# УДК 621.382.323

# Модель нестабильности *p*-МОП-транзисторов при отрицательном смещении

#### О.В. Александров, Н.Н. Морозов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Аннотация: Предложена количественная модель накопления поверхностных состояний в *p*-МОП-транзисторах при отрицательном смещении затвора. В основе модели лежит реакция освобождения под действием поля и температуры водорода из пассивированных *Pb*H-центров на межфазной границе кремния с подзатворным диэлектриком. Кинетика накопления поверхностных состояний при малых временах определяется скоростью реакции, а при больших – скоростью диффузионного оттока водорода от межфазной границы с кремниевой подложкой. Показано, что учёт дисперсионного характера переноса водорода в аморфном диэлектрике существенно замедляет процесс диффузии водорода. Промоделировано влияние напряжённости электрического поля и содержания азота в подзатворном диэлектрике.

**Ключевые слова:** Нестабильность МОП-структур, поверхностные состояния, дисперсионный транспорт водорода, моделирование.

### 1. Введение

При отрицательном смещении затвора и повышенных температурах (100-250°С) в *p*-МОП-транзисторах наблюдается накопление поверхностных состояний (ПС) и объёмного заряда. Такая отрицательная термополевая нестабильность (ОТПН) представляет серьёзную проблему для надёжности современных МОП интегральных схем (см. обзоры [1-3]).

работах Для описания явления В [4,5] была предложена реакционно-диффузионная модель (Р-Д модель), а в работах [6-8] разработан ряд её модификаций. Основой моделей являются реакции освобождения под действием электрического поля и температуры водорода с пассивированных ПС на межфазной границе (М $\Phi\Gamma$ ) Si-SiO<sub>2</sub> в виде нейтральных атомов H<sup>0</sup> [6], положительно заряженных ионов (протонов) H<sup>+</sup> [7] или молекул H<sub>2</sub> [8]. Общим недостатком этих моделей является чрезвычайно малые коэффициенты диффузии водорода в SiO<sub>2</sub> [2], на несколько порядков меньшие экспериментальных значений, определённых в [9,10]. Причиной такого несоответствия может быть неучёт дисперсионного характера переноса водорода в аморфном подзатворном диэлектрике.

При перемещении в неупорядоченной структуре аморфного диэлектрика водород захватываются на локализованные состояния (ловушки), на которых задерживается на время, зависящее от энергии связи, лежащей в определённом диапазоне. Такой дисперсионный транспорт описывается моделью случайных блужданий с непрерывным временем (CTRW) [11] или моделью многократного захвата (M3) [12]. Модель МЗ физически более наглядна, чем модель CTRW и имеет более простую численную реализацию.

Целью настоящей работы является разработка количественной модели накопления поверхностных состояний в *p*-МОП-транзисторах при отрицательном смещении затвора с учётом дисперсионного характера переноса водорода в подзатворном диэлектрике.

# 2. Уравнения модели

При отрицательном смещении выше порогового в подзатворной области

кремниевой подложки p-МОП-транзисторов образуется инверсный p-слой. Под действием электрического поля и повышенной температуры в присутствии электронов, инжектируемых затвором, и дырок кремния на МФГ с диэлектриком происходит реакция развала *Pb*H-центров с освобождением водорода:

$$PbH + e^{-} + h^{+} \underbrace{\stackrel{k_{1S}}{\longleftarrow} Pb + H}_{k_{2S}} Pb + H, \qquad (1)$$

где  $k_{1S}$  и  $k_{2S}$  – константы скоростей прямой и обратной реакций.

Скорость образования ПС определяется кинетикой реакции (1):

$$\frac{\partial Q_{Pb}}{\partial t} = k_{1S} Q_{PbH} - k_{2S} Q_{Pb} C_{H}, \qquad (2)$$

где  $Q_{PbH}$  и  $Q_{Pb}$  – плотности пассивированных  $P_b$ H- и непассивированных  $P_b$ -центров (плотность ПС  $Q_{it} = Q_{Pb}$ ,  $Q_{PbH} = Q_{PbH}^0 - Q_{Pb}$ ),  $Q_{PbH}^0$  – начальная плотность пассивированных  $P_b$ H-центров;  $C_H$  – концентрация свободного водорода на МФГ кремния с диэлектриком.

