

Заряд квантовой ямы и распределение напряжения в структуре металл—диэлектрик—кремний при резонансном туннелировании электронов

© М.И. Векслер¹, Ю.Ю. Илларионов^{1,2}, И.В. Грехов¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

² Technische Universität Wien, Institut für Mikroelektronik, Gußhausstr. 29, A-1040 Vienna, Austria

E-mail: vexler@mail.ioffe.ru

(Получена 1 ноября 2016 г. Принята к печати 10 ноября 2016 г.)

Теоретически рассмотрены условия накопления электронов в квантовой яме резонансно-туннельной структуры металл—окисел— p^+ -кремний и масштаб влияния накопленного заряда на распределение напряжения. Исследованы системы с SiO_2 , HfO_2 и TiO_2 в качестве диэлектрика. Показано, что появления заряда в яме при резонансном транспорте можно ожидать для структур на подложках с концентрацией акцепторов от $(5-6) \cdot 10^{18}$ до $(2-3) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в диапазоне толщин окисла, зависящем от этой концентрации. Так, для структур с $\text{SiO}_2/p^+-\text{Si}(10^{19} \text{ см}^{-3})$ толщина окисла должна превышать ~ 3 нм. Плотность электронов в яме может достигать величин $\sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и более. Однако влияние этого заряда на электростатику структуры становится заметным только в режимах сравнительно высоких напряжений, далеких от момента активации резонансного переноса через первую подзону.

DOI: 10.21883/FTP.2017.04.44337.8445

1. Введение

Резонансное туннелирование (РТ) в МДП структурах (металл—диэлектрик—полупроводник) — сравнительно новый аспект их физики. Такой тип переноса электронов становится возможным, когда дно E_i хотя бы одной подзоны приповерхностной квантовой ямы (КЯ) лежит энергетически ниже края $E_{v\infty}$ валентной зоны (v -зоны) толщи полупроводника (рис. 1). При концентрациях акцепторов в Si $N_A \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и нанометровых толщинах окисла обеспечивается достаточная прозрачность кремниевого и окисного барьеров и электроны резонансно туннелируют по пути v -зона—КЯ—металл.

Указанное явление было исследовано в наших более ранних работах [1,2]. В частности, удалось показать [2], что при определенных условиях РТ сопровождается возникновением заряда подвижных носителей в КЯ. Однако остался открытым вопрос о реальных величинах этого заряда и о том, сколь существенным может быть его влияние на распределение напряжения. В настоящей работе применительно к структурам металл—окисел— p^+ -кремний (100) будет теоретически изучена количественная сторона эффекта накопления электронного заряда в разных режимах.

К рассматриваемой ситуации примыкает случай пополнения КЯ посредством межзонного туннелирования при очень большом изгибе зон в Si, которое возможно вне связи с РТ [3] и даже при не столь сильном легировании. Данный случай в работе не анализируется: более интересен, по нашему мнению, вариант, когда пополнение КЯ начинается уже при активации РТ через первую подзону, т.е. при выполнении соотноше-

ния $E_{c0} + E_1 \sim E_{v\infty}$, а не при гораздо более высоких смещениях.

2. Основы модели МДП структуры в режимах резонансного туннелирования

Теория туннельной МДП структуры к настоящему моменту разработана весьма детально и опубликована [4,5]. Поэтому остановимся только на моментах, существенных именно применительно к РТ.

Уровни энергии в КЯ могут быть определены из квазиклассического соотношения:

$$\int \sqrt{E_c(z) - E_i} dz = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m_{i,z}}} \left(n - \frac{1}{4} \right), \quad (1)$$

где $E_c(z)$ — профиль зоны проводимости (c -зоны), а значением $1/4$ в скобках отражается близость формы КЯ к треугольной [6]. Первый уровень E_1 отвечает „тяжелым“ электронам ($E_{he,1}$, $n = 1$, $m_i = m_{he}$); второй E_2 — либо второй „тяжелой“ ($E_{he,2}$, $n = 2$, $m_i = m_{he}$), либо первой „легкой“ ($E_{le,1}$, $n = 1$, $m_i = m_{le}$) подзоне [6] (рис. 1).

