

Влияние ловушек на накопление подвижного заряда в МОП-структурах при термополевых обработках

О.В. Александров, Н.Н. Морозов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Аннотация: в данной работе разработана количественная модель влияния ловушек на параметры миграции подвижного заряда в подзатворном диэлектрике МОП-структур. Рассчитаны зависимости эффективных коэффициентов диффузии и энергии активации от концентрации ловушек, энергии связи ловушек с ионами, концентрации примеси и температуры термополевой обработки. Показано, что с увеличением концентрации ловушек накопление подвижного заряда вблизи межфазной границы Si-SiO₂ замедляется. С помощью представленной модели можно объяснить разброс экспериментальных данных по диффузии ионов натрия в диоксиде кремния.

Ключевые слова: МОП-структура, подзатворный диэлектрик, подвижный ионный заряд, диффузия, термополевая обработка

1. Введение

Подвижные щелочные ионы являются причиной нестабильности параметров МОП-структур и МОП-транзисторов при термополевых обработках (ТПО) [1,2]. Наиболее распространенной загрязняющей примесью в SiO₂ является натрий [1-5]. Накопление ионов Na⁺ вблизи межфазной границы (МФГ) Si-SiO₂ под действием приложенного к затвору смещения приводит к сдвигу порогового напряжения МОП-транзисторов [1,2,6]. Рядом авторов были проведены экспериментальные исследования параметров диффузии Na в МОП-структурах, специально легированных этой примесью [2-8].

В литературе [2-8] разделяют миграцию ионов натрия на два физически разных процесса: «быстрый» с энергией активации 0.4-0.7 эВ и «медленный» с энергией активации 1-1.4 эВ. Процесс «быстрой» миграции объясняется движениям свободного натрия по междоузлиям и «каналам» в аморфном SiO₂ [5]. Полагалось, что в «медленном» процессе натрий пребывает в связанном состоянии (например, в группах -Si-O-Na) и его движение по толщине оксида происходит перескоком по ловушкам.

Целью настоящей работы является построение количественной модели процесса миграции подвижного заряда на примере ионов натрия в МОП-структурах при термополевых обработках с учетом захвата ионов на ловушках.

2. Уравнения модели

В аморфном диоксиде кремния SiO₂ имеются нарушения структуры, которые могут служить ловушками для ионов Na⁺. Полагаем, что ионы Na⁺ в процессе своего транспорта могут захватываться на такие нейтральные ловушки T⁰ в оксиде МОП-структуры с образованием положительно заряженных комплексов NT⁺:



где k_1 и k_2 – константы скоростей прямой и обратной реакций.

Система диффузионно-дрейфовых уравнений непрерывности и уравнения Пуассона, описывающая перенос подвижного заряда с учетом процессов захвата ионов на ловушки по реакции (1), принимает вид:

$$\frac{\partial C_N^+}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_N^+}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial}{\partial x} (C_N^+ E) - k_1 C_N^+ C_T^0 + k_2 C_{NT}^+, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{NT}^+}{\partial t} = -\frac{\partial C_T^0}{\partial t} = k_1 C_N^+ C_T^0 - k_2 C_{NT}^+, \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0} = -\frac{q(C_N^+ + C_{NT}^+)}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (4)$$

где x – координата ($x = 0$ на МФГ Si-SiO₂ и $x = d$ на МФГ SiO₂-затвор, d – толщина оксида); t – продолжительность ТПО; C_T^0 – концентрация нейтральных ловушек T^0 , C_N^+ и C_{NT}^+ – концентрации свободных ионов натрия Na⁺ и положительно заряженных комплексов NT⁺; V – распределение потенциала в диэлектрике; $E = -\frac{dV}{dx}$ – напряженность электрического поля; μ – подвижность ионов; D – коэффициент диффузии ионов, $D = \mu \frac{kT}{q}$ (по соотношению Эйнштейна), k – постоянная Больцмана ($k = 8.617 \cdot 10^{-5}$ эВ/К), T – абсолютная температура, q – элементарный заряд ($q = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл); ε – относительная диэлектрическая проницаемость ($\varepsilon(\text{SiO}_2) = 3.9$); ε_0 – электрическая постоянная ($\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м).

