

# Асимметричное поведение МОП-структур при термополевых обработках

О.В. Александров, Н.Н. Морозов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

**Аннотация:** Разработана количественная модель поведения МОП-структур при термополевых обработках в режимах накопления и восстановления подвижного заряда в подзатворном диэлектрике. Транспорт подвижного заряда рассматривается на основе модели захвата подвижных ионов на полиэнергетические ловушки с диапазоном энергий связи. Проведено моделирование временных зависимостей смещения порогового напряжения МОП-структур при положительном и последующем отрицательном смещении затвора. Предложенная модель позволяет описать экспериментальное асимметричное поведение МОП-структур, содержащих ионы  $\text{Na}^+$ . Определены диапазон энергий связи и области локализации ловушек.

**Ключевые слова:** МОП-структура, подзатворный диэлектрик, подвижный заряд, термополевая обработка.

## 1. Введение

При термополевых обработках (ТПО) МОП-структур с положительным напряжением на затворе может наблюдаться нестабильность порогового напряжения (Positive Bias Temperature Instability (PBTI)) [1,2]. Явление связывается с транспортом подвижных ионов примесей щелочноземельных металлов (в основном  $\text{Na}^+$ ) от затвора к кремниевой подложке в электрическом поле подзатворного диэлектрика. Для описания кинетики накопления подвижного заряда при ТПО были предложены две основные модели: диффузионная модель Сноу [3] и модель пограничного захвата (interface trapping model) Хофстейна [4,5]. В первой модели перенос подвижного заряда от затвора к Si-подложке определяется скоростью диффузии и дрейфа свободных ионов примеси в диэлектрике. Величина накопленного подвижного заряда пропорциональна корню квадратному из времени ТПО:

$$Q \sim \sqrt{t}. \quad (1)$$

Во второй модели скорость накопления заряда определяется скоростью освобождением примеси с межфазной границы (МФГ) диэлектрика с затвором. В этом случае:

$$Q = Q_0(1 - \exp(-t / \tau)), \quad (2)$$

где  $Q_0$  – начальный заряд,  $\tau$  – постоянная времени,  $\tau^{-1} = \nu \cdot \exp(-E / kT)$ ,  $\nu$  – частотный фактор,  $E$  – энергия связи,  $T$  – температура ТПО,  $k$  – постоянная Больцмана.

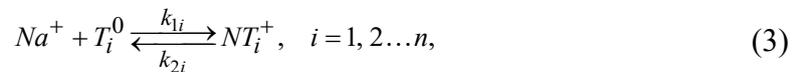
При смене полярности происходит уменьшение (восстановление) заряда у Si-подложки вследствие его обратного перемещения к затвору. По диффузионной модели оно должно происходить с той же скоростью, как и накопление (симметричное поведение). А по модели пограничного захвата восстановление должно происходить значительно быстрее, чем накопление (асимметричное поведение) вследствие высокой скорости транспорта свободной примеси. На практике наблюдаются оба варианта, причём кинетики накопления и восстановления отклоняются от простых зависимостей (1) и (2) [3,4].

Отклонение может быть связано с захватом примеси на ловушки, находящиеся в объёме диэлектрика и приводящие к замедлению скорости переноса ионов примеси [6]. Причём в структуре аморфного диоксида кремния ловушки могут быть не моно-, а полиэнергетическими, то есть иметь разброс (дисперсию) по энергиям связи.

Целью работы является разработка модели поведения МОП-структур при ТПО, учитывающая захват примеси на ловушки в объёме подзатворного диэлектрика.

