

Восстановление профиля потенциала в изолирующем слое по вольт-амперным характеристикам туннельных МДП диодов

© Е.И. Гольдман[¶], А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, М.В. Черняев⁺

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
141120 Фрязино, Россия

⁺ ОАО „НИИМЭ и Микрон“,
124460 Зеленоград, Россия

(Получена 5 марта 2007 г. Принята к печати 27 марта 2007 г.)

Развит метод восстановления профиля потенциала в изолирующем слое по полевым зависимостям туннельного тока сквозь него. Из туннельных вольт-амперных характеристик в квазиклассическом приближении определяются значения координат точек поворота как функций напряжения на диэлектрическом промежутке, и по этим зависимостям параметрически строится потенциал. Развитый алгоритм использован в отношении структуры $n^+-Si-SiO_2-n-Si$ с толщиной окисла 37 \AA . Для реального потенциального рельефа в SiO_2 характерны относительно толстые слои ($\sim 10 \text{ \AA}$) с пониженным значением потенциала, отделяющие Si от собственно барьера, ограничивающего туннелирование электронов.

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Qv, 73.40.Rw, 85.30.Mn

1. Введение

Туннельные токи сквозь слой изолятора — характерная особенность современных наномасштабных структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП). В связи с этим интенсифицировались исследования туннелирования электронов сквозь тонкие (5 нм и менее) слои SiO_2 . Величина туннельного тока определяется потенциальным барьером, обусловленным разрывом разрешенных зон на границе раздела (ГР) $Si-SiO_2$. На профиль потенциала в барьерном слое влияют силы изображения, переходные слои на ГР и встроенные в изолятор заряды. При этом, если для толстых окислов (десятки нм и более) отличие формы реального туннельного барьера от прямоугольной (трапециoidalной во внешнем поле), как правило, не существенно,¹ то для тонких такое отличие носит принципиальный характер и требует учета при расчете вольт-амперной характеристики (ВАХ) [2]. Однако соответствующие расчеты сопряжены с рядом проблем, связанных с отсутствием надежных данных о реальном профиле потенциала в изоляторе, а также о значении эффективной массы туннелирующих электронов m . Заметим, что теоретическое обоснование введения параметра — эффективной массы электрона в запрещенной зоне SiO_2 — отсутствует. Поэтому под этим термином мы будем понимать некий коэффициент, значение которого вытекает из экспериментальных данных. Последние в случае толстых окислов хорошо описываются законом Фаулера–Нордгейма при $m = 0.5m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) [3]. И разрыв зон на ГР $Si-SiO_2$, и эффективная масса для окислов с толщиной $h < 5 \text{ нм}$, по-видимому, являются

функциями h [4–6]. Теоретический анализ формы потенциала в окисле затруднителен, поскольку применимость выражений для сил изображения в массивных средах к наномасштабным объектам не вполне ясна,² данные о распределении фиксированного заряда в тонких слоях SiO_2 и о вкладе переходных слоев на ГР $Si-SiO_2$ в потенциальный рельеф практически отсутствуют. Поэтому принципиальное значение имеет определение реального профиля туннельного барьера из экспериментальных ВАХ сквозных токов через изолирующий слой МДП структуры. Развитие такого метода дает и новый инструмент для изучения физики образования встроенного заряда в туннельно-тонком окисле. Этим вопросам и посвящена данная работа.

2. Метод восстановления профиля потенциала по полевым зависимостям прозрачности туннельного барьера

Рассмотрим туннельный МДП диод со структурой $n-Si-SiO_2-n^+-Si$. На рис. 1 представлена схема потенциального рельефа в слое SiO_2 и в окрестностях его ГР с $n-Si$ и с n^+-Si . Туннельный ток из $n-Si$ в n^+-Si (затвор) имеет две составляющие [7]: эмиссию электронов из области непрерывного спектра, т.е. с энергиями выше дна зоны проводимости в электронейтральном объеме $n-Si$ (плотность тока j_{3d}), и электронные переходы с уровней размерного квантования в приповерхностном слое обогащения (плотность тока j_{2d}). Выражения для величин j_{2d} и j_{3d} в квазиклассическом приближении

[¶] E-mail: gvc@ms.ire.rssi.ru

¹ Исследования процессов образования заряда, встроенного в окисел кремния при его повреждении под токовой нагрузкой, показали, что они сконцентрированы на длинах $\sim 1 \text{ нм}$ у ГР $Si-SiO_2$ [1].

² Эти выражения получаются усреднением строгих уравнений Максвелла на масштабах, много больших межатомных расстояний в среде.

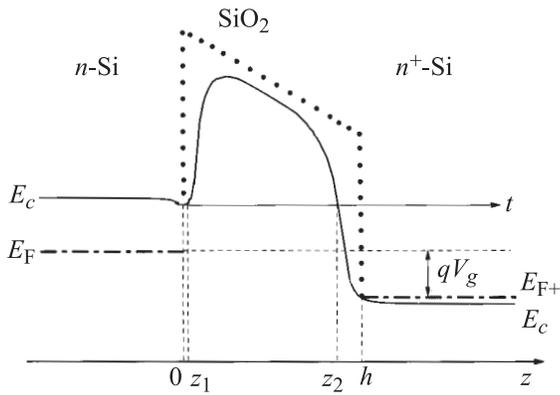


Рис. 1. Потенциальный рельеф структуры n^+ -Si-SiO₂- n -Si во внешнем поле. Точечная линия — модель трапециoidalного барьера, штрихпунктирная линия — уровень Ферми, t — уровень туннелирования электронов, E_c — дно зоны проводимости кремния, E_F — энергия Ферми в n -Si, E_{F+} — энергия Ферми в n^+ -Si.