Начальными условиями для решения системы уравнений (2) – (3) является равномерное распределение свободных ионов натрия и нейтральных ловушек:

$$C_N^+(x, 0) = C_{N0}^+, C_T^0(x, 0) = C_{T0}^0. \quad (5)$$

Полагаем, что комплексы находятся в состоянии равновесия со свободными ионами натрия и нейтральными ловушками:

$$C_{NT}^+(x, 0) = k_{12} C_{N0}^+ C_{T0}^0, \quad (6)$$

где k_{12} – константа равновесия реакции (1), $k_{12} = k_1/k_2$.

При диффузионном ограничении константа скорости прямой реакции (1) определяется коэффициентом диффузии подвижных ионов: $k_1 = 4\pi R D$, где $R \cong 1 \text{ \AA}$ – эффективный радиус сечения захвата иона натрия на ловушку T^0 . Обратная реакция происходит со скоростью, зависящей от энергии связи иона с ловушкой E_b : $k_2 = \nu \exp(-\frac{E_b}{kT})$, где ν – частота колебаний атомов, $\nu = 10^{12} \text{ с}^{-1}$.

Граничными условиями полагаются отражающие для ионов примеси границы диэлектрика:

$$j(0, t) = j(d, t) = 0, \quad (7)$$

где j – поток ионов примеси, $j(x, t) = -D \frac{\partial C_N^+}{\partial x} + \mu C_N^+ E$.

На затвор подано постоянное положительное смещение V_G .

На концентрации компонентов реакции (1) действуют условия сохранения интегральных концентраций пустых и заполненных ловушек Q_T и примеси в свободном и связанном состоянии Q_N .

После сложения уравнений (2) и (3) при условии равновесия (6) общая система уравнений (2)-(4) примет вид уравнения переноса для суммарной концентрации ионов $C_\Sigma = C_N^+ + C_{NT}^+$ в электрическом поле:

$$\frac{\partial C_\Sigma}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (D_{eff} \frac{\partial C_\Sigma}{\partial x}) - \mu_{eff} \frac{\partial}{\partial x} (C_\Sigma E), \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{qC_{\Sigma}}{\epsilon\epsilon_0}. \quad (9)$$

где

$$D_{eff} = \frac{D}{1+k_{12}C_T^0}, \mu_{eff} = \frac{\mu}{1+k_{12}C_T^0}. \quad (10)$$

Отметим, что уравнение (8) справедливо только в состоянии равновесия при $t \gg \tau_1 = 1/k_2$ и при $t \gg \tau_2 = 1/(k_1 \cdot C_T^0)$.

3. Результаты расчётов

Температурная зависимость подвижности и коэффициента диффузии ионов Na^+ в SiO_2 от температуры описывается авторами [3-5,7,8] уравнением Аррениуса:

$$\mu = \mu_0 \exp\left(-\frac{E_{a\mu}}{kT}\right), \quad D = D_0 \exp\left(-\frac{E_{aD}}{kT}\right),$$

где μ_0, D_0 – предэкспоненциальные множители, E_a – энергия активации.

В качестве исходных параметров для подвижности ионов Na выбраны $E_{a\mu} = 0.44$ эВ и $\mu_0 = 3.5 \cdot 10^{-4}$ см²/В·с из работы [3], в которой они определялись методом изотермического переходного ионного тока (ИТИС).

На рис. 1 представлена рассчитанная зависимость $C_{\Sigma}(x)$ по толщине оксидной плёнки при термополевой обработке ($T = 100$ °С, $V_G = 1$ В, $t = 60$ с) для различных Q_T .

