Модель пробоя МОП-структур по механизму анодного освобождения водорода

© О.В. Александров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ", 197376 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Aleksandr_ov@mail.ru

Поступила в Редакцию 24 сентября 2023 г. В окончательной редакции 9 октября 2023 г. Принята к публикации 21 декабря 2023 г.

Предложена количественная модель пробоя МОП-структур с относительно толстым (10-100 нм) подзатворным диэлектриком по механизму анодного освобождения водорода с межфазной границы Si-SiO₂. Время задержки пробоя определяется дисперсионным транспортом и накоплением ионов водорода в подзатворном диэлектрике. Показано, что при высокой концентрации водорода в МОП-структурах и напряженности электрического поля менее ~ 10 MB/см модель удовлетворительно описывает времена задержки пробоя, значительно меньшие, чем ожидаемые по 1/E модели. При б'ольших напряженностях поля пробой описывается моделью анодной дырочной инжекции.

Ключевые слова: МОП-структура, пробой, анодное освобождение водорода, анодная дырочная инжекция.

DOI: 10.61011/FTP.2023.09.56995.5583

1. Введение

В современных МОП интегральных схемах (МОП ИС) высокое быстродействие достигается путем уменьшения толщин диэлектрика до 1-4 нм и использования диэлектриков с высокой диэлектрической проницаемостью (high-k) с подслоем диоксида кремния [1,2]. При этом наблюдается увеличение туннельных токов утечки (stress-induced leakage current (SILC)), уменьшается рабочее напряжение и помехозащищенность МОП ИС [3]. Вследствие процессов деградации двуслойного диэлектрика и электромиграции металлизации может происходить уменьшение надежности и времени наработки на отказ [4,5]. В связи с этими обстоятельствами МОП ИС с более толстым (10-100 нм) традиционным диэлектриком — диоксидом кремния — по-прежнему находят широкое применение как в гражданской, так и в военной технике [6]. Время наработки на отказ для таких МОП-структур определяется временем задержки пробоя подзатворного диэлектрика [3].

В литературе [2,3,7–9] рассматривается несколько механизмов пробоя МОП-структур: ударная ионизация, анодная дырочная инжекция (АДИ), термохимическая модель и анодное освобождения водорода. Считается, что ударная ионизация имеет место при полях высокой напряженности (E > 8-10 MB/см) в достаточно толстых слоях диоксида кремния ($d \ge 20$ нм). Анодная дырочная инжекция, лежащая в основе 1/E модели, является причиной пробоя при наличии дырочных ловушек вблизи катода при полях E > 6-8 MB/см. Термохимическая E-модель дает более хорошее, чем 1/E АДИ модель, описание времени ожидания пробоя при низких напряженностях поля. Однако термохимическая модель не позволяет объяснить зависимость времени ожидания пробоя от толщины подзатворного диэлектри-

ка, а также относительное постоянство инжектированного заряда пробоя от напряженности поля.

Качественная модель освобождения водорода с анодной межфазной границы (МФГ) Si-SiO₂ была предложена в работе [10]. Согласно этой модели, электроны, инжектируемые катодом, в электрическом поле диэлектрика приобретают энергию, достаточную для освобождения ионов водорода с пограничных ловушек и образования поверхностных состояний:

$$P_b \mathbf{H} + e^- \xrightarrow{ks} P_b + \mathbf{H}^+, \tag{1}$$

где P_b Н и P_b — пассивированные и непассивированные P_b -центры на МФГ Si-SiO₂, k_S — константа скорости реакции. Освобожденные ионы водорода H⁺ мигрируют к катоду, где образуют дефекты, влияющие на пробой МОП-структур.

В МОП-структурах, изготовленных по обычной планарной технологии, может содержаться значительное количество водорода до $10^{14} - 10^{15} \,\mathrm{cm}^{-2}$, который сосредоточен преимущественно на межфазных границах SiO₂-Si (подложка) и SiO₂-затвор [11]. При реализации в МОП-структуре лавинной инжекции электронов из кремниевой подложки водород перемещается к катоду, где накапливается на границе SiO₂-затвор в тонком слое шириной порядка монослоя [11]. Введение водорода путем отжига в водородосодержащей среде или из защитного слоя приводит к уменьшению времени задержки пробоя МОП-структур [12,13]. Освобождение водорода с МФГ Si-SiO2 и связанная с этим генерация поверхностных состояний происходят при энергии электронов > $2 \Im B$ [14], что соответствует напряженности поля > 3-4 MB/см. Механизм освобождения водорода объясняется неупругим взаимодействием электронов с локальными модами Si-H-связей на поверхности кремниевого анода [8]. Таким образом, при наличии водорода в МОП-структуре причиной пробоя при относительно невысоких полях (E > 3-4 MB/см) может являться механизм анодного освобождения водорода.