Ток, пополняющий КЯ, складывается из термогенерационного тока j_d и туннельного тока зона—зона j_{bb} (рис. 1). Поведение тока j_{bb} определяется последовательным вовлечением уровней E_i ямы в перенос. В стационарном случае пополнение КЯ балансируется утечкой электронов j_{cm} в металл. Ток j_d мал и сам по себе ($\sim 10^{-10} \text{ А/см}^2$), и — в представляющих интерес режимах — по сравнению с другими компонентами.

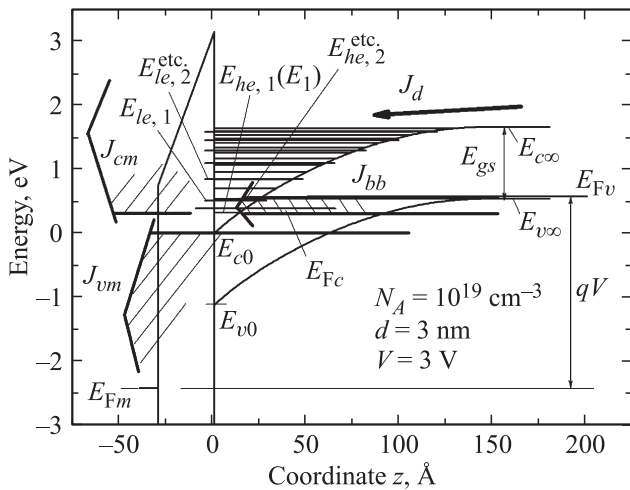


Рис. 1. Зонная диаграмма МДП-структуры Al/SiO₂/p⁺-Si(100). Режим соответствует ситуации, когда уровень E₁ вовлечен в РТ, а уровни E_{he2} и E_{le1} — „на грани“ вовлечения. Вследствие учета накопления заряда в КЯ за счет РТ энергия Ферми КЯ E_{Fc} лишь ненамного ниже, чем E_{Fv} (без накопления разность E_{Fv} - E_{Fc} была бы заметно больше).

Концентрации электронов N_i на уровнях E_i КЯ распределены в соответствии с функцией Ферми f_c(E, E_{Fc}). Эти концентрации и энергия Ферми E_{Fc} КЯ находятся из условия баланса суммарных токов прихода и ухода электронов:

$$j_{cm} = \frac{q}{\pi \hbar^2} \sum_{E_i} \frac{\xi_i m_{i\perp}}{\tau_{ar,i}} \int (f_c - f_m) T_{ox} dE$$

$$= \frac{q}{\pi \hbar^2} \sum_{E_i < q\phi_s - E_{gs}} \frac{\xi_i m_{i\perp}}{\tau_{ar,i}} \int (f_v - f_c) T_s dE + j_d$$

$$= j_{bb} + j_d, \tag{2}$$

$$N_i = \frac{\xi_i m_{i\perp} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \frac{E_{Fc} - E_i}{k_B T} \right]. \tag{3}$$

Здесь T_{ox|s} = T_{ox|s}(E, E_⊥) — вероятность туннелирования электрона с полной энергией E и „поперечной“ энергией E_⊥ = E - E_i через барьеры окисла (ox) или Si (s); f_{v|c|m}(E, E_{Fv|c|m}) — функции Ферми в объеме p⁺-Si (v), квантовой яме (c) и металле (m). Через τ_{ar,i} обозначено время прохода электроном КЯ туда и обратно, m_i, ξ_i — эффективная масса и вырождение для уровня E_i, t — температура (300 К), qφ_s — изгиб зон Si. Сумма концентраций ΣN_i дает полную двумерную плотность N_s электронов в яме.

Дополнительно на ток j_{cm} накладывается ток j_{vm} нерезонансного транспорта из v-зоны Si в металл с энергиями ниже КЯ (рис. 1): j = j_{cm} + j_{vm}.

Используются следующие параметры туннельных барьеров: диэлектрические проницаемости ε_s = 11.9 для Si, ε_{ox} = 3.9 (SiO₂), 25 (HfO₂), 80 (TiO₂); разрывы c-зоны на границе Si/окисел χ_e = 3.15 (SiO₂), 1.4 (HfO₂),

1.2 эВ (TiO₂) [7]. Эффективные массы электронов в Si(100) и вырождение: m_{he,z} = 0.916m₀, m_{he,⊥} = 0.19m₀, ξ_{he} = 2 и m_{le,z} = 0.19m₀, m_{le,⊥} = 0.417m₀, ξ_{le} = 4. Эффективная масса электрона в SiO₂ равна 0.42m₀ [5], в HfO₂ 0.15m₀ и в TiO₂ 0.5m₀ [8–10]. Вероятности T_s, T_{ox} находятся методом ВКБ [5]; корректный учет РТ при этом обеспечивается формулой (2).

