

ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИКАХ ТУННЕЛИРОВАНИЕМ МЕЖДУ ЛОВУШКАМИ

К. А. Насыров^{a,*}, В. А. Гриценко^b

^a *Институт автоматизации и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

^b *Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 26 октября 2010 г.

Развита теория переноса заряда в диэлектрике путем туннелирования между ловушками. В отличие от модели Френкеля ловушки в нитриде кремния характеризуются двумя энергиями: оптической и термической, и ионизация происходит по многофононному механизму. Теория предсказывает, что туннелирование между такими ловушками является термостимулированным, в качестве энергии активации выступает полуразность оптической и термической энергий. Эта теория успешно объясняет экспериментальные вольт-амперные характеристики нитрида кремния, обогащенного кремнием. Такой нитрид кремния содержит большое количество ловушек, природа которых связана с избыточным кремнием, и в нем реализуется перенос заряда путем туннелирования между близко расположенными ловушками.

1. ВВЕДЕНИЕ

За исключением термического оксида SiO_2 на кремнии все остальные диэлектрики, а именно оксиды (SiO_x , Al_2O_3 , Ta_2O_5 , Nb_2O_5 , HfO_2 , ZrO_2 , TiO_2) и нитриды (Si_3N_4 , SiN_x , Ge_3N_4 , BN) имеют высокую концентрацию ловушек, $N_t > 10^{19} \text{ см}^{-3}$. В настоящее время общепринято представление о том, что проводимость диэлектриков с ловушками контролируется ионизацией кулоновских ловушек по механизму Френкеля [1, 2]. Эффект Френкеля состоит в понижении кулоновского потенциала ловушки в электрическом поле [3, 4] и облегчении ионизации ловушки. Эффект Френкеля привлекается для интерпретации проводимости оксида кремния, обогащенного кремнием $\text{SiO}_{x < 2}$, который использовался в качестве изолятора в период до кремниевой технологии [1]. В кремниевых приборах двумя ключевыми диэлектриками являются оксид кремния SiO_2 и нитрид кремния Si_3N_4 . Нитрид кремния обладает эффектом памяти, способностью локализовать инжектированные в него электроны и дырки с гигантским временем удержания в локализованном состоянии (10 лет при 85°C). В настоящее время эффект локализации электронов и дырок в нитриде кремния

используется для разработки флэш-памяти следующего поколения [5, 6]. Время хранения информации в приборах флэш-памяти на основе нитрида кремния определяется ионизацией ловушек. В связи с этим в последнее время изучение механизма транспорта электронов и дырок в Si_3N_4 стало объектом детальных исследований [7–13].

Если транспорт заряда в нитриде кремния лимитируется эффектом Френкеля [14], то качественным признаком эффекта Френкеля считается спрямление вольт-амперных характеристик в координатах $\lg J - \sqrt{F}$. Здесь J — плотность тока, $F = V/d$ — среднее электрическое поле, V — приложенное к диэлектрику напряжение, d — толщина диэлектрика. В цикле работ [8–12] авторов настоящей статьи была предпринята попытка количественно сравнить экспериментальные данные по зависимости тока от напряжения и температуры с расчетными данными для модели Френкеля. Поскольку в нитриде кремния имеется высокая плотность ловушек, электрическое поле в нем неоднородно, зависит от координаты из-за пространственного заряда. Наша модель учитывает это обстоятельство с помощью уравнения Пуассона.

Было установлено, что формально перенос заряда в Si_3N_4 может быть описан моделью Френке-