В отличие от кристаллических тел в аморфных диэлектриках сохраняется только ближний порядок и отсутствует дальний порядок. Соответственно, имеется дисперсия энергий связи атомов водорода с локализованными состояниями. В соответствии с моделью МЗ непрерывное распределение локализованных состояний по энергиям заменяется на систему k ловушек с дискретными уровнями  $E_{bi}$ , соответствующими энергии связи атома H с *i*-той ловушкой. Захват атомов водорода H на ловушки  $S_i$  происходит согласно реакции:

$$S_i + H \xleftarrow{k_{1i}}{\underset{k_{2i}}{\overset{k_{1i}}{\longleftarrow}}} SH_i, \quad i = 1, 2...k,$$
(3)

где  $k_{1i}$  и  $k_{2i}$  – константы скорости прямой и обратной реакции (3).

При таком многократном захвате и освобождении водорода с *k* локализованных состояний в соответствии с реакцией (3) уравнения дисперсионного транспорта водорода принимают вид:

$$\frac{\partial C_{\rm H}}{\partial t} = D_{\rm H} \frac{\partial^2 C_{\rm H}}{\partial x^2} - C_{\rm H} \sum_{i=1}^k k_{1i} C_{Si} + \sum_{i=1}^k k_{2i} C_{S{\rm H}i},\tag{4}$$

$$\frac{\partial C_{SHi}}{\partial t} = -\frac{\partial C_{Si}}{\partial t} = k_{1i}C_{\rm H}C_{Si} - k_{2i}C_{SHi}, \quad i = 1, 2...k,$$
(5)

где t – время; x –координата, отсчитываемая от Si-подложки при x = 0 до затвора при x = d (d – толщина подзатворного диэлектрика);  $C_{Si}$  и  $C_{SHi}$  – текущие концентрации i-тых ловушек и локализованных на них атомов водорода, соответственно;  $D_{\rm H}$  – коэффициент диффузии водорода.

Распределение плотности локализованных состояний по энергии имеет экспоненциальный вид, характерный для некристаллических материалов [12]:

$$C_{Si}(E_{bi}) = \frac{C_S}{E_0} \exp(-\frac{E_{bi}}{E_0}), \quad i = 1, 2...k,$$
(6)

где  $C_{Si}(E_{bi})\Delta E_{bi}$  – концентрация локализованных состояний с энергиями от  $E_{bi}$  до  $E_{bi}$  +  $\Delta E_{bi}$ ,  $\Delta E_{bi} = (E_{bk} - E_{b1})/k$ ;  $E_0$  – характеристическая энергия. Энергии связи  $E_{bi}$  лежат в определённом диапазоне от  $E_{b1}$  до  $E_{bk}$ ,  $E_{bi} = E_{b0} + \Delta E_{bi} \cdot i$ , i = 1, 2...k. Полная концентрация локализованных состояний в этом диапазоне определяется как:

$$C_S = \sum_{i=1}^k C_{Si}(E_{bi}) \Delta E_{bi}.$$

Полагаем, что в начальный момент времени все ловушки пустые и располагаются равномерно по толщине диэлектрика:

$$C_S(x,0) = C_{S0}.$$
 (7)

Граничное условие для свободного водорода на МФГ Si-SiO<sub>2</sub> определяется из условия равенства диффузионного потока атомов водорода в диэлектрик и скорости его освобождения на МФГ:

$$j_{\rm H} = -D_{\rm H} \frac{\partial C_{\rm H}}{\partial x} = k_{1S} Q_{Pb\rm H} - k_{2S} Q_{Pb} C_{\rm H}, \qquad (8)$$

где *j*<sub>H</sub> – поток атомов водорода. Затвор является стоком для свободного водорода:

$$C_{\rm H}(d,t) = 0.$$
 (9)

Полагалось, что все ловушки захватывают атомы водорода с одинаковой скоростью:  $k_{1i} = k_1 = 4\pi R_{\rm H}D_{\rm H}$ , где  $R_{\rm H}$  – радиус захвата,  $R_{\rm H} = 10$  Å,  $D_{\rm H}$  - коэффициент диффузии водорода в аморфном SiO<sub>2</sub>,  $D_{\rm H} = 1.0 \cdot \exp(-0.73 / k_B T)$  [10],  $k_B$  – постоянная Больцмана; T – температура. Освобождение атомов водорода с ловушек происходит со скоростью, зависящей от энергии связи иона с ловушкой  $E_{bi}$ ,  $k_{2i} = v \exp(-E_{bi} / k_B T)$ , где v – частотный фактор,  $v = 10^{12} \text{ c}^{-1}$ . При расчёте использовались следующие значения параметров:  $Q_{PbH}^0 = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  [13];  $E_0 = 0.07$  эВ [14];  $C_S = 2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ,  $E_{b1} = 0.87$  эВ;  $E_{bk} = 0.94$  эВ [15]. Зависимости  $k_{1S}$  и  $k_{2S}$  от напряжённости электрического поля и от содержания азота в диоксиде кремния определялась из сопоставления с экспериментальными зависимостями.