имеют вид [8,9]

$$j_{2d} = \frac{qT}{\pi\hbar^2} \sum_{l,n} g_l m_l \ln \left(1 + \exp \frac{E_{Fs} - E_{nl}}{T} \right) \times \omega(E_{nl}, E_{Fs}) D(E_{nl}, V) T_R(E_{nl}, E_{Fs}), \quad (1)$$

$$j_{3d} = \frac{qTm_{ds}}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_{Fs}-E_F}^{\infty} \ln \left(1 + \exp \frac{E_{Fs} - E_{\perp}}{T} \right) \times D(E_{\perp}, V) T_R(E_{\perp}, E_{Fs}) dE_{\perp}. \quad (2)$$

При выводе соотношения (1) использована функция равновесного распределения Ферми–Дирака. Для образцов с толщиной окисла < 2 нм условие равновесия электронов в слое обогащения может нарушиться, поскольку время их жизни на уровнях размерного квантования $[\omega(E_{nl}, E_{Fs}) D(E_{nl}, V) T_R(E_{nl}, E_{Fs})]^{-1}$ может стать меньше максвелловского времени, определяемого сопротивлением пластины n -Si и емкостью „окисла“. Для невырожденного полупроводника превалирует составляющая j_{2d} , а для вырожденного (в наших образцах n^+ -Si-затвор) — j_{3d} . Здесь q — элементарный заряд, T — температура в энергетических единицах, \hbar — постоянная Планка, g_l — вырождение l -й долины, m_l — эффективная масса электрона в l -й долине, E_{Fs} и E_F — энергии Ферми для электронов на поверхности и в электронейтральном объеме полупроводника. Энергии E_{Fs} и E_F отсчитываются от дна зоны проводимости E_c , $E_F > 0$ соответствует вырожденному полупроводнику; E_{nl} — энергия n -го уровня l -й долины; $\omega(E_{nl}, E_{Fs})$ — частота соударений электрона с ГР на n -м уровне l -й долины; $D(E_{\perp}, V)$ — вероятность туннелирования на уровне энергии E_{\perp} , соответствующей движению по нормали к ГР и отсчитываемой от положения дна зоны проводимости инжектирующего полупроводника на его контакте с диэлек-

триком; V — падение напряжения на изолирующем промежутке; $T_R(E_{\perp}, E_{Fs})$ — корректирующий коэффициент, учитывающий отражение электронной волны от барьера, связанное с разрывами на ГР уровня дна зоны проводимости и значения эффективной массы туннелирующего электрона [10]. К дополнительному отражению приводит и отталкивающий потенциал сил изображения в полупроводнике [2]³, m_{ds} — эффективная масса, полученная суммированием эффективных масс электронов во всех долинах. Для Si<100> $m_{ds} = 2.05m_0$ [9]. Прозрачность барьера имеет вид

$$D = \exp(-\Phi),$$

$$\Phi = \left(\frac{8m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{z_1}^{z_2} \left[U(z) - E_{\perp} - \frac{qV}{h} z \right]^{1/2} dz, \quad (3)$$

где $U(z)$ — искомый профиль потенциального рельефа ($0 < z < h$), отсчитываемый от дна зоны проводимости инжектирующего электроны полупроводника на ГР с диэлектриком, $z_1(V)$ и $z_2(V)$ — координаты точек поворота. Разделение потенциала в изоляторе на две составляющие — собственное поле с профилем $U(z)$ и внешнее поле qV/h — требует установления начала отсчета напряжения V . Будем считать, что в равновесии, т.е. при равенстве потоков электронов из n -Si в n^+ -Si и обратно, $V = 0$. При этом потенциал $U(z)$ должен содержать и вклад от зарядов, фиксированных в изолирующем промежутке, и вклад от контактной разности потенциалов затвор–полупроводник.

Оценим характерную энергию E_0 , на которой прозрачность барьера спадает в $e = 2.7 \dots$ раз, $E_0 = (-d\Phi/dE_{\perp}|_{E_{\perp}=0})^{-1}$. В модели „прямоугольного“ барьера (прямое туннелирование) $E_0 = 2U_0/\Phi_0$, U_0 — высота барьера, $\Phi_0 = \Phi|_{V=0} = (8mU_0\hbar^2/\hbar^2)^{1/2}$. Для „треугольного“ барьера (режим Фаулера–Нордгейма) $qV > U_0$, $E_0 = qV/\Phi_0$. В экспериментально исследованной структуре (см. далее) $h \approx 3.7$ нм. Для оценки примем $U_0 = 3.15$ эВ, как в случае „толстого“ окисла [4]. Поэтому в диапазоне напряжений до 6 В (при $h \approx 3.7$ нм 6 В — напряжение пробоя SiO₂) характерная энергия $E_0 = 0.055$ – 0.11 эВ, или не более $4.4T$ (при комнатной температуре). Таким образом E_0 заметно превышает энергетические расстояния между соседними квантовыми уровнями электрона в слое обогащения, для которых типичны значения ~ 0.005 эВ [12], но существенно меньше масштаба изменения потенциала (~ 3 эВ). Изменение с внешним полем энергии Ферми электронов на поверхности n -Si также не существенно по сравнению с высотой туннельного барьера. Следовательно, для зависимости плотности туннельного тока сквозь окисел

³ Если диэлектрическая проницаемость при переходе от Si к SiO₂ изменяется плавно, то отталкивающий потенциал сил изображения может и не возникать [11].

