

Оптимизация одноуровневой квантовой модели приповерхностных индуцированных слоев в СВЧ-приборах на основе системы металл-диэлектрик-полупроводник

Предлагается усовершенствование компактной модели, применяемой при расчетах распределения заряда и потенциала в МДП-структурах в режиме инверсии. Благодаря усовершенствованию, область использования модели может быть расширена на произвольные режимы, а также на случаи сильного легирования полупроводника, когда изначальный вариант становился неприменимым. Данное улучшение существенно для расчетов широкого круга СВЧ-приборов, функционирование которых основано на формировании индуцированных двумерных слоев заряда. Новые моменты связаны с введением дополнительного уровня на краю приповерхностной квантовой ямы и с рядом математических уточнений. Результаты проверены сопоставлением с опорными данными.

Ключевые слова: приповерхностное квантование, структура металл-диэлектрик-полупроводник, инверсия, обогащение, компактное моделирование.

При анализе характеристик целого ряда СВЧ-приборов, функционирование которых основано на появлении индуцированного инверсного или обогащенного слоя у границы раздела диэлектрик–полупроводник, возникает потребность в моделировании профилей заряда или потенциала в таких слоях и в структуре в целом. Пренебрежение квантовыми эффектами в таком случае приводит к неприемлемо большому занижению величины изгиба зон $q\varphi_s$ в полупроводнике [1]. Надежным способом подобных расчетов является самосогласованное решение уравнений Шрёдингера и Пуассона [2]. На современных вычислительных мощностях, в случае единичного прибора, этот подход не представляется ресурсозатратным. Однако при моделировании интегральных микросхем такое решение необходимо для огромного количества приборов, и поэтому использование более простых алгоритмов может быть полезным для оптимизации вычислений в целом. Соответственно, разработка надежных компактных моделей остается актуальной задачей.

Для важной ситуации умеренно легированной структуры металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) в режиме инверсии неплохим приближением является введение одного эффективного уровня E_0 в квантовой яме, которому приписывается волновая функция $\psi_0 = (b^3/2)^{1/2} \cdot z \cdot \exp(-bz/2)$ с параметром b , определяемым путем минимизации энергии [1]. Такая модель, однако, неприменима при высоких концентрациях примеси, а также в режимах аккумуляции. Но с учетом простоты модели желательно расширить диапазон ее работоспособности и на подобные случаи.

В настоящей работе предлагается усовершенствование, заключающееся во введении дополнительного уровня E_c на краю ямы. На Рис. 1, для определенности, показан случай электронной ямы. Через w обозначена ширина области изгиба зон (для режима инверсии это просто ширина области обеднения). Трехмерная концентрация носителей на «уровне» E_c , не зависит от координаты, она определяется энергией Ферми E_F ямы, а конкретно для равновесия в подложке – плотностью доноров или акцепторов (величина N_D или N_A). При

выполнении вышеупомянутой процедуры минимизации энергии для нахождения значения b (см^{-1}), наряду с E_0 , учитывается наличие E_c ; кроме того, допускается ситуация, что E_0 в мелкой яме может и не существовать, тогда весь заряд носителей сосредоточен на E_c . В процессе нахождения b определяются концентрации N_{s0} и N_{sc} (см^{-2}) на уровнях, а также w (см), после чего вычисляется весь профиль зон $q\varphi(z)$.

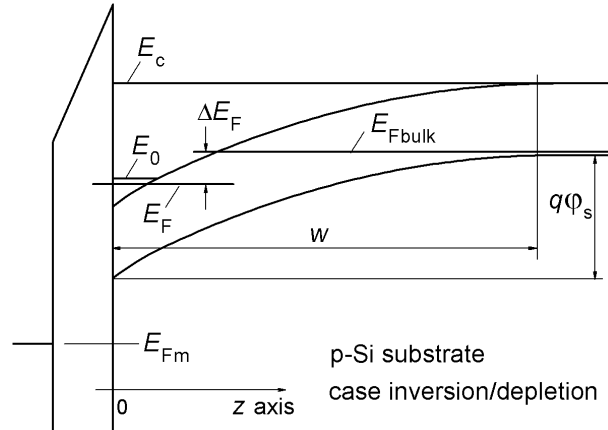


Рис. 1. Зонная диаграмма МДП-структуры с индуцированным электронным слоем (E_c – дополнительный «уровень», вводимый в рассмотрение, наряду с основным уровнем ямы E_0).