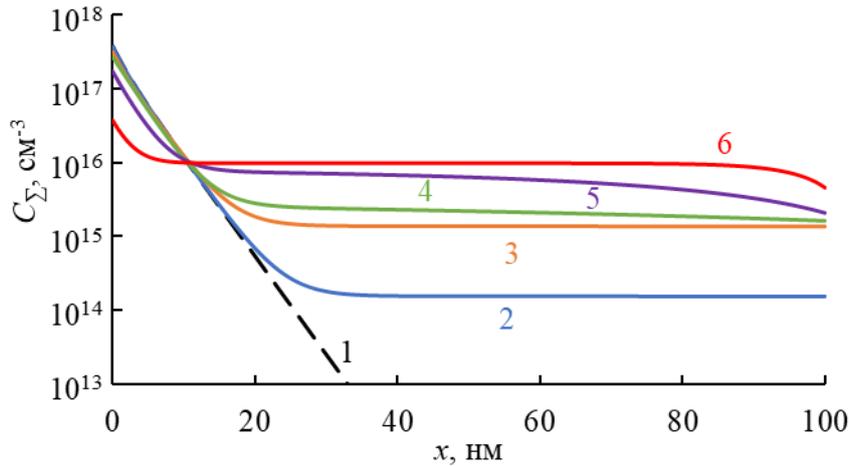


Рисунок 1. Зависимость $C_{\Sigma}(x)$ при $Q_T, \text{см}^{-2}$: 1 – 0, 2 – 10^{10} , 3 – 10^{11} , 4 – 10^{13} , 5 – 10^{14} , 6 – 10^{15} ($d = 100$ нм, $Q_{\text{Na}} = 10^{11}$ см⁻², $E_b = 1$ эВ, $R = 1$ Å, $T = 100$ °С, $V_G = 1$ В, $t = 60$ с).

На рис. 2(а) показаны зависимости $D_{eff}(C_T^0)$ при различных E_b и T , построенные по уравнению (10). Полученные кривые имеют две области: область, в которой $D_{eff} = D$ при $C_T^0 < 1/k_{12}$, и область экспоненциального уменьшения D_{eff} при $C_T^0 > 1/k_{12}$. С ростом энергии связи натрия с ловушкой E_b область, в которой $D_{eff} = D$ сокращается. С ростом температуры эффективный коэффициент диффузии D_{eff} увеличивается, а область экспоненциального падения D_{eff} начинается при больших концентрациях ловушек.

Тангенс угла наклона на рис. 2(а) определяет эффективную энергию активации $E_{a,eff}$. Предполагая, что для D_{eff} справедливо уравнение Аррениуса, выведем соответствующую формулу для $E_{a,eff}$:

$$E_{a,eff} = -k \partial \ln\left(\frac{D_{eff}}{D_0}\right) / \partial \frac{1}{T}. \quad (11)$$

где $D_0 = 3 \cdot 10^{-5}$ см²/с, $E_{aD} = 0.47$ эВ – параметры диффузии по [3].

По формуле (11) были рассчитаны представленные на рис. 2(б) зависимости $E_{a,eff}(C_T^0)$ при различных E_b и T . При малых концентрациях ловушек $E_{a,eff} = E_{aD}$, с ростом

C_T^0 значение $E_{a\text{eff}}$ переходит в значение E_b . С ростом E_b или с падением T переход от E_{aD} к E_b происходит при меньших концентрациях C_T^0 .