от напряжения можно использовать выражение

$$j = \bar{j}(V)D(0, V). \quad (4)$$

Здесь $\bar{j}(V)$ — предэкспоненциальный множитель, который изменяется с напряжением значительно медленнее прозрачности D .⁴ Применение выражения (4) подразумевает, что значения потенциала $U(z)$, найденные с его помощью, будут по точности ограничены масштабом изменения зависимости $E_{Fs}(V)$. Следовательно, при таком подходе фактически пренебрегается квантованием спектра электронов в слое обогащения, поскольку оно проявляется в туннельном токе главным образом через зависимость $E_{Fs}(V)$. Возможность использования формулы (4) подтверждается и в работе [8], где показано, что рассчитанные с учетом квантования и без него туннельные ВАХ в логарифмическом масштабе практически не различимы.

Таким образом, из опыта можно определить с точностью до константы функцию $\Phi(V)$:

$$\Phi(V) = \left(\frac{8m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{z_1}^{z_2} \left[U(z) - \frac{qV}{h}z\right]^{1/2} dz, \quad (5)$$

а затем по этой функции, известной с некоторой погрешностью, восстановить профиль потенциала $U(z)$. Отметим, что выбранное в выражениях (3), (5) начало отсчета координаты z соответствует границе электронного газа в инжектирующем полупроводнике. Если отталкивающий потенциал сил изображения несуществен, то эта граница совпадает с плоскостью $z = z_1|_{V=0}$ т.е. $z_1|_{V=0} = 0$. Соответственно $z = h$ — граница электронного газа у противоположного контакта при $V = 0$. Здесь и далее $z_1(V)$ и $z_2(V)$ — координаты точек поворота при $E_{\perp} = 0$.

Преобразуем соотношение (5). Выразим зависимость $U(z)$ в параметрическом виде через координаты точек поворота как функции напряжения — $z_1(V)$ и $z_2(V)$. Данные функции определены при $0 < V < V_m$, где V_m — напряжение снятия барьера; при $V = V_m$ $U(z) \leq (qV_m/h)z$, а равенство этих членов достигается в единственной точке $z = z_m$, т.е. $z_1(V_m) = z_2(V_m) = z_m$. В интервале $0 < V < V_m$ потенциальный рельеф $U(z)$ описывается через параметр V двумя ветвями: в области $z < z_m$ $z = z_1(V)$, $U = (qV/h) \cdot z_1(V)$; в области $z > z_m$ $z = z_2(V)$, $U = (qV/h) \cdot z_2(V)$. При этом выражение (5) принимает вид

$$\Phi = \frac{1}{\bar{V}^{1/2}} \int_V^{V_m} (V' - V)^{1/2} \left(-\frac{df}{dV'}\right) dV'; \quad (6)$$

$\bar{V} = (9\hbar^2/32mh^2q)$, $f(V) = h^{-(3/2)}[z_2^{3/2}(V) - z_1^{3/2}(V)]$. Следовательно, по зависимости $\Phi(V)$ можно определить

⁴ Зависимость $\bar{j}(V)$ должна описывать, в том числе, и осцилляцию туннельного тока, связанную с интерференцией электронных волн в промежутке между точкой поворота в окисле и границей раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$ [2,13]. Поскольку амплитуда такой осцилляции мала, далее эту особенность функции $\bar{j}(V)$ учитывать не будем.

только комбинацию $f(V)$ искомым функций $z_1(V)$, $z_2(V)$, а восстановить потенциальный рельеф $U(z)$ полностью, строго говоря, нельзя. Решение такой задачи требует анализа обратной ветви ВАХ, соответствующей туннелированию электронов из $n^+\text{-Si}$ в $n\text{-Si}$. Уравнение (6) обращается с помощью преобразования Фурье. Получаем

$$\begin{aligned} f(V) &= \frac{2\bar{V}^{1/2}}{\pi} \int_V^{V_m} (V' - V)^{-(1/2)} \left[-\frac{d\Phi(V')}{dV'}\right] dV' \\ &= \frac{4\bar{V}^{1/2}}{\pi} \int_0^{x_m} [-\Phi(V + x^2)] dx, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\Phi(V) = d\Phi/dV$, $x_m = (V_m - V)^{1/2}$.

В модели прямоугольного барьера, т.е. в отсутствие сил изображения и переходных слоев, $V_m = \infty$. При учете сил изображения для рассматриваемой структуры напряжение снятия барьера V_m имеет величину порядка сотен вольт. Измерения туннельных ВАХ проводятся в ограниченном допробойном диапазоне напряжений $V_I < V < V_{II} < V_m$. Из соотношения (7) видно, что определение функции $\Phi(V)$ на ограниченном интервале изменения V не позволяет однозначно идентифицировать зависимость $f(V)$. Действительно, добавление к $\Phi(V)$ произвольной дифференцируемой функции $\varphi(V)$ со свойствами $\varphi|_{V \leq V_{II}} = 0$, $\varphi|_{V \geq V_m} = 0$ приводит к иной величине $f(V)$ на отрезке $V_I < V < V_{II}$. Поэтому отсутствие данных о $\Phi(V)$ при $V > V_{II}$ не позволяет найти зависимость $f(V)$ в этом диапазоне, а в интервале $V < V_{II}$ ограничивает точность ее построения. Оценим вклад недостающих данных при $V < V_{II}$. Из равенств (6) и (7) имеем

$$f(V) = \bar{f}(V) + \hat{f}(V),$$

$$\bar{f}(V) = \frac{4\bar{V}^{1/2}}{\pi} \int_0^{x_{II}} [-\Phi(V + x^2)] dx, \quad x_{II} = (V_{II} - V)^{1/2},$$

$$\hat{f}(V) = \frac{4\bar{V}^{1/2}}{\pi} \int_{x_{II}}^{x_m} [-\Phi(V + x^2)] dx$$

$$= f(V_{II}) + \frac{1}{\pi} \int_{V_{II}}^{V_m} \frac{df}{dV'} \arccos \left[1 - 2\left(\frac{V_{II} - V}{V' - V}\right)\right] dV'.$$