Таким образом, в усовершенствованной модели заряд носителей (в условиях Рис. 1 – электронов) составляет $N_s = N_{s0} + N_{sc}$, а полный заряд в полупроводнике будет

$$N_{stot} = N_s + wN_A(depl/inv); N_{stot} = N_s(acc) \quad (1)$$

для режимов обеднения/инверсии и аккумуляции, соответственно. Для простоты считаем, что при $z < w$ атомы примеси полностью ионизованы в первом и не ионизованы во втором режиме. Трехмерная концентрация заряда (см^{-3}) в области изгиба зон без учета вклада E_0 :

$$C_{con} = N_A + N_{sc}w^{-1}(depl/inv); C_{con} = N_{sc}w^{-1}(acc) \quad (2)$$

Оптимальная величина b^* параметра b находится из выражения:

$$\frac{d}{db} \left(E_{kin} + \frac{E_{in0}}{2} + E_{con} + E_{out} \right)_{b=b^*} = 0 \quad (3)$$

где E_{kin} – кинетическая энергия электрона на уровне E_0 , E_{in0} – энергия межэлектронного взаимодействия на уровне E_0 , E_{con} – энергия взаимодействия электрона с уровнем E_0 и заряда C_{con} , а E_{out} – энергия из-за отсутствия заряда C_{con} в диапазоне $z > w$ при наличии там заряда $q|\psi_0(z)|^2N_{s0}$ за счет электронов уровня E_0 . Выражения для энергий имеют вид:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2 b^2}{8m_z}; E_{con} = \frac{q^2 C_{con} w^2}{2\epsilon_0 \epsilon_s} \left[\frac{6}{bw} - \frac{12}{b^2 w^2} + \left(1 + \frac{6}{bw} + \frac{12}{b^2 w^2} \right) \exp(-bw) \right] \quad (4a)$$

$$E_{in0} = \frac{33q^2 N_{s0}}{16\epsilon_0 \epsilon_s b}; E_{out} = \frac{3q^2 C_{con}}{\epsilon_0 \epsilon_s} \left[\frac{2}{b^2} + \frac{w}{b} + \frac{w^2}{6} \right] \exp(-bw) \quad (4b)$$

Здесь m_z – масса электрона в направлении z , а ε_s – проницаемость полупроводника. В рамках старого подхода не было E_{out} , на месте C_{con} стояла N_A и отсутствовало слагаемое с « exp » в (4а), появляющееся при аккуратном интегрировании. После нахождения b^* имеем:

$$E_0 = (E_{kin} + E_{m0} + E_{con})_{b=b^*} \quad (5)$$

а профиль зон в полупроводнике и энергия E_c вычисляются как ($z_w = \min(z, w)$):

$$q\varphi(z) = \frac{q^2 C_{con}}{\varepsilon_0 \varepsilon_s} \left(z_w w - \frac{z_w^2}{2} \right) + \frac{q^2 N_{s0}}{\varepsilon_0 \varepsilon_s} \left[\frac{3}{b^*} - \left(\frac{b^* z^2}{2} + 2z + \frac{3}{b^*} \right) \exp(-b^* z) \right] \quad (6)$$

$$E_c = q\varphi_s = \frac{q^2 C_{con} w^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon_s} + \frac{3q^2 N_{s0}}{\varepsilon_0 \varepsilon_s b^*} \quad (7)$$

При этом концентрации на уровнях E_0 и E_c равняются

$$N_{s0} = \frac{v_{\perp} m_{\perp} kT}{\pi \hbar^2} \ln \left[\frac{\exp((E_F - E_0)/kT) + 1}{\exp((E_F - E_c)/kT) + 1} \right]; N_{sc} = n_0 w \cdot \frac{\ln \left[\exp((E_F - E_c)/kT) + 1 \right]}{\ln \left[\exp((E_{Fbulk} - E_c)/kT) + 1 \right]} \quad (8)$$

Если оказалось $E_0 > E_c$, то считаем, что уровень E_0 не существует и что $N_{s0} = 0$. Здесь m_{\perp} – масса электрона в плоскости интерфейса, а v_{\perp} – кратность вырождения долин. kT – тепловая энергия, E_F и E_{Fbulk} – энергии Ферми в яме и в толще, Рис. 1. Через n_0 (см^{-3}) обозначена концентрация электронов в толще, полагаемая равной n_i^2/N_A для обеднения-инверсии или N_D для обогащения; n_i – собственная концентрация. При $E_F = E_{Fbulk}$, имеем $N_{sc} = n_0 w$.

