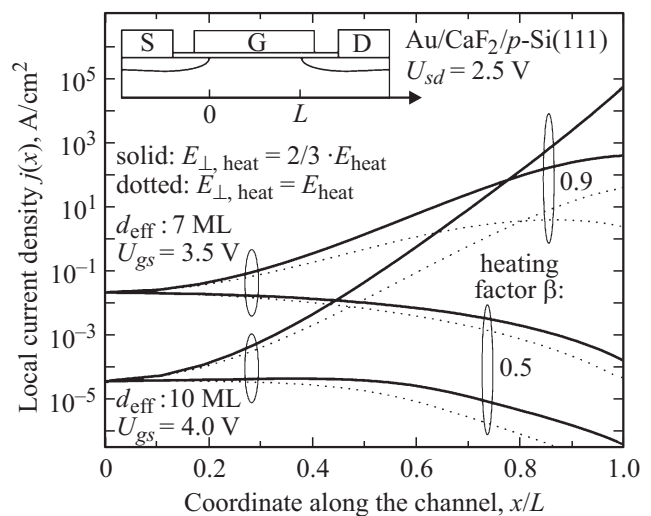


Рис. 4. Рассчитанные туннельные утечки в канале транзистора с CaF₂ (с учетом эффекта „разогрева“).

инжекции горячих электронов в зону проводимости диэлектрика (подобный случай, применительно к прибору с SiO₂, был разобран в [12]).

7. Заключение

В работе предложен вариант адаптации модели туннельного транспорта электронов через слой кристаллического фторида кальция в кремний (111) для имплементации в промышленные симуляторы. Состоятельность подхода доказана сопоставлением с результатами точных расчетов. Он может быть применен и к МДП-структурам с другими кристаллическими изоляторами на Si(111), просто для CaF₂ уже есть экспериментальные подтверждения актуальности изучаемых особенностей туннельного транспорта. Продолжением работы должно стать проведение вычислений с помощью симуляторов для конкретных приборов с пленками фторида на том же математическом уровне, на котором выполняются расчеты приборов более традиционными диэлектриками.

Список литературы

- [1] M. Watanabe, Y. Iketani, M. Asada. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39**, L964 (2000).
- [2] M. Watanabe, T. Funayama, T. Teraji, N. Sakamaki. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39**, L716 (2000).
- [3] T. Waho, F. Yanagawa. *IEEE Electron. Dev. Lett.*, **9**, 548 (1988).
- [4] М.И. Векслер, Ю.Ю. Илларионов, С.М. Сутурин, В.В. Федоров, Н.С. Соколов. *ФТТ*, **52** (11), 2205 (2010).
- [5] Yu.Yu. Illarionov, M.I. Vexler, S.M. Suturen, V.V. Fedorov, N.S. Sokolov, K. Tsutsui, K. Takahashi. *Microelectron. Eng.*, **88** (7), 1291 (2011).
- [6] М.И. Векслер, С.Э. Тягинов, Ю.Ю. Илларионов, Yew Kwang Sing, Ang Diing Shenp, В.В. Федоров, Д.В. Исаков. *ФТП*, **47** (5), 675 (2013).
- [7] M. Depas, B. Vermeire, P.W. Mertens, R.L. Van Meirhaeghe, M.M. Heyns. *Sol. St. Electron.*, **38** (8), 1465 (1995).
- [8] MINIMOS-NT User's Guide (Institute for Microelectronics, TU Wien, Austria).
- [9] М.И. Векслер, С.Э. Тягинов, А.Ф. Шулекин, И.В. Грехов. *ФТП*, **40** (9), 1137 (2006).
- [10] A. Schenk. *Advanced Physical Models for Silicon Device Simulations* (Springer, Wien-N.Y., 1998) chap.5.
- [11] C. Jungemann, B. Meinerzhagen. *Hierarchical Device Simulation* (Springer, Wien-N.Y., 2003).
- [12] С.Э. Тягинов, Д.С. Осинцев, Ю.Ю. Илларионов, J.M. Park, H. Enichlmair, М.И. Векслер, Т. Grasser. *Тез. докл. XI РКФП* (СПб., 2013) с. 441.

Редактор Т.А. Полянская

Adaptation of a metal/CaF₂/Si(111) tunneling model for application in industrial simulators of MIS devices

M.I. Vexler*, Yu.Yu. Illarionov*+, S.E. Tyaginov*+, T. Grasser+

* Physical-Technical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia
+ TU Vienna, Institute for Microelectronics,
Vienna 1040, Austria

Abstract The approach to simplify the model of a tunneling electron transport through thin layer of crystalline calcium fluoride into the (111)silicon has been proposed, targeting further implementation into the semiconductor device simulators. This approach is validated by screening the calculation results obtained using the simplified equations with those given by the accurate model and experimental data. The approach can be applied for simulation of the tunnel currents in the structures with any crystalline insulators on Si(111).