#### 3. Результаты расчетов

Уравнения модели (4), (5) решались численно с использованием неявной и явной разностных схем с начальным условием (7), граничными условиями (8), (9) с учётом (6). Решения сравнивались с экспериментальными данными [6, 16] по кинетике изменения плотности поверхностных состояний в МОП-транзисторах при ОТПН.

На рис. 1 показано влияние электрического поля в оксиде на образование ПС при ОТПН по данным работы [16] (значки 1-4) при температуре  $T = 125^{\circ}$ С, d = 2.6 нм в сравнении с расчётом (кривые 1'- 4'). Влияние поля при расчёте учитывалось через константу  $k_{1S}$  прямой реакции (1) в виде экспоненциальной зависимости от напряженности [17]:

$$k_{1S} = k_{1S0} \exp(BE_{ox}),$$
 (10)

где  $E_{ox}$  – напряжённость электрического поля на МФГ Si-SiO<sub>2</sub>,  $k_{1S0}$  – константа  $k_{1S}$  при  $E_{ox} = 0$  ( $k_{1S0} = 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ ), B – коэффициент (B = 1.15 при  $E_{ox}$  в MB/см).

Как видно из рисунка, с увеличением напряжённости электрического поля плотность ПС увеличивается. Это происходит вследствие увеличения вероятности туннелирования электронов из затвора и дырок из инверсного *p*-слоя кремния на МФГ Si-SiO<sub>2</sub> под действием поля.

На рис. 2 показаны кинетики накопления ПС при ОТПН в МОП-транзисторах с различным содержанием азота в диоксиде кремния (кр. 1-3) по данным работы [6]. Толщина оксида составляла 1.8 нм, напряжённость поля во всей МОП-структуре:  $E_d = -V_G/d = 12.2$  МВ/см ( $V_G = -2.2$  В), температура T = 125°С.



**Рисунок 1.** Влияние на образование ПС напряженности электрического поля в оксиде  $E_{ox}$ , MB/см: 1,1' – 5.7; 2,2' – 6.9; 3,3' – 8.0; 4,4' – 9.1. 1 – 4 – эксперимент [16], 1' – 4' – расчёт при  $k_{1S}$  по формуле (10),  $k_{2S} = 5.6 \cdot 10^{-9}$  см<sup>3</sup>/с.

Как видно из рисунка, введение азота усиливает эффект ОТПН. Полагаем, что это происходит вследствие накопления азота на МФГ с кремнием, обнаруженного в работе [18]. Накопленный азот ослабляет взаимодействие водорода с Pb-центрами и тем самым снижает скорость обратной реакции (1). Влияние азота учитываем при расчёте (кривые 1'-3') через константу скорости обратной реакции (1) в виде зависимости:

$$k_{2S} = k_{2S0} / (A * C_{\rm N} + 1), \tag{11}$$

где  $C_{\rm N}$  – атомная доля азота, A = 55.1 %,  $k_{2S0}$  – константа скорости обратной реакции при  $C_{\rm N} = 0$ .



Рисунок 2. Влияние на образование ПС содержания азота в диоксиде кремния  $C_N$ , ат. %: 1, 1' – 3; 2, 2' – 8; 3, 3' – 15; 4' – 0. 1 – 3 – эксперимент [6], 1' – 4' – расчёт при  $k_{2S}$  по формуле (11),  $k_{1S} = 0.03$  с<sup>-1</sup>.

# 4. Обсуждение результатов

Зависимости плотности ПС от времени при ОТПН (рис. 1, 2) имеют степенной вид:  $Q_{it} \sim t^n$ . На начальном этапе показатель  $n \sim 1$ , скорость образования ПС определяется скоростью освобождения водорода по прямой реакции (1) - реакционная стадия. С ростом плотности *Pb*-центов увеличивается скорость обратной реакции (1) и лимитирующей становится диффузия, показатель степени падает до  $n \sim 0.25$  – диффузионная стадия. Учёт дисперсионного характера диффузии водорода в аморфном подзатворном диэлектрике приводит к существенному замедлению

диффузионного переноса при относительно высоком коэффициенте диффузии свободного водорода, равном литературному значению [10]. Таким образом, устраняется несоответствие низкого коэффициента диффузии водорода SiO<sub>2</sub> в моделях [6, 16] с более высокими литературными значениями [9,10].