## 2. Уравнения модели

В подзатворном диэлектрике МОП-структуры (аморфном диоксиде кремния SiO<sub>2</sub>) имеются нарушения структуры (например, кислородные вакансии), которые могут служить ловушками для подвижных ионов примеси. Полагаем, что ионы примеси в процессе своего транспорта могут захватываться на нейтральные ловушки  $T_i^0$  в объёме диоксида кремния с образованием положительно заряженных комплексов  $NT_i^+$ :



где  $k_{1i}$  и  $k_{2i}$  – константы скоростей прямой и обратной реакций примеси с  $i$ -ой ловушкой. Система диффузионно-дрейфовых уравнений непрерывности и уравнения Пуассона, описывающая транспорт ионов примеси по реакции (1), принимает вид:

$$\frac{\partial C_N^+}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_N^+}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial}{\partial x} (C_N^+ E) - C_N^+ \sum_{i=0}^n k_{1i} C_{T_i}^0 + \sum_{i=0}^n k_{2i} C_{NT_i}^+, \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_{NT_i}^+}{\partial t} = - \frac{\partial C_{T_i}^0}{\partial t} = k_{1i} C_N^+ C_{T_i}^0 - k_{2i} C_{NT_i}^+, \quad i = 1, 2 \dots n, \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0} = - \frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (C_N^+ + \sum_{i=1}^n C_{NT_i}^+), \quad (6)$$

где  $x$  – координата ( $x = 0$  на МФГ Si-SiO<sub>2</sub> и  $x = d$  на МФГ SiO<sub>2</sub>-металлический затвор,  $d$  – толщина оксида);  $t$  – время ТПО;  $C_N^+$  – концентрация свободных ионов примеси  $N^+$ ,  $C_{T_i}^0$  – концентрация нейтральных ловушек  $T_i^0$ ,  $C_{NT_i}^+$  – концентрация положительно заряженных комплексов  $NT_i^+$ ;  $V$  – распределение потенциала в диэлектрике;  $E$  – напряженность электрического поля,  $E = -\frac{dV}{dx}$ ;  $\mu$  – подвижность

свободных ионов;  $D$  – коэффициент диффузии свободных ионов,  $D = \mu \frac{kT}{q}$  (по соотношению Эйнштейна),  $q$  – элементарный заряд ( $q = 1.6 \cdot 10^{-19}$  Кл);  $\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость ( $\varepsilon(\text{SiO}_2) = 3.9$ );  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная ( $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м). Температурная зависимость подвижности ионов примеси в аморфном SiO<sub>2</sub> описывается уравнением Аррениуса [7]:  $\mu = \mu_0 \exp(-\frac{E_a}{kT})$ , где  $\mu_0$  – предэкспоненциальный множитель,  $E_a$  – энергия активации. По данным работы [7], в которой подвижность ионов Na<sup>+</sup> в SiO<sub>2</sub> определялась методом термостимулированного ионного тока,  $\mu_0 = 1.05$  см<sup>2</sup>/В·с,  $E_a = 0.66$  эВ.

Полагаем, что захват иона на различные ловушки  $T_i^0$  равновероятен и при диффузионном ограничении константа скорости прямой реакции (1) определяется коэффициентом диффузии свободных ионов:  $k_{1i} = k_1 = 4\pi R D$ , где  $R$  – эффективный радиус сечения захвата иона на ловушку,  $R \cong 1$  Å. Обратная реакция происходит со

скоростью, зависящей от энергии связи иона с  $i$ -ой ловушкой  $E_{bi}$ :  $k_{2i} = \nu \exp(-\frac{E_{bi}}{kT})$ , где  $\nu$  – частота колебаний атомов,  $\nu = 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . Энергия связи равномерно распределена внутри диапазона от  $E_{b1}$  до  $E_{bn}$ :  $E_{bi} = E_{b1} + \Delta E_{bi}i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , где  $\Delta E_{bi} = \frac{E_{bn} - E_{b1}}{n}$ .