В тонких слоях диэлектрика (d < 10 нм) дефекты, вызванные освобожденным водородом, выстраиваются случайным образом по толщине диэлектрика, образуя токопроводящие пути и утечки SILC, вызывая так называемый мягкий пробой. Считается, что такой пробой происходит при достижении критической плотности дефектов (перколяционная модель [2,8]).

В более толстых (d = 10-100 нм) слоях диэлектрика происходит так называемый жесткий пробой. При наличии дырочных ловушек вблизи катода такой пробой может быть описан количественной моделью АДИ [15]. Однако модель АДИ не учитывает наличие водорода в МОП-структурах и его анодное освобождение.

Цель настоящей работы — разработка количественной модели пробоя МОП-структур с относительно толстым подзатворным диэлектриком по механизму анодного освобождения водорода с учетом дисперсионного характера транспорта ионов водорода.

2. Описание модели

При подаче отрицательного смещения на затвор МОП-структуры с относительно толстым (d = 10-100 нм) диэлектриком происходит инжекция электронов по туннельному механизму Фаулера– Нордгейма:

$$I_n = AE_c^2 \exp(-B/E_c), \qquad (2)$$

где I_n — поток электронов, E_c — напряженность электрического поля вблизи затвора (катода), A и B — постоянные, определяемые эффективной массой электрона в диоксиде кремния m_{ox} и высотой потенциального барьера SiO₂-затвор ϕ ($m_{ox} = 0.5m_e$, $\phi = 3.2$ эВ для n^+ -поликристаллического кремниевого (ПК) затвора). Электроны, инжектируемые катодом, в электрическом поле диэлектрика приобретают энергию, достаточную для разрыва слабой водородной связи в P_b H-центрах на МФГ Si-SiO₂ и освобождения ионов водорода по реакции (1). Скорость освобождения водорода будет в этом случае определяться скоростью депассивации P_b H-центров:

$$\frac{\partial Q_{\rm H}^+}{\partial t} = \frac{\partial Q_{P_b}}{\partial t} = k_s Q_{P_b {\rm H}} n, \qquad (3)$$

где t — время, $Q_{\rm H}^+$ — количество освобожденных ионов водорода, $Q_{P_b{\rm H}}$ и Q_{P_b} — плотности пассивированных и непассивированных P_b -центров соответственно, n концентрация электронов на МФГ Si-SiO₂. Освободившиеся в реакции (1) ионы водорода перемещаются по дисперсионному механизму к катоду, где накапливаются на МФГ SiO₂-Si_{*pc*} (ПК затвор). Дисперсионный транспорт ионов водорода описываем с помощью модели многократного захвата на локализованные состояния S_i [16]:

$$\mathbf{H}^{+} + S_{i} \stackrel{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\overset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\overset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}}{\underset{k_{2}s_{i}}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{2}s_{i}}{\underset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{1}s_{i}}{\underset{k_{1}s$$

Уравнения переноса ионов водорода вместе с уравнением Пуассона принимают вид:

$$\frac{\partial C_{\rm H}^+}{\partial t} = D_{\rm H}^+ \frac{\partial^2 C_{\rm H}^+}{\partial x^2} - \mu_{\rm H}^+ E \frac{\partial C_{\rm H}^+}{\partial x}$$
$$- C_{\rm H}^+ \sum_{i=1}^k k_{1si} C_{SHi}^0 + \sum_{i=1}^k k_{2si} C_{SHi}^+, \qquad (5)$$

$$\frac{\partial C_{SHi}^+}{\partial t} = -\frac{\partial C_{SHi}^0}{\partial t} = k_{1si}C_{SHi}^0 - k_{2si}C_{Pi}^+, \quad i = 1, 2\cdots k,$$
(6)

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(p - n + C_{\rm H}^+ + \sum_{i=1}^{\kappa} C_{SHi}^+ \right),\tag{7}$$