# 5. Заключение

Показано, что учёт дисперсионного характера транспорта атомов водорода в подзатворном диэлектрике позволяет численно описать кинетику образования поверхностных состояний в МОП-структурах при ОТПН. При этом коэффициент диффузии свободного водорода остаётся достаточно большим и соответствует литературным значениям. На основе модели многократного захвата проведено моделирование временных зависимостей плотности ПС от напряженности электрического поля и содержания азота в подзатворном диоксиде кремния.

### Список литературы

- 1. Zhang J. F. et al. Bias temperature instability of MOSFETs: Physical processes, models, and prediction // Electronics. 2022. T. 11. №. 9. C. 1420.
- 2. Stathis J. H., Mahapatra S., Grasser T. Controversial issues in negative bias temperature instability // Microelectronics Reliability. 2018. T. 81. C. 244-251.
- 3. Schroder D. K., Babcock J. A. Negative bias temperature instability: Road to cross in deep submicron silicon semiconductor manufacturing // Journal of applied Physics. 2003. T. 94. №. 1. C. 1-18.
- 4. Jeppson K. O., Svensson C. M. Negative bias stress of MOS devices at high electric fields and degradation of MNOS devices // Journal of Applied Physics. 1977. T. 48. №. 5. C. 2004-2014.
- 5. Ogawa S., Shiono N. Generalized diffusion-reaction model for the low-field charge-buildup instability at the Si-SiO 2 interface // Physical Review B. 1995. T. 51. №. 7. C. 4218.
- 6. Yang J. B. et al. Analytical reaction-diffusion model and the modeling of nitrogen-enhanced negative bias temperature instability // Applied physics letters. 2006. T. 88. №. 17.
- 7. Houssa M. Modelling negative bias temperature instabilities in advanced p-MOSFETs // Microelectronics Reliability. 2005. T. 45. №. 1. C. 3-12.
- Küflüoglu H., Alam M. A. A generalized reaction-diffusion model with explicit H-H2 dynamics for negative-bias temperature-instability (NBTI) degradation // IEEE Trans. Electron Devices. - 2007. - T. 54. - №. 5. - C. 1101-1107.
- 9. Griscom D. L. Diffusion of radiolytic molecular hydrogen as a mechanism for the post-irradiation buildup of interface states in SiO2-on-Si structures //Journal of applied physics. 1985. T. 58. №. 7. C. 2524-2533.
- 10. Hofstein S. R. Proton and sodium transport in SiO<sub>2</sub> films //IEEE Transactions on Electron Devices. 1967. T. 14. №. 11. C. 749-759.
- Scher H., Montroll E. W. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids // Physical Review B. 1975. – T. 12. – №. 6. – C. 2455.
- 12. Noolandi J. Multiple-trapping model of anomalous transit-time dispersion in *a*− Se // Physical Review B. 1977. T. 16. №. 10. C. 4466.
- 13. Gale R. et al. Hydrogen migration under avalanche injection of electrons in Si metal-oxide-semiconductor capacitors //Journal of applied physics. 1983. T. 54. №. 12. C. 6938-6942.
- Saks N. S., Brown D. B. Interface trap formation via the two-stage H<sup>+</sup> process // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 1989. – T. 36. – №. 6. – C. 1848-1857.
- Александров О. В. Дисперсионный транспорт водорода в МОП-структурах после ионизирующего облучения // Физика и техника полупроводников. – 2020. – Т. 54. – №. 10. – С. 1029-1033.
- Alam M. A., Mahapatra S. A comprehensive model of PMOS NBTI degradation // Microelectronics Reliability. – 2005. – T. 45. – №. 1. – C. 71-81.
- 17. Islam A. E. et al. Recent issues in negative-bias temperature instability: Initial degradation, field dependence of interface trap generation, hole trapping effects, and relaxation // IEEE Transactions on Electron Devices. 2007. T. 54. №. 9. C. 2143-2154.
- 18. Tan S. S. et al. Relationship between interfacial nitrogen concentration and activation energies of fixed-charge trapping and interface state generation under bias-temperature stress condition // Applied physics letters. 2003. T. 82. № 2. C. 269-271.