Полагаем, что распределение ловушек по энергиям имеет экспоненциальный вид, характерный для аморфных материалов [8]:

$$C_{Ti}(x, E_{bi}) = C_T(x) \frac{1}{E_0} \exp(-\frac{E_{bi}}{E_0}), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (7)$$

где  $E_0$  – характеристическая энергия,  $C_{Ti}(x, E_{bi})\Delta E_{bi}$  – концентрация ловушек с энергиями от  $E_{bi}$  до  $E_{bi} + \Delta E_{bi}$ . Полагаем, что примесь сосредоточена экспоненциально вблизи затвора, а ловушки распределены экспоненциально вблизи обоих МФГ:

$$C_{Nsum}^+(x) = \frac{Q_{NMe}^+}{L_{Me}} \exp(-\frac{d-x}{L_{Me}}), \quad (8)$$

$$C_T(x) = \frac{Q_{TSi}}{L_{Si}} \exp(-\frac{x}{L_{Si}}) + \frac{Q_{TMe}}{L_{Me}} \exp(-\frac{d-x}{L_{Me}}), \quad (9)$$

где  $Q_{NMe}^+$  – интегральная концентрация примеси вблизи МФГ SiO<sub>2</sub>-затвор,  $Q_{TSi}$ ,  $Q_{TMe}$  – интегральные концентрации ловушек вблизи МФГ Si-SiO<sub>2</sub> и МФГ SiO<sub>2</sub>-затвор, соответственно,  $L_{Si}$  – ширина распределения ловушек вблизи МФГ Si-SiO<sub>2</sub>,  $L_{Me}$  – ширина распределения ловушек и примеси вблизи МФГ Si-затвор.

Полагаем, что в начальный момент времени заряженные комплексы находятся в состоянии равновесия со свободными ионами примеси и нейтральными ловушками:

$$k_1 C_{Ti}^0 C_N^+ = k_{2i} C_{NTi}^+, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (10)$$

Граничными условиями полагаются отражающие для ионов примеси границы диэлектрика:

$$j(0, t) = j(d, t) = 0, \quad (11)$$

где  $j$  – поток ионов примеси,  $j(x, t) = -D \frac{\partial C_N^+}{\partial x} + \mu C_N^+ E$ . На затвор подаётся постоянное смещение  $V(d, t) = V_G$ . Сдвиг порогового напряжения  $\Delta V_{th}$  определяется выражением:

$$\Delta V_{th}(t) = \frac{q}{C_{ox}} \int_0^d (C_N^+(x, t) - C_N^+(x, 0)) \frac{d-x}{d} dx, \quad (12)$$

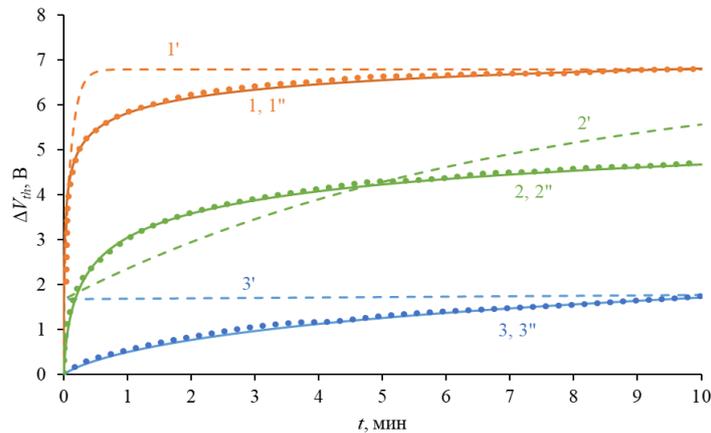
где  $C_{ox} = \frac{\epsilon \epsilon_0}{d}$  – удельная ёмкость диэлектрика.

### 3. Результаты расчетов и обсуждение

Система уравнений модели (4)–(6) с начальными условиями (8)–(10), граничными условиями (11) с учётом (7) и (12) решалась численно с использованием явных и неявных разностных схем. Результаты расчётов сравнивались с экспериментальными данными работы [9], в которой МОП-структура имела алюминиевый затвор, а подзатворный оксид создавался термическим окислением при температуре 1150°C и имел толщину 120 нм. Структуры загрязнялись натрием в процессе напыления Al в