3. Появление заряда в квантовой яме при резонансном туннелировании: наблюдение и условия

Для накопления заряда соотношение барьеров в МДП системе должно быть таким, чтобы „входной“ (полупроводниковый) барьер оказывался более проницаемым, чем „выходной“ (окисный). Математически это выражается неравенством T_s > T_{ox}; тогда для выравнивания „входного“ и „выходного“ токов КЯ необходим подъем квазиуровня Ферми E_{Fc} КЯ и его приближение к E_{Fv}. В противоположной ситуации [1] имело место соотношение T_s < T_{ox}, накопление отсутствовало, а E_{Fc} лежал намного ниже, чем E_{Fv}.

3.1. Экспериментальные факты

В эксперименте появление заряда в КЯ можно наблюдать, записывая прямой и обратный ход вольт-амперной характеристики (ВАХ) j(V) при запирающей полярности („+“ на Al). ВАХ должна иметь вид ступеней при напряжениях V₁, V₂, ..., каждая из которых отвечает вовлечению очередной подзоны с дном E₁ в РТ [1,2]. Прямой ход всегда выглядит именно так (рис. 2). Однако при достаточно быстрой записи (даже при ~ 1 В/мин) ВАХ структур с относительно толстым

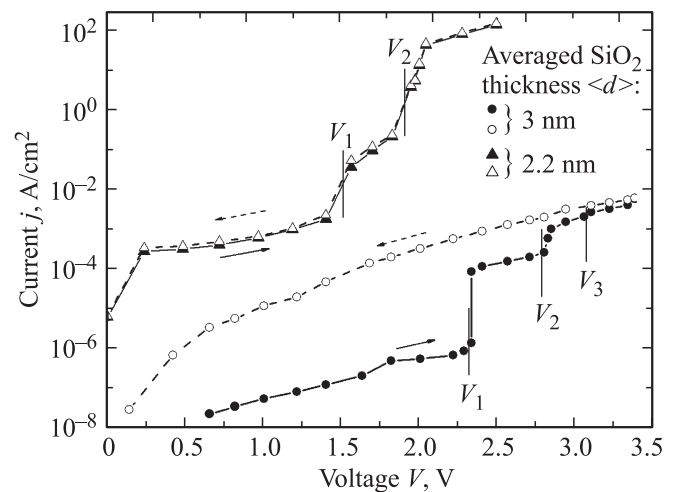


Рис. 2. Экспериментальные вольт-амперные характеристики МДП-структур Al/SiO₂/p⁺-Si(100) с N_A ~ 10¹⁹ см⁻³ (запирающая полярность). При достаточно большой толщине диэлектрика наблюдается гистерезис, обусловленный появлением заряда в КЯ за счет РТ.

(~ 3 нм и более) SiO_2 с заходом в диапазон напряжений выше порога активации V_1 уровня E_1 обратный ход не повторяет прямой (рис. 2). В то же время для образцов с тонким диэлектриком имеет место полное совпадение обратного и прямого хода. Это можно объяснить наличием в первом случае заряда электронов в КЯ, для рассасывания которого требуется конечное время. Слой окисла в исследованных образцах формировался термическим окислением в сухом кислороде. Похожая ВАХ с гистерезисом была измерена нами в [2] на образцах с электрохимическим окислом.

Неудивительно, что накопление типично для толстых структур, так как именно в них реализуется соотношение $T_s \gg T_{ox}$ для туннельных прозрачностей барьеров. Естественно, такой эксперимент лишь позволяет констатировать факт появления заряда в КЯ, не отвечая на вопрос о степени его влияния на распределение напряжения в структуре. Для прояснения этого вопроса необходим теоретический анализ.