На Рис. 2а приведены зависимости относительной «глубины» основного уровня $E_0/q\varphi_s$, ширины w , а также долей заряда в полупроводнике (Si) N_{s0}/N_{stot} , N_{sc}/N_{stot} на уровнях E_0 , E_c от сдвига ΔE_F энергий Ферми яма–толща для режима обеднения/инверсии. Все кривые построены для одного и того же полного заряда N_{stot} (10^{12} или 10^{13} см^{-2}). Как можно было предвидеть, роль уровня E_c нарастает при почти разогнутых зонах, в самой левой части рисунка, где $\Delta E_F < 0$. При этом яма сужается, а уровень E_0 перестает существовать. В таких режимах квантовая модель в ее прежнем варианте переставала работать, особенно при повышении концентрации легирующей примеси, и, во избежание срыва счета, превышение E_0 над $q\varphi_s$ приходилось игнорировать.

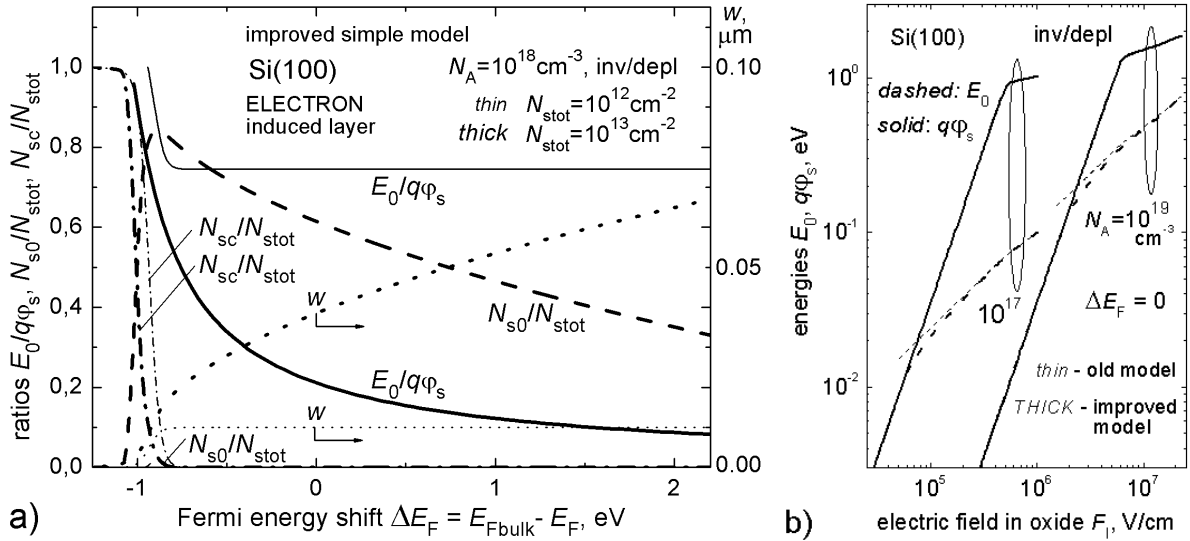


Рис. 2 а. Глубина залегания основного уровня ямы $E_0/q\phi_s$, ширина обедненной области w , а также доли полного заряда в полупроводнике, приходящиеся на уровень E_0 и на E_c (соответственно, N_{s0}/N_{stot} и N_{sc}/N_{stot}). Аргументом выступает сдвиг энергий Ферми толща – яма.

б – Артефакт старого варианта простой модели, исключаемый при усовершенствовании.

Благодаря усовершенствованию модели, ситуация $E_0 > E_c$ (которая может возникнуть не только при $\Delta E_F < 0$, но иногда и при $\Delta E_F = 0$) не вызывает проблем: как пояснено после формул (8), в таком случае принимается, что все электроны располагаются на уровне E_c . Пример представлен на Рис. 2b, где по абсциссе отложено поле в диэлектрике (SiO_2); его можно преобразовать к полному заряду: $F_1 = qN_{stot}/\epsilon_0\epsilon_l$, где $\epsilon_l = 3.9$. Отметим также, что некоторые математические уточнения (наличие экспоненциального члена в (4а), наличие знаменателя в выражении под логарифмом в первой из формул (8)) обеспечивают более плавный подход E_0 к краю ямы.

Параметры m_z , m_{\perp} , ν_{\perp} для электронов были положены равными $0.432m_0$, $0.341m_0$, 6 (Si(100)) или $0.258m_0$, $0.358m_0$, 6 (Si(111)) и для дырок $0.260m_0$, $0.297m_0$, 3 (Si(100)) или $0.392m_0$, $0.330m_0$, 3 (Si(111)). Все результаты – для температуры $t = 300$ К.