где x — координата, отсчитываемая от МФГ с кремниевой подложкой (x = 0 на МФГ с подложкой, x = d на МФГ с затвором, d — толщина диэлектрика); p — концентрация дырок, $C_{\rm H}^+$ — концентрация свободных ионов водорода; C_{Si}^0 и C_{SHi}^+ — концентрации *i*-тых пустых и заполненных водородных состояний соответственно; $D_{\rm H}^+$ и $\mu_{\rm H}^+$ — коэффициент диффузии и подвижность свободных ионов водорода соответственно ($D_{\rm H}^+ = 1 \cdot \exp(-0.73/(k_{\rm B}T) \, {\rm cm}^2/{\rm c}, \, \mu_{\rm H}^+ = D_{\rm H}^+/(k_{\rm B}T)); V$ — потенциал, E — напряженность электрического поля, E = -dV/dx, q — заряд электрона; ε — относительная диэлектрическая проницаемость оксида кремния ($\varepsilon = 3.9$), ε_0 — электрическая постоянная.

Распределение плотности локализованных состояний для ионов водорода имеет экспоненциальный вид по энергии, характерный для аморфных материалов:

$$C_{Si}^{0}(E_{Si}) = N_{S}^{0} \exp\left(-\frac{E_{Si}}{E_{SS}}\right), \quad i = 1, 2, \cdots k, \quad (8)$$

где N_S^0 — полная концентрация пустых и заполненных водородных локализованных состояний,

$$N_{S}^{0} = C_{SH}^{0} + C_{SH}^{+}, \quad C_{SH}^{0} = \sum_{i=1}^{k} C_{SHi}^{0}, \quad C_{SH}^{+} = \sum_{i=1}^{k} C_{SHi}^{+}$$

 E_{Si} — энергия уровня *i*-го локализованного состояния; E_{SS} — характеристическая энергия, связанная с дисперсионным параметром α_S соотношением $\alpha_S = k_{\rm B}T/E_{SS}$.

В начальный момент времени концентрация ионов водорода и их заполненных локализованных состояний нулевая:

$$C_{H}^{+}(x,0) = 0, \quad C_{SHi}^{+}(x,0) = 0, \quad i = 1, 2...k.$$
 (9)

785

Граничное условие для электронов при x = 0 определяется скоростью их стока на МФГ Si-SiO₂ в соответствии с (3):

$$j_n = \frac{\partial Q_{P_b}}{\partial t},\tag{10}$$

где j_n — поток электронов, $j_n = -D_n \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n n E$.

Свободные ионы водорода стекают на МФГ SiO₂-Si_{*pc*} (затвор), поэтому при x = d полагаем для них поглощающую границу:

$$C_{\rm H}^+(d,t) = 0. \tag{11}$$

К затвору при x = d приложено напряжение V_G :

$$V(0, t) = 0, \quad V(d, t) = V_G.$$
 (12)

При расчете использовались следующие параметры. Константа скорости реакции (1), $k_S = \sigma_n V_{th}$, где σ_n сечение захвата электронов на P_b H-центры, V_{th} — тепловая скорость электронов ($V_{th} = 10^7$ см/с). Учитывалась зависимость сечения захвата электронов от напряженности поля [17]:

$$\sigma_n(E) = \sigma_{n0}(1 + 8.7 \cdot 10^{-17} E^{2.865})^{-1}$$
 при $E > 7 \cdot 10^5$ В/см, (13)

где σ_{n0} — сечение захвата электронов в слабых полях ($\sigma_{n0} = 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$ [17]). Значения остальных параметров для дисперсионного транспорта ионов водорода в SiO₂ брались из определенных ранее в [18]: $N_S^0 = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $E_{S1} = 0.65$ эВ, $E_{Sk} = 0.98$ эВ, $E_{SS} = 0.07$ эВ. Варьируемым параметром модели является начальная плотность пассивированных P_b Н-центров на аноде Q_{P_b} н.

3. Расчет по модели

Система уравнений (5)-(7) с начальными условиями (8) и (9), граничными условиями (10)-(12) с учетом (13) решалась численно по неявной разностной схеме.

На рис. 1 показано распределение по глубине концентрации свободных ионов водорода (кривые 1-3) и ионов водорода на локализованных состояниях (кривые 1'-3') при разных пробивных напряжениях на затворе. Как видно из рисунка, концентрации свободных ионов водорода и ионов водорода на локализованных состояниях спадают от анода (при x = 0) к катоду (при x = d). При дисперсионном механизме переноса концентрация водорода на локализованных состояниях превышает концентрацию свободных ионов водорода.