3.2. Параметры структур с накоплением заряда

На рис. 3 показаны рассчитанные минимальные толщины окисла $d_{RT\text{ suppl}}$, при которых за счет РТ возможно пополнение КЯ — а именно в условиях активации РТ $V = V_1$ (или для изгиба зон в кремнии $\varphi_s = \varphi_{s1}$) соотношение прозрачностей станет $T_s(E_1, 0) > T_{ox}(E_1, 0)$. В расчете использована модель обеднения, принимаемая для режимов до активации. Однако при превышении толщиной d некоей границы d_{block} такая модель не вполне правомерна, так как накопление электронов в МДП структуре может быть вызвано термооток j_d без РТ. Зависимости $d_{block}(N_A)$ (критерий: в условиях $\varphi_s = \varphi_{s1}$ без учета РТ при $d = d_{block}$ заряд КЯ составляет 1% полного заряда в Si) тоже включены в рис. 3.

В итоге, появления заряда в КЯ за счет РТ следует ожидать в области $d_{RT\text{ suppl}} < d < d_{block}$. Обрыв кривых $d_{RT\text{ suppl}}(N_A)$ для SiO_2 , HfO_2 со стороны высоких N_A означает, что для слишком сильного легирования вероятность T_{ox} , зависящая в таком случае только от поля в окисле, превысит T_s при любых d , а обрыв $d_{block}(N_A)$ означает, что термооток ни при каких d не вызовет накопления.

Чтобы структура представляла интерес в контексте изучения заряда в КЯ при РТ, помимо выполнения условия $T_s > T_{ox}$ величина тока j_{bb1} v -зона–подзона I должна быть заметной, т.е. должна составлять хотя бы 10^{-9} – 10^{-6} А/см². На рис. 3, b приведены значения изгиба зон $q\varphi_{s1}$ в Si, отвечающего активации РТ, и значения этого изгиба $q\varphi_{s\text{ min}}$ (в модели обеднения) при токе $j_{bb1} = j_{bb1\text{ min}}$ в подзону I . Явное превышение $q\varphi_{s\text{ min}}$ над $q\varphi_{s1}$ указывает на слабость РТ в системе; такое превышение возникает при недостаточной концентрации акцепторов N_A . Однако, как видим, это ограничение не привносит чего-либо радикального: граница $N_{A\text{ min}}$ лежит близко к абсциссам точек пересечения кривых

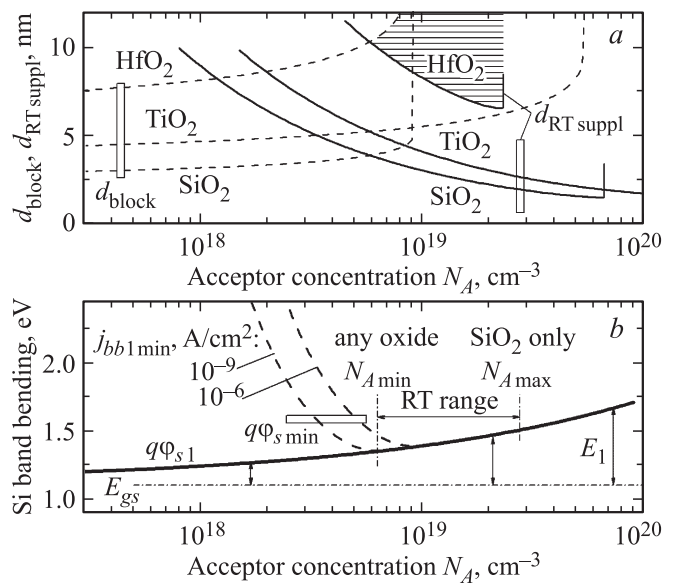


Рис. 3. a — рассчитанные для структур металл/окисел/Si(100) толщины диэлектрика $d_{RT\text{ suppl}}$, начиная с которых при активации РТ окисный барьер менее прозрачен, чем полупроводниковый, и толщины d_{block} , при которых ток термогенерации превышает возможности утечки через окисел; на примере HfO_2 помечена область изменения параметров, отвечающая РТ с накоплением заряда. b — изгиб зон $q\varphi_{s1}$ при активации РТ и величина этого изгиба $q\varphi_{s\text{ min}}$, необходимая для протекания указанного тока v -зона–яма.