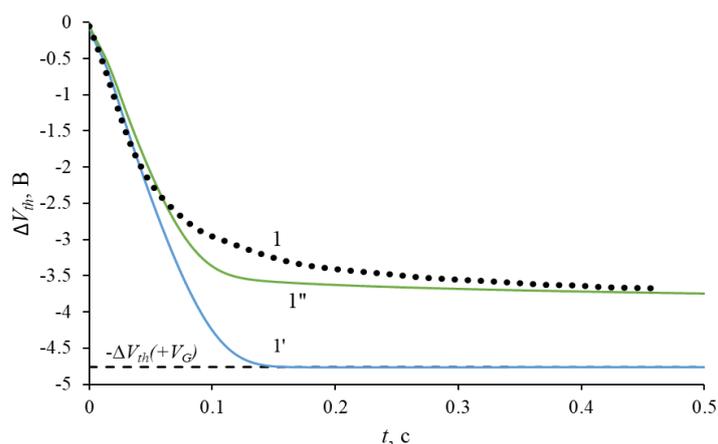
количестве  $\sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . ТПО осуществлялись при температурах 75, 120 и 175 °C при смещении затвора  $V_G = +2 \text{ В}$  в режиме накопления заряда и при  $V_G = -1 \text{ В}$  в режиме восстановления.

На рис. 1 представлены кинетики изменения порогового напряжения зависимости при положительном смещении: экспериментальные (кр. 1-3), рассчитанные при моноэнергетических ( $E_b = 1.14 \text{ эВ}$ ) ловушках (кр. 1'-3') и при полиэнергетических ( $E_{b1} = 0.9 \text{ эВ}$ ,  $E_{bn} = 1.4 \text{ эВ}$ ) ловушках (кр. 1''-3''). Как видно из рис.1, только расчёт при полиэнергетических ловушках позволяет адекватно описать экспериментальные зависимости. Нижняя граница энергетического диапазона ловушек принималась  $E_{b1} = 0.9 \text{ эВ}$ , поскольку при меньших значениях расчет не приводит к изменению кривых вследствие быстрого опустошения ловушек с малыми  $E_{b1}$ . Верхняя граница диапазона  $E_{bn} = 1.4 \text{ эВ}$ , принималась равной наибольшей энергии активации, зафиксированной экспериментально для диффузии ионов натрия [10]. Ширина экспоненциального распределения вблизи затвора  $L_{Me} = 2 \text{ нм}$  была выбрана исходя из того, что при отрицательном напряжении смещения порогового напряжения при ТПО не наблюдается (в данном случае смещение составляло  $\Delta V_{th} = 0.003 \text{ В}$  при  $T = 120 \text{ °C}$ ,  $V_G = -2 \text{ В}$ ). Число энергетических уровней ловушек внутри диапазона принималось  $n \geq 30$ , когда решение переставало зависеть от  $n$ .



**Рисунок 2.** Зависимости  $\Delta V_{th}(t)$  при ТПО (режим накопления  $V_G = +2 \text{ В}$ ) для температур, °C: 1, 1', 1'' – 175; 2, 2', 2'' – 120; 3, 3', 3'' – 75 °C. Кривые 1-3 – эксперимент [9], 1'-3' – расчёт при моноэнергетических ловушках ( $E_b = 1.14 \text{ эВ}$ ,  $Q_{N^+Me} = 1.25 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ,  $Q_{TMe} = 9.4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ,  $L_{Me} = 2 \text{ нм}$ ), 1''-3'' – расчёт при полиэнергетических ловушках ( $E_{b1} = 0.9 \text{ эВ}$ ,  $E_{bn} = 1.4 \text{ эВ}$ ,  $E_0 = 0.25 \text{ эВ}$ ,  $Q_{N^+Me} = 1.4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ,  $Q_{TMe} = 9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ ,  $Q_{TSi} = 10^{13} \text{ см}^{-2}$ ,  $L_{Me} = 2 \text{ нм}$ ,  $L_{Si} = 5 \text{ нм}$ ).