Следовательно, по мере приближения V к V_{II} вклад недостающих данных нарастает, причем $\hat{f}(V_{II}) = f(V_{II})$, и необходимо из каких-либо физических соображений продолжить экспериментальную зависимость $\Phi(V)$ в область $V_{II} < V < V_m$. Применительно к задаче о построении потенциального рельефа в изоляторе с учетом сил изображения и переходных слоев, в которых, собственно говоря, и происходит резкое изменение потенциала, будем считать, что $V_{II} > V_0$. Напряжение V_0 отвечает точке поворота $z_2(V_0)$ — границе переходного слоя со стороны $n^+\text{-Si}$, на которой имеет место излом функции $U(z)$.

Эта особенность потенциального рельефа приводит к перегибу кривой $\Phi(V)$ и к условию $d^2\Phi/dV^2|_{V=V_0} = 0$. Будем полагать, что зависимость $\Phi(V)$ при $V > V_{II}$ определяется плавным квазилинейным изменением потенциала, т. е. $dU/dz|_{z < z_2(V_0)} \approx \text{const}$. Естественно, данное предположение будет нарушаться при больших напряжениях, когда точка поворота $z_2(V)$ окажется в переходном слое со стороны n -Si. Если толщина окисла между переходными слоями не меньше ширины самого переходного слоя, то вкладом соответствующих значений V в интеграл (7) можно пренебречь. Тогда в качестве модельного потенциала $U_{\text{mod}}(z)$ для распространения зависимости $\dot{\Phi}(V)$ на область $V > V_{II}$ примем функцию $U_{\text{mod}}(z) = (qV_0/h)[\gamma z_2(V_0) + (1 - \gamma)z]$. Следовательно,

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{mod}}(V) &= \left(\frac{8m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{z_1}^{z_2} \left[U_{\text{mod}}(z) - \frac{qV}{h}z\right]^{1/2} dz \\ &= \left(\frac{1}{\bar{V}}\right)^{1/2} \left[\frac{z_2(V_0)}{h}\right]^{3/2} \frac{\gamma^{3/2}V_0^{3/2}}{[V - V_0(1 - \gamma)]}; \end{aligned}$$

коэффициент $\gamma = U_{\text{mod}}(z = 0)/U_{\text{mod}}[z_2(V_0)]$ находится из экспериментальных данных как $\gamma = [(V_{II} - V_0)/V_0] \times \{[\dot{\Phi}(V_0)/\dot{\Phi}(V_{II})]^{1/2} - 1\}^{-1}$, а функция $f(V)$ принимает вид

$$\begin{aligned} f(V) &= \frac{4\bar{V}^{1/2}}{\pi} \int_0^{x_{II}} [-\dot{\Phi}(V + x^2)] dx \\ &+ \frac{4\bar{V}^{1/2}}{\pi} [-\dot{\Phi}(V_{II})] (V_{II} - V_0 + \gamma V_0)^2 \\ &\times \begin{cases} \frac{x_{II}}{2x_0^2(x_{II}^2 - x_0^2)} - \frac{1}{4x_0^3} \ln\left(\frac{x_{II} + x_0}{x_{II} - x_0}\right), & V < V_0(1 - \gamma) \\ \frac{1}{3x_{II}^3}, & V = V_0(1 - \gamma) \\ \frac{1}{2x_0^3} \left[\frac{\pi}{2} - \arctg\left(\frac{x_{II}}{x_0}\right)\right] - \frac{x_{II}}{2x_0^2(x_{II}^2 + x_0^2)}, & V > V_0(1 - \gamma), \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

где $x_0 = |V - V_0 + \gamma V_0|^{1/2}$.

3. Восстановление профиля потенциала $U(z)$ по экспериментальным характеристикам туннельных МДП диодов. Анализ полученных результатов

Развитый алгоритм поиска функции $U(z)$ использован в отношении данных измерений квазиравновесной вольт-фарадной характеристики (ВФХ) и квазистатической ВАХ туннельного тока, проведенных при 293 К на структуре Al- n^+ -Si-SiO₂- n -Si-Al и представленных в [14]. Прослойка из вырожденного поликремния

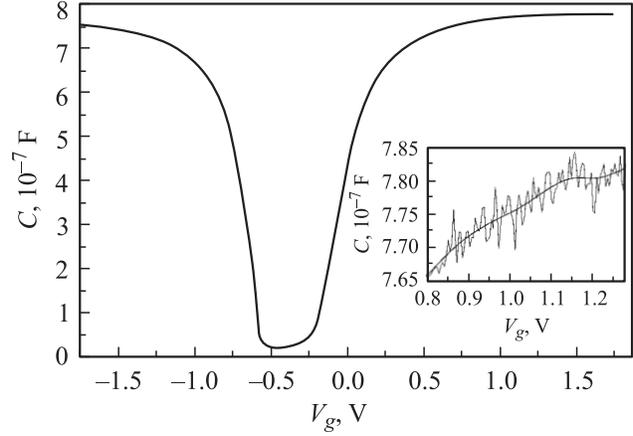


Рис. 2. Сглаженная вольт-фарадная характеристика. На вставке — фрагмент сглаженной ВФХ на фоне непосредственно измеренной.