*E-mail: nasuyrov@iae.nsk.su

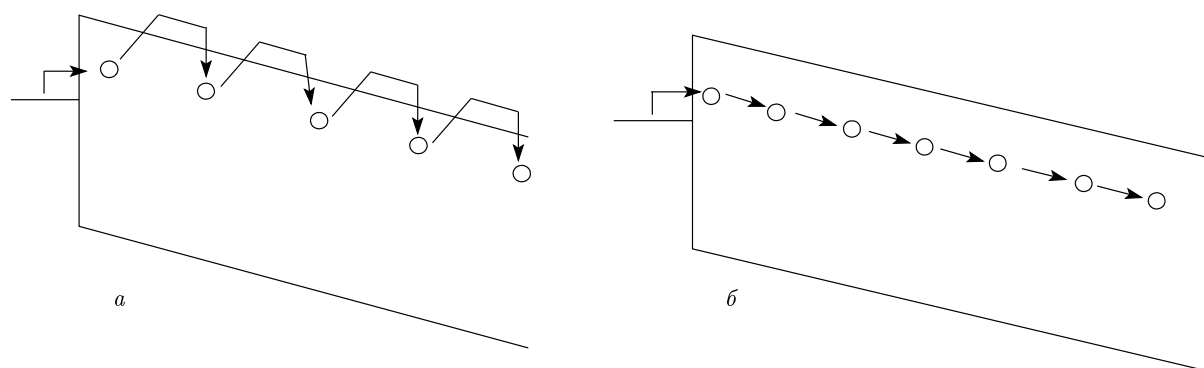


Рис. 1. а) Перенос электронов с захватом на ловушку, последующим освобождением из ловушки в зону проводимости и захватом на следующую ловушку; б) перенос механизмом туннелирования между ловушками без выхода в зону проводимости

ля. Однако для количественного согласия эксперимента и расчета необходимо использовать величину эффективной массы электронов $m^* \approx (3-5)m_0$, на порядок большую, чем экспериментальное значение $m^* \approx 0.5m_0$ [15]. Кроме того, оказалось, что для получения согласия с экспериментом в модели Френкеля необходимо вводить зависимость эффективной массы от электрического поля [12]. Эксперименты по туннельной инжекции электронов из кремния в диэлектрик (Si_3N_4 , SiO_2) указывают на то, что эффективная масса не зависит от электрического поля [14, 16]. Другое противоречие в модели Френкеля состоит в том, что для согласия с экспериментом необходимо использовать нефизично малое значение частотного фактора $\nu = 10^8-10^{10} \text{ c}^{-1}$ [8, 12]. В оригинальной статье Френкеля [3] предполагается, что частотный фактор имеет величину $\nu = \phi/h \approx 10^{15} \text{ c}^{-1}$, где ϕ — энергия ловушки, h — постоянная Планка. Аналогичные противоречия модели Френкеля при сравнении с экспериментом наблюдаются в аморфном оксиде алюминия Al_2O_3 [17].

В работах [8–12] было показано, что проводимость Si_3N_4 в широком диапазоне напряжений и температур количественно описывается многофононным механизмом ионизации ловушек при разумных физических параметрах. Такая модель ловушки основывается на гипотезе о том, что энергия захваченного электрона зависит от деформации или колебаний решетки и поглощение большого числа фононов приводит к ионизации ловушки. Многофононный механизм ионизации ловушек широко используется в теории кристаллических полупроводников [18, 19].

Проводимости оксида, обогащенного кремнием, SiO_x и нитрида, обогащенного кремнием, SiN_x экс-

поненциально возрастают при увеличении концентрации избыточного кремния (уменьшении параметра x) [1, 20]. Этот эффект объясняется экспоненциально сильным увеличением вероятности ионизации ловушек из-за перекрытия кулоновских потенциалов соседних ловушек [1]. В последнее время эта модель используется для интерпретации транспорта заряда в халькогенидах [2]. Однако эта модель основана на эффекте Френкеля, который, как указано выше, не описывает транспорт заряда в нитриде кремния и оксиде алюминия. Целью настоящей работы является построение модели переноса электронов между фонон-связанными ловушками при малых расстояниях между ловушками. Ранее использовалась модель многофононной ионизации ловушек, в которой предполагался перенос электронов как повторяющиеся циклы захвата электрона на ловушку с последующим освобождением электрона и захватом другой ловушкой ниже по полю (рис. 1а). В данной работе эта модель развивается для случая высокой концентрации ловушек и дополняется учетом процесса туннелирования электрона между ними (рис. 1б). Проводится сравнение результатов, полученных с помощью теоретической модели, с экспериментальными результатами по проводимости нитрида, обогащенного кремнием, SiN_x для разных концентраций избыточного кремния.