Кинетика изменения порогового напряжения в режиме восстановления при  $V_G = -1 \text{ В}$  (после положительного смещения при  $V_G = +2 \text{ В}$ ,  $T = 120 \text{ °C}$ ,  $t = 10 \text{ мин}$ ) показана на рис. 2 (кр.1 – эксперимент [9], кр.1' и 1'' – расчёт по модели с полиэнергетическими ловушками при тех же параметрах, как и на рис.1). Как видно из рисунка 2, восстановление происходит значительно быстрее, чем накопление (асимметричное поведение). На зависимости  $\Delta V_{th}(t)$  можно видеть две области. Начальная область быстрого падения (кр.1', 1'') обусловлена движением примеси от МФГ Si-SiO<sub>2</sub>, угол её наклона характеризуется коэффициентом диффузии свободной примеси. Последующая пологая область обусловлена захватом ионов примеси на ловушки вблизи затвора (кр.1'), а также на ловушки у границы с кремнием (кр.1''). Среди данных для коэффициента диффузии свободного натрия только данные [7] соотносятся с экспериментом.



**Рисунок 3.** Зависимости  $\Delta V_{th}(t)$  при ТПО (режим восстановления,  $V_G = -1$  В,  $T = 120$  °С). 1 – эксперимент [9]; 1' – расчет по модели с ловушками только у затвора ( $Q_{TSi} = 0$ ) и 1'' – с ловушками также и у Si ( $Q_{TSi} = 10^{13}$  см<sup>-2</sup>).

Асимметрия зависимостей  $\Delta V_{th}(t)$  на рис. 2 и 3 в рамках модели объясняется начальным расположением ионов  $\text{Na}^+$  на ловушках вблизи затвора, а также различными концентрациями ловушек вблизи  $\text{SiO}_2$ -затвор ( $Q_{TMe} = 9 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>) и вблизи МФГ Si-SiO<sub>2</sub> ( $Q_{TSi} = 10^{13}$  см<sup>-2</sup>).

#### 4. Заключение

На основе механизма захвата подвижных ионов примеси полиэнергетическими ловушками в объёме подзатворного диэлектрика разработана количественная модель поведения МОП-структур при термополевых обработках. Проведено сравнение расчётов с экспериментальными кинетиками сдвига пороговых напряжений МОП-структур в режимах накопления и восстановления. Определены параметры и области локализации ловушек.

#### Список литературы

1. Grasser T. (ed.). Bias temperature instability for devices and circuits. – Springer Science & Business Media, 2013.
2. Zhang J. F. et al. Bias temperature instability of MOSFETs: physical processes, models, and prediction // Electronics. – 2022. – Т. 11. – №. 9. – С. 1420.
3. Snow E. H. et al. Ion transport phenomena in insulating films //Journal of Applied Physics. – 1965. – Т. 36. – №. 5. – С. 1664-1673.
4. Hofstein S. R. An investigation of instability and charge motion in metal-silicon oxide-silicon structures //IEEE Transactions on Electron Devices. – 1966. – №. 2. – С. 222-237.
5. Hofstein S. R. Proton and sodium transport in SiO<sub>2</sub> films //IEEE Transactions on Electron Devices. – 1967. – Т. 14. – №. 11. – С. 749-759.
6. Александров О. В., Морозов Н. Н. Влияние ловушек на накопление подвижного заряда в МОП-структурах при термополевых обработках //Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». – 2023. – Т. 16. – №. 6. – С. 20-28.
7. Stagg J. P. Drift mobilities of Na<sup>+</sup> and K<sup>+</sup> ions in SiO<sub>2</sub> films //Applied Physics Letters. – 1977. – Т. 31. – №. 8. – С. 532-533.
8. Архипов В. И., Никитенко В. Р. Дисперсионный транспорт в материалах с немонотонным энергетическим распределением локализованных состояний //Физика и техника полупроводников. – 1989. – Т. 23. – №. 6. – С. 978-984.
9. Kriegler R. J., Devenyi T. F. Temperature-bias aging of (HCl) MOS structures // 11th Reliability Physics Symposium. – IEEE, 1973. – С. 153-158.
10. Takuo Sugano et al. Ordered structure and ion migration in silicon dioxide films //Japan. J. Appl. Phys. – 1968. – Т. 7. – №. 7. – С. 715-730.