(n^+ -Si) и пластина n -Si были легированы фосфором. Площадь затвора составляла $S = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2$. Эллипсометрическая толщина пирогенного окисла $h = 3.7 \text{ нм}$; это значение h , как правило, совпадает с величиной, найденной по экспериментальным ВФХ на основе самосогласованных расчетов, учитывающих квантование спектра электронов в слое обогащения [15]. Из динамических ВАХ полного тока $I(V_g)$, измерявшихся на треугольных импульсах напряжения со скоростями нарастания и спада $8 \cdot 10^{-3} \text{ В} \cdot \text{с}^{-1}$, по методике [16] были выделены ВФХ $C(V_g)$ в диапазоне от -1.75 до 1.75 В и туннельная ВАХ $I_t(V_g)$ в интервале от -5 до 5 В (V_g — потенциал затвора). В режимах слабой инверсии, обеднения и обогащения поверхности n -Si ВАХ $I(V_g)$ измерялись в темноте. Для определения квазистационарной зависимости $I(V_g)$ при глубокой инверсии поверхности n -Si возникала необходимость стимулирования резко замедляющегося процесса темновой генерации неосновных носителей заряда [17–19]. Поэтому соответствующая ветвь ВАХ $I(V_g)$ регистрировалась при подсветке периферии затвора слабым излучением светодиода АЛ-102Б. Интенсивность подсветки подбиралась эмпирически (за счет понижения мощности питания) по критериям воспроизводимости результатов измерений и отсутствия гистерезисных явлений.

Исходные зависимости $C(V_g)$ численно сглаживались с использованием формулы

$$\tilde{C}(V_g) = \frac{1}{\varepsilon} \int_{V_g - 3\varepsilon}^{V_g + 3\varepsilon} dV'_g \exp\left[-\frac{\pi(V'_g - V_g)^2}{\varepsilon^2}\right] C(V'_g).$$

Значения параметра ε подбирались путем сопоставления частот шума и крутизны ВФХ: $\varepsilon = 0.03 \text{ В}$ ($-0.9 \leq V_g \leq 0.8 \text{ В}$), $\varepsilon = 0.1 \text{ В}$ ($-1.75 < V_g < -0.9 \text{ В}$, $0.8 < V_g < 1.75 \text{ В}$). Сглаженная ВФХ показана на рис. 2, а на вставке к нему — фрагмент сглаженной ВФХ на фоне исходной. Поскольку потенциал $U(z)$ отвечает

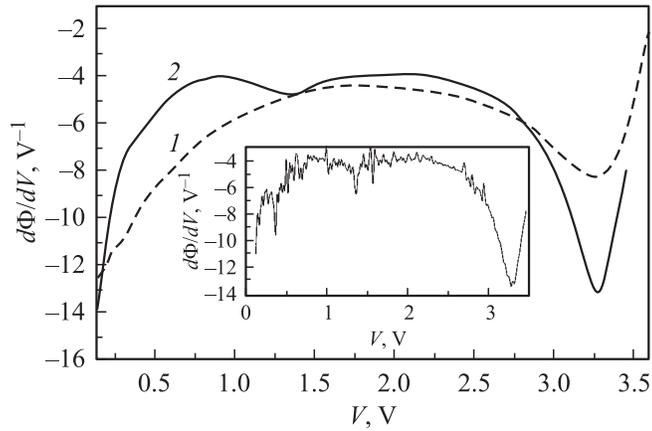


Рис. 3. Производная логарифма туннельного тока по падению напряжения на окисле. 1 — ветвь обогащения; $V_I = 0.14$ В, $V_{II} = 3.59$ В, $\varepsilon = 0.15$ В ($V < 0.55$ В), $\varepsilon = 0.25$ В ($3.05 > V > 0.55$ В), $\varepsilon = 0.15$ В ($V > 3.05$ В), $V_0 = 3.26$ В, $\Phi(V_0) = -8.23$, $\Phi(V_{II}) = -2.19$. 2 — ветвь обеднения/инверсии, $V_I = 0.12$ В, $V_{II} = 3.45$ В, $\varepsilon = 0.25$ В ($V < 3.1$ В), $\varepsilon = 0.05$ В ($V > 3.1$ В), $V_0 = 3.28$ В, $\Phi(V_0) = -13.14$, $\Phi(V_{II}) = -7.87$. V — модуль падения напряжения на окисле. На вставке — производная логарифма туннельного тока на ветви обеднения/инверсии, полученная с помощью программного обеспечения Origin 7.0.

распределению поля в равновесии, то, по определению, $V = 0$ при $V_g = 0$ и зависимость падения напряжения на туннельном промежутке от смещения на затворе описывается интегралом

$$V = \frac{4\pi h}{\alpha_i S} \int_0^{V_g} C(V'_g) dV'_g. \quad (9)$$

Здесь $\alpha_i = 3.9$ [4] — диэлектрическая проницаемость SiO_2 . Связь V с V_g в диапазонах напряжений $1.75 \leq V_g \leq 5$ В и $-5 \leq V_g \leq -1.75$ В, где исходных данных нет, находилась путем линейной экстраполяции функции $V(V_g)$ в эти области. При $V_g > 1.75$ В поверхность $n\text{-Si}$ сильно обогащена, а при $V_g < -1.75$ В находится в состоянии глубокой инверсии. Для наших целей в этих диапазонах напряжений вплоть до пробоя МДП структуры можно считать $C \approx \text{const}$. Поэтому интегрирование (9) проводилось со значениями $C = C|_{V_g=1.75 \text{ В}}$ при $V_g > 1.75$ В и $C = C|_{V_g=-1.75 \text{ В}}$ при $V_g < -1.75$ В. Величина $U(h) \approx -0.1$ эВ определена из анализа ВФХ в области, где поверхность $n\text{-Si}$ обеднена, но еще не инвертирована, распределение потенциала в $n\text{-Si}$ описывается приближением Шоттки и C^{-2} — линейная функция V_g .