2. МОДЕЛЬ ФОНОН-СВЯЗАННОЙ ЛОВУШКИ

В качестве ловушки будем рассматривать некоторый одномодовый осциллятор (локальный фонон), встроенный в объем диэлектрика. Будем считать, что такой осциллятор может захватывать электрон

благодаря короткодействующему притягивающему потенциалу. В дальнейшем для простоты будем предполагать, что этот потенциал имеет форму трехмерной δ -функциональной ямы, в которой связанный электрон имеет единственный уровень с энергией ε . В общем случае параметры этой потенциальной ямы и, соответственно, энергия захваченного электрона зависят от координаты осциллятора q . Для удобства далее вместо координаты q будем использовать обобщенную координату

$$Q = \sqrt{M} \omega_{ph} q,$$

где M — масса осциллятора, ω_{ph} — его частота колебаний. В этих координатах потенциальная энергия свободного осциллятора имеет вид

$$U_f(Q) = \frac{Q^2}{2}.$$

Обычно предполагается, что зависимость ε от Q носит линейный характер и записывается как

$$\varepsilon(Q) = -Q_0(Q - Q_0) - W_{opt},$$

где смысл Q_0 и W_{opt} прояснится позже. Потенциальная энергия осциллятора со связанным электроном имеет вид

$$U_b(Q) = \frac{Q^2}{2} + \varepsilon(Q) = \frac{(Q - Q_0)^2}{2} - W_T.$$

Таким образом, потенциальная энергия для осциллятора со связанным электроном снова имеет квадратичный вид с минимумом $-W_T$, который достигается при

$$Q_0 = \sqrt{2(W_{opt} - W_T)}. \quad (1)$$

В этом положении энергия электрона равна

$$\varepsilon(Q_0) = -W_{opt}.$$

Отсюда становится ясным смысл введенных параметров: W_T — термическая энергия ионизации ловушки (минимальная энергия, требуемая для освобождения электрона), W_{opt} — оптическая энергия ионизации (ионизация прямым переходом), см. рис. 2. Для δ -функционального потенциала зависимость волновой функции электрона от расстояния r электрона до центра ловушки имеет вид

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2m^*\varepsilon(Q)}}{\hbar}$$

и таким образом в ней присутствует неявная зависимость от координаты осциллятора.

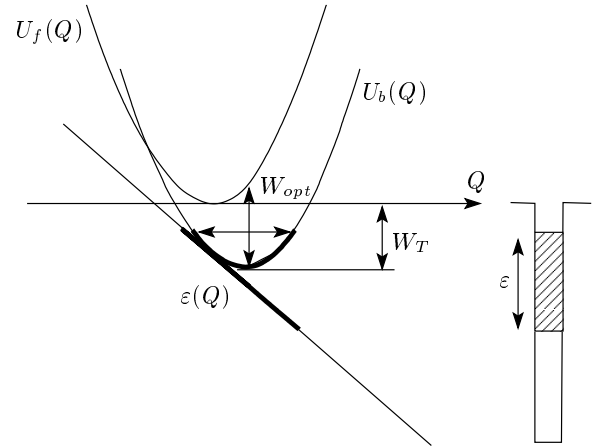


Рис. 2. Конфигурационная диаграмма свободного осциллятора с потенциальной энергией $U_f(Q)$ и с захваченным зарядом $U_b(Q)$, $\varepsilon(Q)$ — положение уровня энергии захваченного электрона в зависимости от координаты осциллятора Q . Жирными линиями показано соответствие диапазона колебания осциллятора и диапазона изменения энергии электрона в ловушки на линии $\varepsilon(Q)$. Справа — рисунок потенциальной ямы для электрона, соответствующий диапазон изменения энергии заштрихован

3. ИОНИЗАЦИЯ ЛОВУШКИ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Воспользуемся выражением для скорости ионизации электрона $w(\varepsilon)$ из состояния глубиной $|\varepsilon(Q)|$ через треугольный барьер в электрическом поле F :

$$w(\varepsilon) = \frac{eF}{2\sqrt{2m^*|\varepsilon(Q)|}} \times \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*|\varepsilon(Q)|}^{3/2}}{\hbar eF}\right). \quad (2)$$

Условие применимости этого уравнения связано с большим значением показателя экспоненты. Осциллятор колеблется, поэтому уровень ловушки $\varepsilon(Q)$ также циклически меняется и вслед за ним изменяется частота ионизации (2). Поэтому для вычисления частоты ионизации ловушки выражение (2) необходимо усреднить по функции распределения осциллятора по координате, которая в классическом приближении имеет вид

$$f(Q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{(Q - Q_0)^2}{2kT}\right). \quad (3)$$