$d_{RT\text{ suppl}}$ и d_{block} на рис. 3, a . С другой стороны, при слишком высокой концентрации N_A поле в окисле превысит поле пробоя; это определяет правую границу диапазона $N_{A\text{ min}} - N_{A\text{ max}}$. Ограничение через $N_{A\text{ max}}$ актуально для SiO_2 (помечено „RT range“) и, по-видимому, менее важно для HfO_2 или TiO_2 : поле пробоя F_{br} high- k -материалов, хотя и ниже, чем для SiO_2 (для SiO_2 $F_{br} \sim 10^7$, для HfO_2 $F_{br} \sim 5 \cdot 10^6$ [11], для $\text{TiO}_2 \sim 10^6$ В/см [12]), но в меньшее число раз, чем отношение диэлектрических проницаемостей.

Причина использования φ_{s1} , а не V_1 , при анализе состоит в том, что эта величина (или связанная с ней ширина области обеднения w_1) более универсальна, пока в КЯ МДП структуры мало носителей. Напряжение же V_1 опосредовано работой выхода металла, толщиной и проницаемостью диэлектрика. Пересчет несложен, учитывая, что $V_1 = V_{FB} + U_1 + \varphi_{s1}$, где $U_1 = qN_A w_1 d / \epsilon_0 \epsilon_s$, $\varphi_{s1} = qN_A \omega_1^2 / 2\epsilon_0 \epsilon_s$, а V_{FB} — напряжение плоских зон.

4. Влияние заряда на детали зонной диаграммы

4.1. Влияние в широком диапазоне напряжений

Появление электронов в КЯ может изменить целый ряд параметров по сравнению с результатами модели обеднения, применявшейся нами ранее [1] для случая

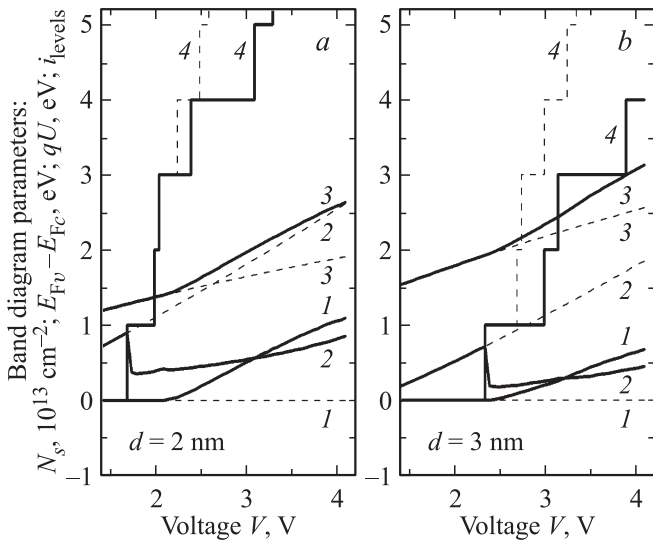


Рис. 4. Рассчитанные детали зонной диаграммы МДП структуры Al/SiO₂/p⁺-Si(100) с $N_A \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ для толщин окисла $d = 2$ (a) и 3 нм (b) при различных напряжениях. Сплошные линии — с учетом влияния РТ на заряд электронов в КЯ, штриховые — в предположении, что пополнение ямы происходит только за счет термогенерации в объеме Si. 1 — N_s , 2 — $E_{Fv} - E_{Fc}$, 3 — qU , 4 — i_{levels} .

тонкого окисного барьера. К этим параметрам относятся сама концентрация заряда N_s (см⁻²), положение квазиуровня Ферми в яме, E_{Fc} , по отношению к уровням Ферми толщи Si и металла, E_{Fv} , E_{Fm} , а также детали зонной диаграммы: распределение приложенного напряжения $V = q^{-1}(E_{Fv} - E_{Fm})$ между окислом, U , и подложкой, ϕ_s . Вследствие таких изменений сдвигаются напряжения активации V_i уровней E_i начиная со второго.

На рис. 4 представлены рассчитанные зависимости N_s , U , $E_{Fv} - E_{Fc}$ и числа вовлеченных в РТ уровней i_{levels} от смещения V для двух толщин диоксида кремния, причем показаны кривые, полученные с учетом и без учета пополнения КЯ за счет РТ. Отсутствие учета накопления означает, что в КЯ „попадает“ лишь очень малое количество носителей, дрейфующих по c -зоне кремния; такой процесс не обеспечивает заметной концентрации электронов при выбранных d , но все-таки приводит к некоторому подъему E_{Fc} .