Объемный заряд, создаваемый свободными и локализованными ионами водорода, влияет на распределение напряженности электрического поля (рис. 2, кривые 1-3), приводя к отклонению от начального однородного поля $E_0 = V_G/d$ (рис. 2, кривые 1'-3'). Причем напряженность поля уменьшается вблизи анода и увеличивается к катоду. Увеличение напряженности поля у катода приводит к увеличению тока туннельной инжекции электронов из катода. Это вызывает



Рис. 1. Распределение по глубине концентрации свободных ионов водорода (1-3) и ионов водорода на локализованных состояниях (1'-3'). Напряжение пробоя, В: 1, 1' - 66.0; 2, 2' - 58.3; 3, 3' - 52.4. Время задержки пробоя, с: 1, 1' - 1; 2, 2' - 10; 3, 3' - 100. $(Q_{P_bH} = 8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2})$.



Рис. 2. Распределение по глубине напряженности электрического поля (1-3) и начального поля (1'-3'). Напряжение пробоя, В: 1, 1' — 66.0; 2, 2' — 58.3; 3, 3' — 52.4. Время задержки пробоя, с: 1, 1' — 1; 2, 2' — 10; 3, 3' — 100. $(Q_{P_bH} = 8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2})$.

увеличение скорости освобождения ионов водорода с анода, что в свою очередь увеличивает концентрацию ионов водорода и напряженность поля вблизи катода. Такая положительная обратная связь приводит к резкому увеличению тока и жесткому пробою МОП-структуры. Время задержки пробоя определяется временем накопления ионов водорода у анода МОП-структуры и его дисперсионным транспортом к катоду.

Расчеты по модели сравнивались с экспериментальной зависимостью времени задержки пробоя t_{BD} от напряженности электрического поля из работы [19] (значки 1 на рис. 3). В исследуемых в [19] МОП-структурах под-



Рис. 3. Зависимость времени задержки пробоя от напряженности поля: I — эксперимент [19], 2 — расчет по настоящей модели при Q_{P_bH} , см⁻²: 2 — $8 \cdot 10^{14}$, 2 — $1 \cdot 10^{14}$; 3 — расчет по модели АДИ [10] при $Q_T^0 = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻². (d = 60 нм, T = 300 K).

затворным диэлектриком являлся диоксид кремния толщиной d = 60 нм, полученный термическим окислением кремния в сухом кислороде при температуре 1050°С. Расчетные зависимости показаны на рис. З линиями (кривые 2, 2' и 3). В качестве критерия пробоя выбрано 10-кратное увеличение тока инжекции. Как видно из рисунка, зависимость, рассчитанная по механизму анодного освобождения водорода при плотности P_b H-центров $Q_{P_bH} = 8 \cdot 10^{14}$ см⁻² (кривая 2), удовлетворительно описывает экспериментальные данные при напряженности электрического поля E менее ~ 10 MB/см и временах задержки пробоя t_{BD} более ~ 10 с. При меньшей плотности P_b H-центров $Q_{P_bH} = 1 \cdot 10^{14}$ см⁻² (кривая 2') времена задержки пробоя возрастают.

При бо́льшей напряженности электрического поля выше ~ 10 MB/см и и временах задержки пробоя меньших ~ 10 с экспериментальная зависимость идет более круто. Этот более крутой участок описывается разработанной нами ранее количественной 1/E моделью пробоя по механизму АДИ [15] при экспоненциальном распределении дырочных ловушек вблизи катода с интегральной концентрацией $Q_T^0 = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻² (кривая 3). Таким образом, при высокой концентрации водорода в МОПструктуре времена задержки пробоя при E < 10 MB/см значительно меньше ожидаемых по 1/E АДИ модели.

Отметим, что в описанном механизме анодного освобождения водорода объемный заряд создается свободными и локализованными ионами водорода. В нем не требуется наличия дырочных ловушек вблизи катода, как в механизме АДИ. В МОП-структурах с поликремниевым затвором имеет место некоторая симметричность относительно наличия P_b H-центров на обеих МФГ SiO₂-Si (подложка) и SiO₂-Si_{pc} (затвор). Поэтому можно ожидать слабого влияния полярности и наличия ловушек на напряжение пробоя. Такое отсутствие зависимости напряжения пробоя МОП-структур от полярности напряжения затвора, а также от величины и знака заряда, захваченного на дырочные и электронные ловушки после ионизирующего облучения, наблюдалось в работе [20], что свидетельствует в пользу пробоя МОП-структур по механизму анодного освобождения водорода.