В тех областях координаты Q , где энергия захваченного электрона отрицательна, для частоты ионизации ν имеем

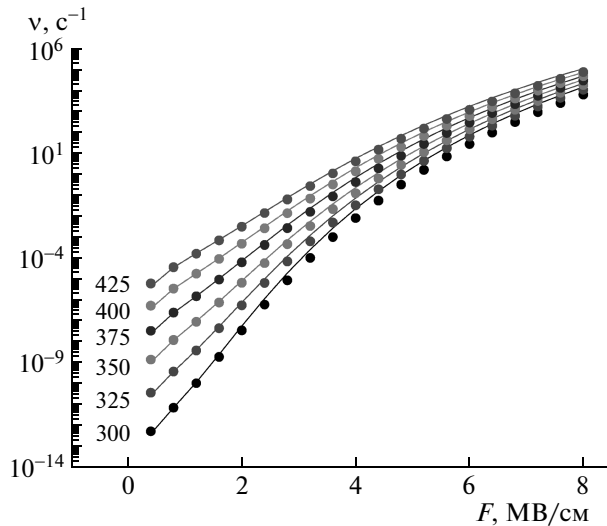


Рис. 3. Зависимости скорости ионизации ловушки от электрического поля при температурах от 300 К до 425 К в квантовом (линии) и классическом (точки) приближениях в описании движения осциллятора. Параметры ловушки: $W_T = 1.5$ эВ, $W_{opt} = 3$ эВ, $W_{ph} = 0.05$ эВ, $m^* = 0.5m_0$

$$\nu = \int_{\varepsilon(Q) < 0} \frac{eF}{2\sqrt{2\pi kT} \sqrt{2m^*|\varepsilon(Q)|}} \times \exp\left(-\frac{(Q-Q_0)^2}{2kT} - \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*} |\varepsilon(Q)|^{3/2}}{\hbar e F}\right) dQ. \quad (4)$$

А в областях, где $\varepsilon(Q) > 0$, электрон становится свободным при каждом колебании осциллятора. Поэтому для скорости термической ионизации ловушки ν_T справедливо соотношение

$$\nu_T = \frac{\omega_{ph}}{2\pi} \int_{\varepsilon(Q) > 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{(Q-Q_0)^2}{2kT}\right) dQ = \frac{\omega_{ph} \sqrt{kT} Q_0}{(2\pi)^{3/2} W_{opt}} \exp\left(-\frac{W_{opt}^2}{2Q_0^2 kT}\right). \quad (5)$$

При квантовомеханическом описании движения осциллятора [18] для скорости ионизации ловушки можно получить [9] выражение

$$\nu_q = \sum_n \exp\left(\frac{nW_{ph}}{2kT} - S \operatorname{cth} \frac{W_{ph}}{2kT}\right) \times I_n\left(\frac{S}{\operatorname{sh}(W_{ph}/2kT)}\right) w(W_T + nW_{ph}), \quad (6)$$

где I_n — модифицированные функции Бесселя, $S = (W_{opt} - W_T)/\hbar\omega_{ph}$ — параметр Хуанга–Райса,

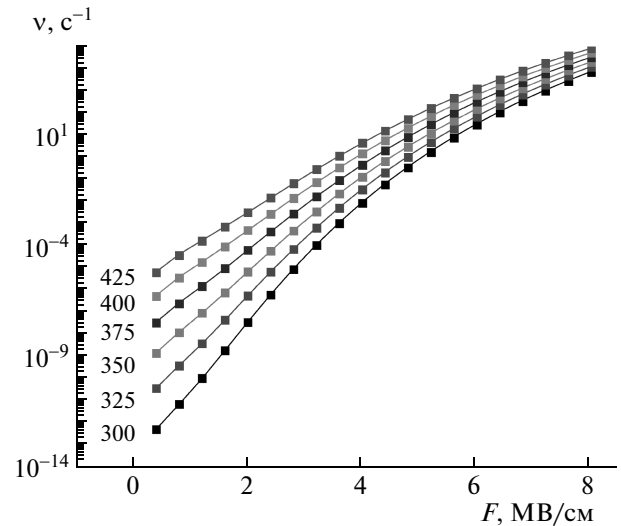


Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для энергии фонона $W_{ph} = 0.02$ эВ