Мы видим, что заряд КЯ может достигать довольно заметных значений ($> 10^{12} \text{ см}^{-2}$) и оказывать существенное влияние на многие элементы зонной диаграммы. Относительное влияние этого заряда нарастает по мере роста приложенного к структуре напряжения V . Резкое приближение E_{Fc} к E_{Fv} , отражающееся скачком разности $E_{Fv} - E_{Fc}$ вниз, происходит уже непосредственно в момент активации.

4.2. Влияние в режимах, близких к активации резонансного туннелирования

Особый интерес представляют режимы, близкие к $V = V_1$, в которых явления РТ должны проявляться

наиболее ярко. Чтобы оценить масштаб влияния заряда КЯ в таких режимах, следует учесть, что наибольшая концентрация заряда N_s , поддерживаемого РТ из v -зоны при заданном напряжении V , может быть достигнута при $E_{Fc} \rightarrow E_{Fv}$, т. е. в „пределе“ квазиравновесия в подложке. Если найти величины электрического поля в окисле F_{equil} при $V = V_1$ в равновесной МДП структуре и поля F_{depl} при том же напряжении в модели обеднения, то отношение $(F_{\text{equil}} - F_{\text{depl}})/F_{\text{depl}}$ даст верхнюю оценку меры влияния заряда КЯ в структуре с данным диэлектрическим материалом данной толщины d . Наибольшим это отношение будет для самых высоких значений ϵ_{ox} диэлектрика.

Из данных рис. 5 можно заключить, что в обсуждаемом диапазоне напряжений влияние накопления заряда в КЯ на зонную диаграмму незначительно. Оно радикально возрастает при снижении концентрации легирующей примеси N_A , но при этом сам процесс РТ крайне слаб. В реальных же ситуациях с легированием $N_A \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ относительная роль заряда КЯ не превышает 10%, а часто даже единиц процентов. Получается, что практически единственным ощутимым следствием наличия заряда qN_s становится резкий подъем квазиуровня Ферми E_{Fc} в КЯ (и соответственно спад $E_{Fv} - E_{Fc}$, рис. 4). Поэтому, если для каких-либо задач интересен только диапазон вблизи момента активации V_1 , то при вычислении профиля зон можно пользоваться моделью обеднения, а заряд ямы qN_s и E_{Fc} находить при уже имеющейся зонной диаграмме. При расчетах это дает упрощение, поскольку удастся избежать дополнительной итерации.

На вставке к рис. 5 показаны токи, вычисленные для МДП структуры с учетом и без учета эффекта

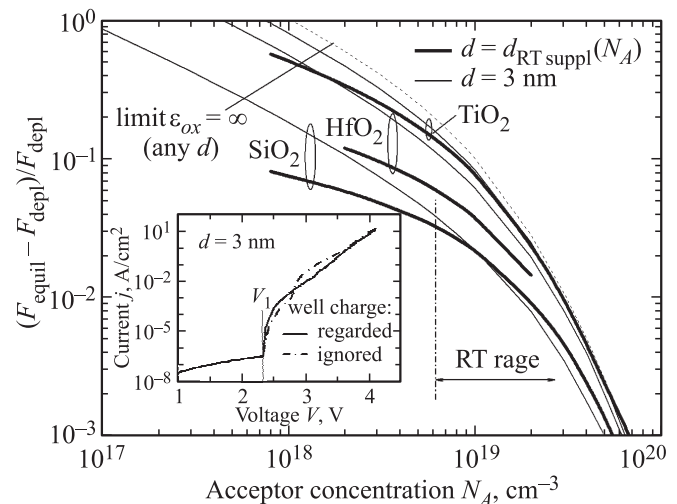


Рис. 5. Оценка максимально возможного влияния заряда КЯ на распределение напряжения в структуре металл/окисел/Si(100) с $N_A \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$: сравнение величин электрического поля в окисле при переходе от режима обеднения к равновесию МДП структуры при $V = V_1$. Правая граница реального диапазона РТ (RT range) определяется материалом диэлектрика. На вставке: рассчитанные вольт-амперные кривые с учетом и без учета заряда ямы.

пополнения заряда КЯ при РТ. Так же, как и в отношении электрического поля, можно констатировать, что около $V = V_1$ учет заряда КЯ не принципиален; его роль становится заметнее при $V \sim 3$ В (т.е. уже в области, удаленной от момента активации первой подзоны).