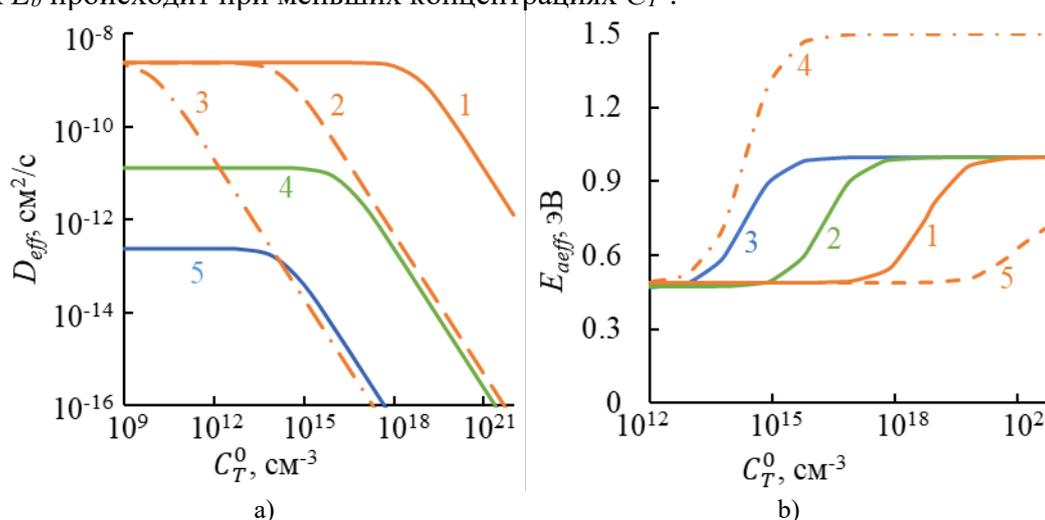


Рисунок 2. а) Зависимости $D_{\text{eff}}(C_T^0)$ при $T = 300$ °С: 1 – $E_b = 1$ эВ, 2 – $E_b = 1.5$ эВ, 3 – $E_b = 2$ эВ; 4 – $E_b = 1$ эВ, $T = 100$ °С; 5 – $E_b = 1$ эВ, $T = 20$ °С ($R = 1$ Å). б) Зависимости $E_{a\text{eff}}(C_T^0)$ при $E_b = 1$ эВ: 1 – $T = 300$ °С, 2 – $T = 100$ °С, 3 – $T = 20$ °С; 4 – $E_b = 1.5$ эВ, $T = 300$ °С; 5 – $E_b = 0.75$ эВ, $T = 300$ °С ($R = 1$ Å).

4. Обсуждение результатов

Из рис. 1 можно видеть, что с увеличением Q_T накопление Na вблизи МФГ Si = SiO₂ замедляется. Уменьшение поверхностной концентрации натрия вблизи МФГ становится заметным при $Q_T > 10^{13}$ см⁻² (рис. 1, кривая 5). С ростом Q_T зависимость $C_{\Sigma}(x)$ стремится к начальному равномерному распределению примеси (рис. 1, кривая 6).

Из рис. 2(а) видно, что при определённом значении концентрации не занятых натрием ловушек C_T^0 коэффициент диффузии плавно переходит на область экспоненциального снижения с ростом C_T^0 . Область перехода можно видеть на рис. 2(б), как область с концентрациями C_T^0 при которых $E_{a\text{eff}}$ начинает расти от значения E_a («быстрый» процесс миграции) до значения E_b («медленный» процесс миграции). Повышение температуры T (равно как и снижение E_b) увеличивает необходимую для перехода $E_a \rightarrow E_b$ концентрацию свободных ловушек C_T^0 .

Параметры миграции Na из различных литературных источников [3,4,6-8] приведены в табл. 1 и на рис. 3 в виде зависимости $D(1/T)$. Из рисунка виден большой разброс в экспериментальных данных. С помощью предлагаемой модели и данных [3] рассчитаны параметры E_b и C_T^0 для коэффициентов диффузии D и энергий активации E_a из [6]. Однако данные [4,7,8] ($E_a = 0,63-0,7$ эВ) невозможно описать данными [3]. В связи с этим, проведен расчет также по данным [8], имеющим наибольший предэкспоненциальный множитель ($\mu_0 = 46$ см²/В·с, $E_{a\mu} = 0.63$ эВ). Результаты моделирования представлены в табл. 1 и на рис. 4 (сплошные линии) вместе с экспериментальными данными (пунктирные линии).

Таблица 1. Экспериментальные данные и результаты моделирования

| Параметры рассматриваемых источников | | | Параметры ловушек, рассчитанные по данным [3] и [8] | |
|--------------------------------------|------------|------------------------------------------|-----------------------------------------------------|----------------------------|
| Источник | E_a , эВ | D при $T = 150$ °С, см ² /с | E_b , эВ | C_T^0 , см ⁻³ |
| [6,1] | 1 | $2 \cdot 10^{-13}$ | 1 | $5 \cdot 10^{19}$ |
| [6,2] | 1.4 | $3 \cdot 10^{-15}$ | 1.4 | $5.5 \cdot 10^{16}$ |

| Параметры рассматриваемых источников | | | Параметры ловушек, рассчитанные по данным [8] | |
|--------------------------------------|------------|--------------------------------|-----------------------------------------------|----------------------------|
| Источник | E_a , эВ | μ_0 , см ² /В·с | E_b , эВ | C_T^0 , см ⁻³ |
| [7] | 0.7 | 40 | 0.75 | $1.2 \cdot 10^{18}$ |
| [4] | 0.66 | 1.05 | 0.69 | $9 \cdot 10^{19}$ |