Для проверки количественной состоятельности предложенной усовершенствованной модели проведена ее верификация посредством сравнения с результатами точных расчетов методом Шрёдингера-Пуассона, заимствованными из литературы. Пример такого сравнения представлен на Рис. 3. Показаны зависимости изгиба зон $q\phi_s$ в кремнии от поля F_1 . Для примеси доноров (N_D) ситуация соответствует режиму аккумуляции, а для акцепторов (N_A) – обеднению/инверсии. Качественно, поведение кривых понятно: при повышении N_A (N_D) изгиб уменьшается. Количественно, неточность не превышает 0.04 эВ.

Модель согласуется со своей старой версией для ситуаций слабого легирования, достаточно глубоких и широких ($6/b \ll w$) ям: тогда заряд qN_{sc} заведомо мал, а вклад E_{out} и экспоненциальный член в (4а) могут быть опущены. Кроме того, поскольку аккумуляция и инверсия рассматриваются единообразно, при снижении N_A и N_D кривые $q\phi_s(F_1)$ на Рис. 3 для электронных индуцированных слоев сливаются. Аналогичные результаты получаются в случае дырочных приповерхностных индуцированных слоев.

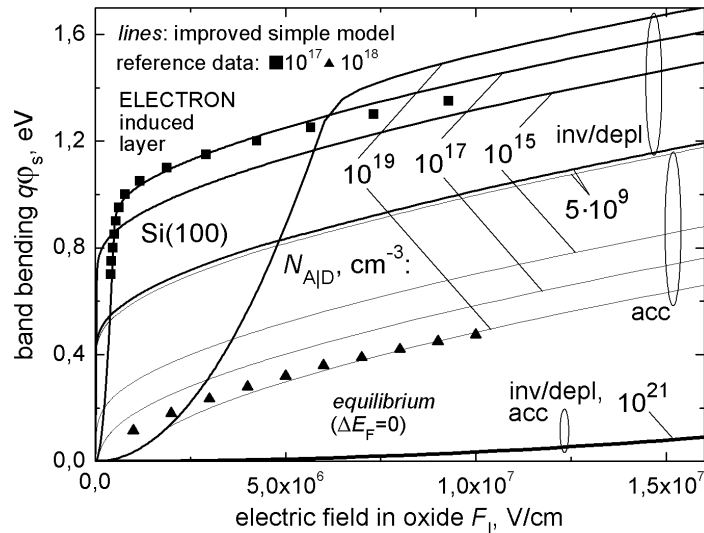


Рис. 3. Изгибы зон в кремнии в МДП-структуре, рассчитанные по усовершенствованной модели. Для сравнения приведены данные точного расчета ($N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ [3] и $N_A = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [4]).

Косвенным преимуществом введения уровня на краю ямы, имитирующего состояния континуума, является еще возможность «дискретного» расчета туннельного тока через диэлектрик по формуле типа $j = qN_{s0}/\tau_0 \cdot \Theta(E_0) + qN_{sc}/\tau_c \cdot \Theta(E_c)$. Это проще традиционного интегрирования $(4\pi q v_{\perp} m_{\perp} h^{-3}) \int (f_F - f_m) dE \int \Theta(E, E_{\perp}) dE_{\perp}$; f_F, f_m – функции Ферми ямы и металла, Θ – вероятность, E и E_{\perp} – полная и поперечная энергии электрона. Характеристические времена находятся как $\tau_0 = 24m_z(\hbar b^2)^{-1}$ и $\tau_c = 2w(kT/m_z)^{-1}$.

Подведем итоги. В работе был предложен и опробован вариант универсализации ранее известной модели инверсионного слоя в умеренно легированных МДП-структурах, позволяющий применять ее в любых режимах. Потенциальной сферой использования модели являются расчеты СВЧ приборов с индуцированными квантовыми слоями в ситуациях, когда применение самосогласованных решений уравнений Шрёдингера и Пуассона почему-либо неудобно.

Библиографический список

1. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М: Мир (1985).
2. Illarionov Yu.Yu., Vexler M.I., Karner M., Tyaginov S.E., Cervenka J., Grasser T. TCAD simulation of tunneling leakage current in CaF₂/Si(111) MIS structures. *Curr. Appl. Phys.*, v. 15, No. 2, pp. 78-83 (2015).
3. Yang N., Henson W.K., Hauser J.R., Wortman J.J. Modeling study of ultrathin gate oxides using direct tunneling current and capacitance-voltage measurements in MOS devices. *IEEE Trans. Electron Dev.*, v. ED-46, No. 7, pp. 1464-1471 (1999).
4. Suñe J., Olivo P., Riccò B. Quantum-mechanical modeling of accumulation layers in MOS structure. *IEEE Trans. Electron Dev.*, v. ED-39, No. 7, pp. 1732-1739 (1992).