5. Заключение

Проведенное исследование показало, что резонансное туннелирование электронов в МДП структурах может приводить к появлению заметного, $\sim q \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и более, заряда в приповерхностной квантовой яме. Условиями для возникновения этого заряда являются: а) превышение туннельной прозрачности полупроводникового барьера над прозрачностью окисного; б) слабость термической генерации электронов; в) наличие достаточного по абсолютной величине тока из валентной зоны в яму; г) значения поля в диэлектрике ниже пробойных. В работе приведены конкретные границы диапазона по легированию и толщине диэлектрической пленки (SiO_2 , HfO_2 , TiO_2), в котором следует ожидать накопления заряда. Имеющиеся экспериментальные данные подтверждают, что зарядовые явления типичны для структур со сравнительно толстыми пленками окисла. Накопленный заряд может влиять на вид зонной диаграммы МДП структуры. Однако вносимые этим зарядом искажения проявляются в режимах, далеких от напряжения V_1 активации первого резонансного уровня. При смещениях же, немного превышающих V_1 (а это наиболее интересная область), распределение напряжения можно рассчитывать в модели обеднения, а затем определять заряд ямы и положение ее квазиуровня Ферми.

Список литературы

- [1] Г.Г. Карева, М.И. Векслер. ФТП, **47** (8), 1087 (2013).
- [2] М.И. Векслер, Г.Г. Карева, Ю.Ю. Илларионов, И.В. Грехов. Письма ЖТФ, **42** (21), 62 (2016).
- [3] B. Eitan, P. Pavan, I. Bloom, A. Efraim, A. Frommer, D. Finzi. IEEE Electron Dev. Lett., EDL-22, (11), 543 (2000).
- [4] A. Schenk. *Advanced physical models for silicon device simulations* (Springer, Wien, N.Y., 1998) ch. 5.
- [5] 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).
- [6] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985) гл. 3.
- [7] J. Robertson, R.W. Wallace. Mat. Sci. Eng. Res., **88**, 1 (2015).
- [8] S. Monaghan, P.K. Hurley, K. Cherkaoui, M.A. Negara, A. Schenk. Solid-State Electron., **53** (4), 438 (2009).
- [9] B. Govoreanu, P. Blomme, K. Henson, J. van Houdt, K. de Meyer. Proc. SISPAD (Boston, USA, 2003) p. 287.
- [10] Y. Rawal, S. Ganguly, M.S. Baghini. Act. Passive Electron. Compon., Art. ID 694105 (2012).
- [11] L. Kang, B.H. Lee, W.-J. Qi, Y. Jeon, R. Nieh, S. Gopalan, K. Onishi, J.C. Lee. IEEE Electron Dev. Lett., **EDL-21** (4), 181 (2000).
- [12] L. Zhou, R.C. Hoffmann, Z. Zhao, J. Bill, F. Aldinger. Thin Solid Films, **516** (21), 7661 (2008).

Редактор Л.В. Шаронова

A quantum well charge and voltage partitioning within a metal–insulator–semiconductor structure operating under electron resonant tunneling condition

M.I. Vexler¹, Yu.Yu. Illarionov^{1,2}, I.V. Grekhov¹

¹ Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

² Technische Universität Wien,
Institut für Mikroelektronik, Gußhausstr. 29,
A-1040 Vienna, Austria

Abstract We performed a theoretical study of the prerequisites for electron storage in the quantum well of a metal–oxide– p^+ -silicon resonant-tunneling structure and the effect of a stored charge on voltage partitioning. The systems with SiO_2 , HfO_2 and TiO_2 dielectrics are considered. We demonstrate that a charge appearance in the well under resonant tunneling conditions can be expected for the structures with acceptor concentration in the substrates from $(5-6) \cdot 10^{18}$ to $(2-3) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. At the same time, we show that the range of relevant oxide thickness is dependent on this concentration. For example, for the $\text{SiO}_2/p^+\text{-Si}(10^{19} \text{ cm}^{-3})$ structures, the thickness should exceed ~ 3 nm. The sheet electron density in the well can achieve the values of $\sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and more. However the effect of this charge on electrostatics of the structure only becomes noticeable under relatively high bias voltages which are far above the activation voltage for a resonant transport via the first sub-band.