$W_{ph} = \hbar\omega_{ph}$ — энергия фонона. На рис. 3 показаны расчеты скорости ионизации в классическом (4) и квантовом (6) приближениях при разных электрических полях и температурах при параметрах ловушки $W_T = 1.5$ эВ, $W_{opt} = 3$ эВ, $W_{ph} = 0.05$ эВ, найденных из экспериментов по протеканию тока через Si_3N_4 при различных напряжениях и температурах [8–12]. Как видно из этого рисунка, в рассматриваемом диапазоне температур и полей результаты расчетов в обоих приближениях близки и это значит, что классическое приближение вполне применимо для описания фонон-связанной ловушки. Заметные различия между этими двумя моделями проявляются при низких температурах, высоких полях и при увеличении энергии фонона W_{ph} . Наоборот, с уменьшением энергии фонона различие между квантовым и классическим приближениями уменьшается (см. рис. 4), как это и должно быть. Классическое приближение в описании движения осциллятора при ионизации ловушки справедливо при условиях $S \gg 1$, $T \sim W_{ph}$.

4. ТУННЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД ЭЛЕКТРОНА С ОДНОЙ ЛОВУШКИ НА ДРУГУЮ

Классическое приближение в описании движения осциллятора мы применим для теории туннелирования электрона из одной фонон-связанной ловушки на другую. Пусть на расстоянии D от первой ловушки находится другая пустая ловушка. Для

простоты рассмотрения будем считать, что вторая ловушка может захватывать электрон на фиксированный уровень с энергией ε_2 . При колебаниях осциллятора энергия захваченного электрона на первой ловушке также колеблется, так что в какие-то моменты времени энергия электрона совпадает с ε_2 :

$$\varepsilon(Q(t)) = \varepsilon_2.$$

В такие моменты возможны переходы электрона с одной ловушки на вторую. Вероятность такого перехода при одном пересечении уровней дается выражением [21]

$$w = \frac{\pi|V|^2}{\hbar|d\varepsilon/dt|}. \quad (7)$$

Здесь V — матричный элемент потенциала взаимодействия, приводящий к переходам из ловушки в другую ловушку. Мы также примем, что на второй ловушке притягивающий потенциал имеет форму δ -функциональной ямы. В этом случае в качестве матричного элемента потенциала взаимодействия выступает интеграл перекрытия волновых функций для электронных состояний, локализованных на этих ловушках [21, 22]:

$$V = \frac{\hbar^2\kappa}{m^*D} e^{-\kappa D}. \quad (8)$$

Далее вторую ловушку будем считать таким же осциллятором, что и первая ловушка, при этом уровень для захваченного электрона на ней может также зависеть от времени.

Выражение (7) можно представить в виде

$$w = \int_0^T \frac{\pi|V|^2}{\hbar} \delta(\varepsilon_1(Q_1(t)) - \varepsilon_2(Q_2(t))) dt, \quad (9)$$

где T — период колебания осциллятора. С другой стороны, величина w означает вероятность перехода электрона с одной ловушки на другую в течение времени периода одного колебания и ее можно записать как

$$w = \int_0^T \nu(t) dt, \quad (10)$$

где ν — частота перехода электрона. Сравнивая (9) и (10), находим

$$\nu = \frac{\pi|V|^2}{\hbar} \delta(\varepsilon_1(Q_1) - \varepsilon_2(Q_2)). \quad (11)$$

Далее эту частоту необходимо усреднить по распределению осцилляторов в пространстве координат и импульсов:

$$\bar{\nu} = \int \frac{\pi|V|^2}{\hbar} \delta(\varepsilon_1(Q_1) - \varepsilon_2(Q_2)) \times f_1(Q_1, P_1) f_2(Q_2, P_2) dQ_1 dP_1 dQ_2 dP_2. \quad (12)$$

Здесь

$$f_1(Q_1, P_1) = \frac{1}{2\pi kT} \exp\left(-\frac{(Q_1 - Q_0)^2 + P_1^2}{2kT}\right) \quad (13)$$

— равновесное распределение для первой ловушки с захваченным электроном,

$$f_2(Q_2, P_2) = \frac{1}{2\pi kT} \exp\left(-\frac{Q_2^2 + P_2^2}{2kT}\right) \quad (14)$$