Для восстановления профиля потенциала $U(z)$ по методу, развитому в разд. 2, необходима производная от зависимости $\Phi(V) = \ln[I_t(V_{II})/I_t(V)]$. Численное дифференцирование дискретно заданных функций — некорректная по Тихонову задача, и для ее решения использовался метод регуляризации [20]. Применяя для

сглаживания стабилизирующий множитель Гаусса, производные определяли в соответствии с работой [21]:

$$\dot{\Phi}(V) \approx \frac{2\pi}{\varepsilon^3} \int_{V-3\varepsilon}^{V+3\varepsilon} (V' - V) \Phi(V') \exp\left[-\frac{\pi(V' - V)^2}{\varepsilon^2}\right] dV'.$$

Смысл параметра ε (как и ранее при сглаживании) очевиден — это задаваемое пользователем разрешение по переменной V . Его величина выбирается исходя из баланса случайных ошибок измерений (в том числе и численного интегрирования), которые подавляются с ростом ε , и систематической погрешности от сглаживания, увеличивающейся с ростом ε . Разумеется, для разных участков кривой $\Phi(V)$ значения ε могут быть различны. На рис. 3 приведены производные $\dot{\Phi}(V)$ при обогащении и обеднении/инверсии ГР $n\text{-Si}-\text{SiO}_2$. На вставке к рис. 3 для сравнения показана соответствующая ветви обеднения/инверсии кривая $\dot{\Phi}(V)$, найденная по алгоритму сплайн-функций с помощью программных средств Origin 7.0. Видно, что такой подход, в отличие от метода регуляризации Тихонова, приводит к значительным погрешностям.

Функции $f(V)$ для обогащения и обеднения/инверсии (в данном случае при расчетах V заменяли на $|V|$) вычислялись в соответствии с выражением (8). Эти функции при $m = 0.5m_0$ представлены на рис. 4. Анализ этих данных показывает следующее. Во-первых, поскольку при малых напряжениях $f(V) > 1$ (что противоречит условию $z_2 < h$), значение массы туннелирующего электрона занижено. Во-вторых, если предположить, что $z_1 \ll z_2$, ветви потенциала, отвечающие измерениям в обогащении и обеднении/инверсии, могут быть построены параметрически по правилам

$$U_{\text{enr}}(z) = qV f_{\text{enr}}^{2/3}(V), \quad z = h f_{\text{enr}}^{2/3}(V),$$

$$U_{\text{depl}}(z) = q|V| f_{\text{depl}}^{2/3} + U(h), \quad z = h \left[1 - f_{\text{depl}}^{2/3}(V)\right].$$

Здесь и далее индекс „enr“ указывает на ветвь обогащения, а индекс „depl“ — на ветвь обеднения/инверсии.

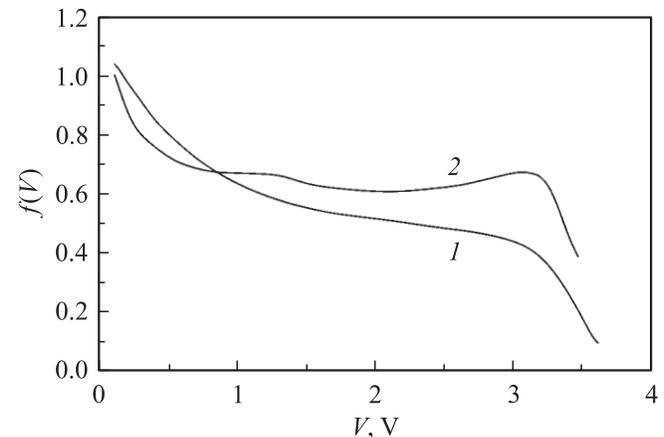


Рис. 4. Функция $f(V)$. $m = 0.5m_0$. 1 — ветвь обогащения, 2 — ветвь обеднения/инверсии.

Такое построение показало, что кривые $U_{\text{enr}}(z)$ и $U_{\text{depl}}(z)$ пересекаются и не стыкуются друг с другом. Это указывает на два обстоятельства: на занижение значения массы m и на то, что $z_1(V)$ и $z_2(V)$ — величины одного порядка. Для восстановления функции $U(z)$ использовалась процедура последовательных приближений. Координата первой точки поворота для туннелирования из $n\text{-Si}$ в $n^+\text{-Si}$ определялась по ветви потенциала $U_{\text{depl}}(z)$, а $z_1(V)$ при туннелировании из $n^+\text{-Si}$ в $n\text{-Si}$ — по ветви $U_{\text{enr}}(z)$. В качестве нулевого приближения брались уже упомянутые зависимости

$$U_{\text{enr}}^{(0)}(z) = qVf_{\text{enr}}^{2/3}(V), \quad z = hf_{\text{enr}}^{2/3}(V),$$

$$U_{\text{depl}}^{(0)}(z) = q|V|f_{\text{depl}}^{2/3} + U(h), \quad z = h \left[1 - f_{\text{depl}}^{2/3}(V) \right].$$