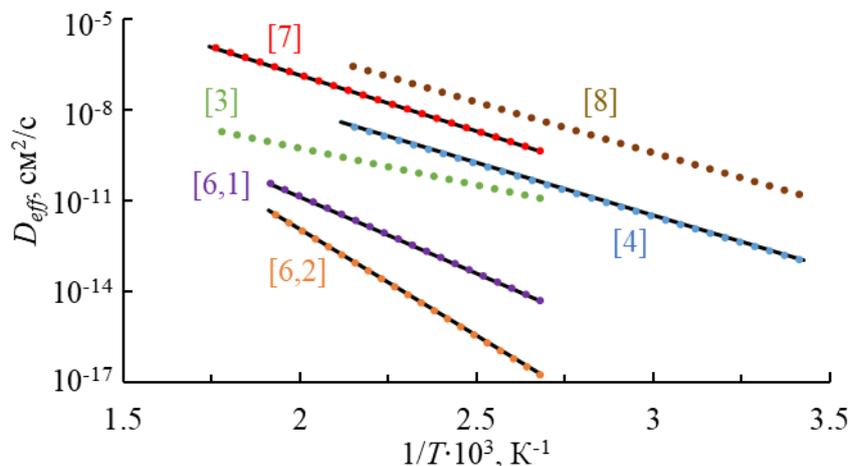


Рисунок 3. Зависимости $D_{eff}(1/T)$, где пунктирные линии – эксперимент, сплошные – расчет по модели.

5. Выводы и заключение

Разработана количественная модель перераспределения подвижного заряда в МОП-структурах при ТПО, учитывающая наличие ловушек для свободных ионов примеси. Показано, что захват примеси на ловушки приводит к замедлению накопления подвижного заряда (рис. 1), уменьшению эффективного коэффициента диффузии (рис. 2(a)) и увеличению эффективной энергии активации (рис. 2(b)). Рост концентрации подвижного заряда приводит к увеличению эффективного коэффициента диффузии и снижению энергии активации. Показано, что в рамках модели большой разброс литературных данных по величинам D и E_a для примеси Na (рис. 3) может быть объяснён захватом свободных ионов Na^+ на ловушки, концентрация которых зависит от технологии получения SiO_2 .

Список литературы

1. Snow E. H. et al. Ion Transport phenomena in insulating films //Journal of Applied Physics. – 1965. – Т. 36. – №. 5. – С. 1664-1673.
2. Verwey J. F., Ameskera E.A. and Bisschop J. The physics of SiO_2 layers //Reports on Progress in Physics. – 1990. – Т. 53. – №. 10. – С. 1297-1331.
3. Greeuw G. and Verwey J. F. The mobility of Na^+ , Li^+ , and K^+ ions in thermally grown SiO_2 films //Journal of Applied Physics. – 1984. – Т. 56. – №. 8. – С. 2218-2224.
4. Stagg J. P. Drift mobilities of Na^+ and K^+ ions in SiO_2 films //Applied Physics Letters. – 1977. – Т. 31. – №. 8. – С. 532-533.
5. Hofstein S. R. Proton and sodium transport in SiO_2 films //IEEE Transactions on Electron Devices. – 1967. – Т. 14. – №. 11. – С. 749-759.
6. Takuo Sugano et al. Ordered structure and ion migration in silicon dioxide films //Japanese Journal of Applied Physics. – 1968. – Т. 7. – №. 7. – С. 715-730.
7. Hofstein S. R. Space-charge-limited ionic currents in silicon dioxide films //Applied Physics Letters. – 1967. – Т. 10. – №. 10. – С. 291-293.
8. Kriegler R. J. and Devenyi T. F. Direct measurement of Na^+ ion mobility in SiO_2 films //Thin Solid Films. – 1976. – Т. 36. – №. 2. – С. 435-439.