— распределение для второй пустой ловушки. После интегрирования по импульсам в формуле (12) получаем следующее выражение для частоты перехода:

$$\bar{\nu} = \int \frac{\hbar|\varepsilon_1| Tr(\varepsilon_1)}{m^*D^2kT} \delta(\varepsilon_1(Q_1) - \varepsilon_2(Q_2)) \times \exp\left(-\frac{(Q_1 - Q_0)^2 + Q_2^2}{2kT}\right) dQ_1 dQ_2, \quad (15)$$

где $Tr(\varepsilon)$ — туннельная прозрачность барьера для перехода электрона с одной ловушки на другую, которая вычисляется в ВКБ-приближении. Если имеется постоянное электрическое поле F , то

$$Tr(\varepsilon) = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m^*}}{3\hbar eF} \left((- \varepsilon)^{3/2} - (-\varepsilon - eFD)^{3/2}\right)\right]. \quad (16)$$

Энергия электрона на второй ловушке зависит от координаты второго осциллятора:

$$\varepsilon_2(Q_2) = -Q_0(Q_2 - Q_0) - W_{opt} + \Delta,$$

где величина $\Delta = eFD$ учитывает перепад внешнего потенциала для электрона между первой и второй ловушками.

После интегрирования по Q_2 в формуле (15) получим

$$\bar{\nu} = \int \frac{\hbar|\varepsilon|}{m^*D^2kTQ_0} \times \exp\left(-\frac{(Q - Q_0)^2 + (Q - \Delta/Q_0)^2}{2kT} - \frac{4\sqrt{2m^*}}{3\hbar eF} \left((- \varepsilon)^{3/2} - (-\varepsilon - \Delta)^{3/2}\right)\right) dQ, \quad (17)$$

$$\varepsilon = -Q_0(Q - Q_0) - W_{opt}.$$

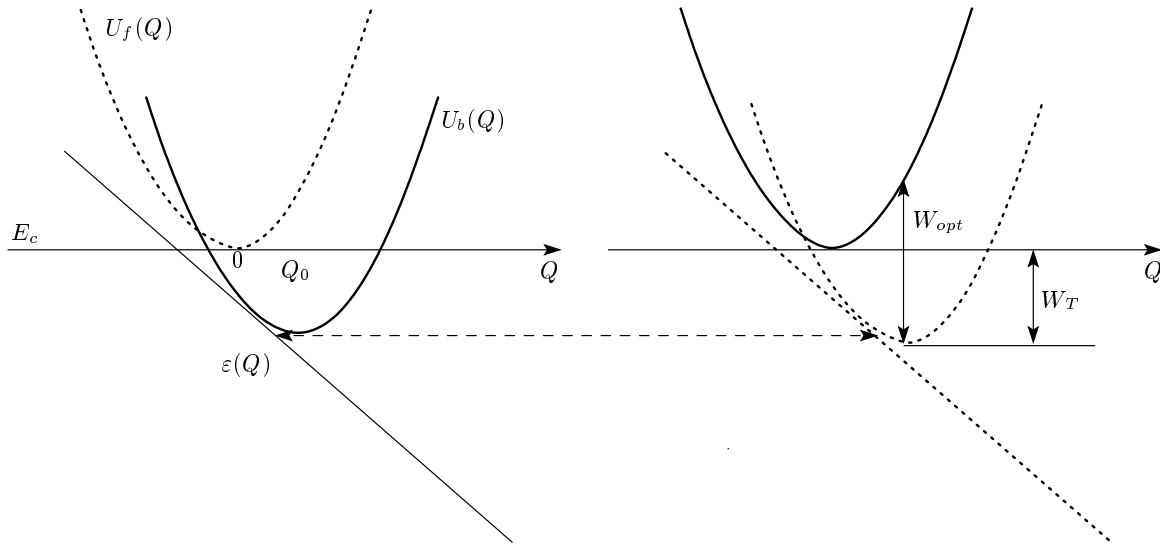


Рис. 5. Конфигурационная диаграмма для двух фонон-связанных ловушек; $U_f(Q)$ — потенциальная энергия осциллятора без захваченного электрона, $U_b(Q)$ — потенциальная энергия осциллятора с захваченным электроном, $\varepsilon(Q)$ — положение уровня энергии захваченного электрона в зависимости от координаты осциллятора Q , Q_0 — координата минимума потенциальной энергии ловушки с захваченным электроном, E_c — край зоны проводимости диэлектрика. Сплошные линии соответствуют начально занятым состояниям, а пунктирные — свободным. Штриховая стрелка соединяет положения осцилляторов $Q_0/2$, когда наиболее вероятен туннельный переход электрона