При этом $(n+1)$ -е приближение строилось из n -го по формулам

$$U_{\text{enr}}^{(n+1)}(z) = qV \left\{ f_{\text{enr}}(V) + [z_{1\text{enr}}^{(n)}(V)/h]^{3/2} \right\}^{2/3},$$

$$z = h \left\{ f_{\text{enr}}(V) + [z_{1\text{enr}}^{(n)}(V)/h]^{3/2} \right\}^{2/3},$$

$$U_{\text{depl}}^{(n+1)}(z) = q|V| \left\{ f_{\text{depl}}(V) + [z_{1\text{depl}}^{(n)}(V)/h]^{3/2} \right\}^{2/3} + U(h),$$

$$z = h \left\langle 1 - \left\{ f_{\text{depl}}(V) + [z_{1\text{depl}}^{(n)}(V)/h]^{3/2} \right\}^{2/3} \right\rangle.$$

Зависимости $z_{1\text{enr}}^{(n)}(V)$, $z_{1\text{depl}}^{(n)}(V)$ вычислялись из уравнений

$$U_{\text{depl}}^{(n)} \Big|_{z=z_{1\text{enr}}^{(n)}(V)} = \frac{qV}{h} z_{1\text{enr}}^{(n)}(V),$$

$$U_{\text{enr}}^{(n)} \Big|_{z=h-z_{1\text{depl}}^{(n)}(V)} = \frac{q|V|}{h} z_{1\text{depl}}^{(n)}(V) + U(h).$$

Процедура проводилась для каждого из значений массы $(0.9, 1.0, \dots, 2.5)m_0$. Кроме того, для уменьшения погрешности, связанной с необходимостью продлевать функцию $\Phi(V)$ в область $V > V_{\text{II}}$, где измерения не проводились, дополнительно ограничивали диапазон напряжений: $V < V_* < V_{\text{II}}$. Величина V_* определялась из условия, чтобы найденная непосредственно из экспериментальных данных составляющая функции $f(V)$ была в 2 раза больше, чем полученная в результате продления зависимости $\Phi(V)$, т.е. $\hat{f}(V_*) = 2f(V_*)$. Поскольку зависимость $\hat{f}(V)$ быстро спадает при уменьшении V , то $V_{\text{II}} - V_* \ll V_{\text{II}}$, и данное ограничение приводит к потере относительно небольшой части кривой $U(z)$.⁵

После 4–5 приближений ветви потенциала $U_{\text{enr}}(z)$ и $U_{\text{depl}}(z)$ переставали изменяться для всех значений массы туннелирующего электрона. Выбор величины m проводился из соображений максимальной стыковки ветвей $U_{\text{enr}}(z)$ и $U_{\text{depl}}(z)$ в единый потенциал $U(z)$. Луч-

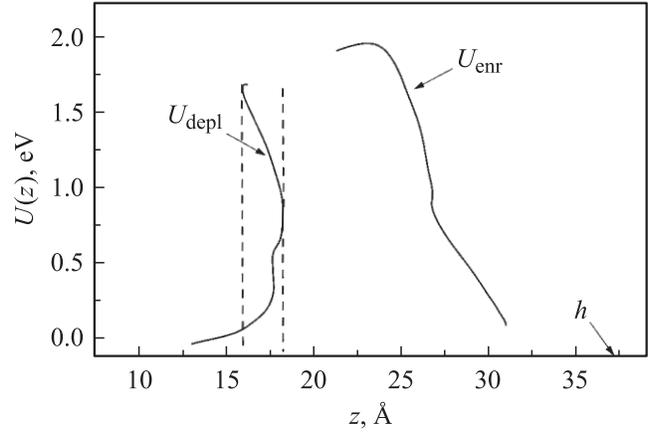


Рис. 5. Профиль потенциала в окисле. Штриховой линией отмечены границы области, в которой проявляются нефизические особенности, связанные с превышением точности при построении.

шим результатам соответствует $m = 2.2m_0$. Кривая $U(z)$ приведена на рис. 5, она является 5-м последовательным приближением. Нефизические особенности на графике $U(z)$ — неоднозначность ветви $U_{\text{depl}}(z)$ — обусловлены превышением точности при построении. Действительно, для описания туннельного тока использовалось выражение (4), что ограничивает точность регистрации энергетических величин масштабом $\Delta \sim 0.1$ эВ. Как следует из соотношений $U_{\text{depl}}(z) = q|V|[z_{2\text{depl}}(V)/h] + U(h)$, $z = h - z_{2\text{depl}}(V)$, допустимая погрешность вычисления z составляет $(\Delta/qV)h$ и в области неоднозначности ветви $U_{\text{depl}}(z)$ примерно равна 3 \AA . Это как раз и есть ширина полосы, где потенциал круто растет с координатой, отклоняясь от вертикали в недопустимую сторону.

Уже непосредственно из зависимости крутизны экспериментальных туннельных ВАХ от напряжения на изолирующем промежутке следует, что они не описываются моделью с прямоугольным барьером. В частности, функция $\Phi(V)$, вычисленная на основе формулы (5) при $U = \text{const}$, независимо от значений эффективной массы и толщины изолятора приводит к равенству $\Phi(V_0) = (8/3)\Phi(0)$, что абсолютно не согласуется с экспериментом (рис. 3). Основные особенности полученного в настоящей работе реального профиля потенциала в тонком слое SiO_2 (рис. 5) — это относительно толстые ($\sim 10 \text{ \AA}$) слои, отделяющие кремний от собственно барьера, ограничивающего туннелирование электронов. Уровень потенциала в этих слоях хотя и выше дна зоны проводимости в Si, но существенно ниже высоты барьера. В принципе подобная картина может быть связана со сдвигом в глубь изолятора дипольного слоя, отвечающего переходу от Si к SiO_2 , со специфическим распределением фиксированного заряда в окисле и(или) с понижением барьера силами изображения, возникающими на контакте фаз с высокой и с низкой диэлектрической проницаемостью.