4. Заключение

Предложена количественная модель пробоя МОПструктур с относительно толстым (10-100 нм) подзатворным диэлектриком по механизму анодного освобождения водорода с МФГ Si-SiO₂, в которой время задержки пробоя определяется накоплением ионов водорода у анода и его дисперсионным транспортом к катоду. Показано, что при высокой концентрации водорода в МОП-структурах и полях менее ~ 10 MB/см модель анодного освобождения водорода удовлетворительно описывает экспериментальные времена задержки пробоя, значительно меньшие, чем ожидаемые по 1/Eмодели. При бо́льших напряженностях поля времена задержки пробоя удовлетворительно описываются 1/Eмоделью анодной дырочной инжекции.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- High-k Gate Dielectric Materials Applications with Advanced Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistors (MOSFETs), ed. by N.P. Maity, R. Maity, S. Baishya (Apple Academic Press, 2022).
- [2] Г.Я. Красников. Конструктивно-технологические особенности суб-микронных МОП-транзисторов (М., Техносфера, 2004) ч. 2, гл. 7.
- [3] A.W. Strong, E.Y. Wu, R.-P. Vollertsen, J. Sune, G. La Rosa, S.E. Rauch, T.D. Sullivan. *Reliability wearout mechanism in advanced CMOS technologies* (IEEE Press, Wiley, 2009) chap. 3.
- [4] A. Kumar. Int. J. Com. Dig. Sys., 12 (1), 21 (2022).
- [5] А.С. Сивченко, Е.В. Кузнецов, А.Н. Сауров. Изв. вузов. Электроника, 24 (5), 469 (2019).
- [6] Е.С. Горнев. Электрон. техн., сер. 3. Микроэлектроника, № 3 (179), 52 (2020).
- [7] J.W. McPherson. Microelectron. Reliab., **52** (9-10), 1753 (2012).
- [8] E.Y. Wu, J. Sune. J. Appl. Phys., 114, 014103 (2013).
- [9] Г.Я. Красников, Е.С. Горнев, П.В. Игнатов, Д.С. Мизгинов. Электрон. техн., сер. 3. Микроэлектроника, № 2 (170), 5 (2018).
- [10] D.J. DiMaria, J.W. Stasiak. J. Appl. Phys., 65 (6), 2342 (1989).
- [11] R. Gale, F.J. Feigl, C.W. Magee, D.R. Young. J. Appl. Phys., 54 (12), 6938 (1983).

- [12] Y. Nissan-Cohen, T. Gorczyca. IEEE Electron Dev. Lett., 9 (6), 287 (1988).
- [13] C. Gelatos, H.-H. Tseng, S. Filipiak, D. Sieloff, J. Grant, P. Tobin, R. Cotton. Int. Symp. VLSI Technol. (1997) c. 188.
- [14] L. Zhong, F. Shimura. J. Appl. Phys., 79 (5), 2509 (1996).
- [15] О.В. Александров. ФТП, **51** (8), 1105 (2017).
- [16] B. Hartenstein, A. Jakobs, K.W. Kehr. Phys. Rev. B, 54 (12), 8574 (1996).
- [17] H.E. Boesch, F.B. McLean, J.M. Benedetto, J.M. McGarrity. IEEE Trans. Nucl. Sci., 33 (6), 1191 (1986).
- [18] О.В. Александров. ФТП, 54 (10), 1029 (2020).
- [19] Т.В. Шмидт, В.А. Гуртов, В.А. Лалэко. Микроэлектроника, 17 (3), 244 (1988).
- [20] О.В. Александров, Н.С. Тяпкин, С.А. Мокрушина, В.Н. Фомин. ФТП, **56** (2), 250 (2022).

Редактор Г.А. Оганесян

Model of breakdown of MOS-structures by the mechanism of anode hydrogen release

O.V. Aleksandrov

St. Petersburg State Electrotechnical University "LETI", 197376 St. Petersburg, Russia

Abstract A quantitative model of the breakdown of MOSstructures with relatively thick (10–100 nm) gate dielectric by the mechanism of anode hydrogen release with interphase boundary Si-SiO₂ is proposed. The breakdown delay time is determined by dispersion transport and accumulation of hydrogen ions in the gate dielectric. It is shown that at a high concentration of hydrogen in MOS structures and electric field strength of less than ~ 10 MV/cm, the model satisfactorily describes breakdown delay times significantly shorter than those expected from the 1/*E* model. At higher field strengths, the breakdown is described by the anode hole injection model.