⁵ Для обеднения/инверсии величина V_* практически совпала с V_0 .

4. Заключение

Выяснение природы образования переходных слоев с аномально низким по сравнению с высотой барьера уровнем потенциала — задача развития настоящей работы. В этой связи представляются важными исследования изменений потенциального рельефа, стимулированных накоплением и перераспределением фиксированного заряда при полевом повреждении окисла. Интересно понять и роль сил изображения в понижении туннельного барьера. Модельные расчеты поля этих сил в духе работы [11] для двух близко расположенных плавных переходов от среды с высокой к среде с низкой диэлектрической проницаемостью и сопоставление полученных результатов с реальным профилем потенциала могут позволить определить эффективную зависимость диэлектрической проницаемости от координаты.

Отличие формы реального барьера в диэлектрическом зазоре от прямоугольной и его меньшая, чем в толстом окисле, высота кардинально влияют не только на туннельные токи. Существенная толщина переходных слоев с уровнем потенциала, не значительно отличающимся от уровня дна зоны проводимости в кремнии, обеспечивает большие глубины проникновения волновой функции электрона в изолятор. Таким образом, результаты расчетов эффектов размерного квантования в слоях обогащения у ГР Si–SiO₂, основанных на модели ступенчатого барьера с высотой ~ 3 эВ, могут существенно отличаться от экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-08-01649-а).

Список литературы

- [1] E.R. Nicollian, J.R. Brews. *MOS (Metal–Oxide–Semiconductor) Physics and Technology* (N.Y., John Wiley & Sons, 1982).
- [2] E.I. Goldman, N.F. Kukharskaya, A.G. Zhdan. *Sol. St. Electron.*, **48**, 831 (2004).
- [3] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Мир, 1984) т. 2. [Пер. с англ.: S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices* (J. Wiley & Sons, 1981)].
- [4] L.A. Kasprzak, R.B. Laibowitz, M. Ohring. *J. Appl. Phys.*, **48**, 4281 (1977).
- [5] S. Horiguchi, H. Yoshino. *J. Appl. Phys.*, **58**, 1597 (1985).
- [6] M. Städele, F. Sacconi, A. Di Carlo, P. Lugli. *J. Appl. Phys.*, **93**, 2681 (2003).
- [7] Z.A. Weinberg. *Sol. St. Electron.*, **20**, 11 (1977).
- [8] Farhan Rana, Sandip Tiwari, D.A. Buchanan. *Appl. Phys. Lett.*, **69**, 1104 (1996).
- [9] O. Simonetti, T. Maurel, M. Jourdain. *J. Appl. Phys.*, **92**, 4449 (2002).
- [10] L.F. Register, E. Rosenbaum, K. Yang. *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 457 (1999).
- [11] F. Stern. *Phys. Rev. B*, **17**, 5009 (1978).
- [12] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985) с. 77. [Пер. с англ.: T. Ando, A. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.*, **54** (2), (1982)].
- [13] A. Hadjadi, G. Salace, C. Petit. *J. Appl. Phys.*, **89**, 7994 (2001).
- [14] А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, В.Г. Нарышкина, Г.В. Чучева. *ФТП*, **41**, 1135 (2007).
- [15] O. Simonetti, T. Maurel, M. Jourdain. *J. Non-Cryst. Sol.*, **280**, 110 (2001).
- [16] А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, Г.В. Чучева. *ПТЭ*, № 2, 120 (2002).
- [17] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан. *Микроэлектроника*, **23**, 3 (1994).
- [18] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, Ю.В. Гуляев, Г.В. Чучева. *ФТП*, **39**, 697 (2005).
- [19] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, Ю.В. Гуляев, Г.В. Чучева. *ФТП*, **40**, 195 (2006).
- [20] А.Н. Тихонов, В.А. Арсенин. *Методы решения некорректных задач* (М., Наука, 1986).
- [21] Е.И. Гольдман, В.А. Иванов. *Адаптивный тихоновский алгоритм построения производных экспериментальных зависимостей*. [Препринт ИРЭ РАН № 22(551)] (М., 1990)].

Редактор Л.В. Шаронова

Reconstruction of the potential profile in an insulating layer on the basis of current–voltage characteristics of tunnel MIS diodes

E.I. Goldman, A.G. Zhdan, N.F. Kukharskaya, M.V. Chernyaev⁺

Institute of Radio Engineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences,
141120 Fryazino, Russia

⁺ Institute of Molecular Electronics and Micron,
124460 Zelenograd, Russia

Abstract A method has been developed for reconstruction of the potential profile in an insulating layer on the basis of field dependences of tunnel current through the layer. The coordinates of the turn points as functions of the voltage across the insulating layer are determined in quasi-classical approximation from the tunnel current–voltage characteristics. The potential is constructed from the found dependencies. The developed algorithm was applied to an n^+ -Si–SiO₂– n -Si structure with the oxide thickness of 37 Å. The real potential relief typically has relatively thick (~ 10 Å) layers with lowered potential that separate Si from the actual tunneling barrier.