Анализ подынтегрального выражения (17), который проще выполнить при нулевом электрическом поле, показывает, что имеется резкий максимум при

$$Q^* = \frac{Q_0}{2} \left(1 - \frac{kT}{W_T} \frac{D\sqrt{2m^*W_T}}{\hbar} \right). \quad (18)$$

Для глубоких ловушек в диэлектрике $kT \ll W_T$ и длина локализации электрона в ловушке сопоставима с расстоянием между ловушками $\lambda = \hbar/\sqrt{2m^*W_T} \approx D$, поэтому можно с хорошей точностью считать, что туннелирование происходит, когда оба осциллятора достигают координаты $Q_0/2$ (см. рис. 5). Интеграл (17) вычисляется методом перевала и при условии $eFD \ll W_T$ окончательно получим

$$\bar{\nu} = \frac{\sqrt{\pi} \hbar W_T}{m^* D^2 Q_0 \sqrt{kT}} \exp\left(-\frac{W_{opt} - W_T}{2kT}\right) \times \exp\left(-\frac{2D\sqrt{2m^*W_T}}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{eFD}{2kT}\right). \quad (19)$$

В таком виде скорость туннелирования приобретает ясный смысл. Первая экспонента показывает, что имеется некая активационная энергия $(W_{opt} - W_T)/2$, которую необходимо преодолеть при туннелировании. Вторая экспонента — это обычный туннельный фактор, прозрачность подбарьерного перехода между ловушками, третья

экспонента — понижение барьера из-за электрического поля, она соответствует виду закона Пула.

Оценка предэкспоненциального множителя для $W_T = 1.5$ эВ, $W_{opt} = 3$ эВ, $kT = 0.03$ эВ, $D = 10^{-7}$ см, $m^* = 0.5m_0$ дает $\nu_0 = 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$.

Зависимости скорости туннелирования между ловушками от величины электрического поля при разных температурах, рассчитанной с помощью уравнения (17), показаны на рис. 6. Значения скорости туннелирования, полученные из приближенного выражения (19), отличаются от (17) не более чем на 2%. Ток через диэлектрик в грубом приближении пропорционален скорости туннелирования между ловушками. Поэтому можно ожидать, что согласно формуле (19) ток должен расти с увеличением плотности ловушек из-за уменьшения расстояния D между ними, вольт-амперные характеристики должны вести себя по закону Пула, т. е. спрямляться в координатах $\lg J-F$, и, кроме того, ток должен расти с увеличением температуры.

В работах [8–12] была развита теория переноса заряда в диэлектриках, содержащих фонон-связанные ловушки, когда процесс переноса состоял в последовательности ионизации ловушки и захвата освобожденного заряда следующей ловушкой. При этом электрон из контакта инжектировался в зо-

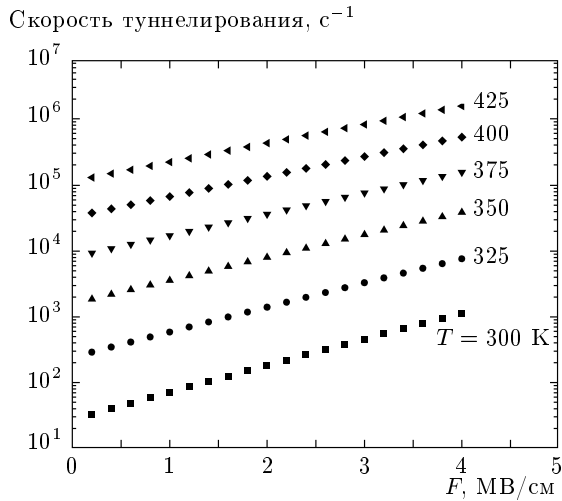


Рис. 6. Зависимости скорости туннелирования электрона между ловушками от электрического поля при разных температурах. Расчеты выполнены для $W_T = 1.5$ эВ, $W_{opt} = 3$ эВ, $D = 5 \cdot 10^{-8}$ см, $m^* = 0.5m_0$

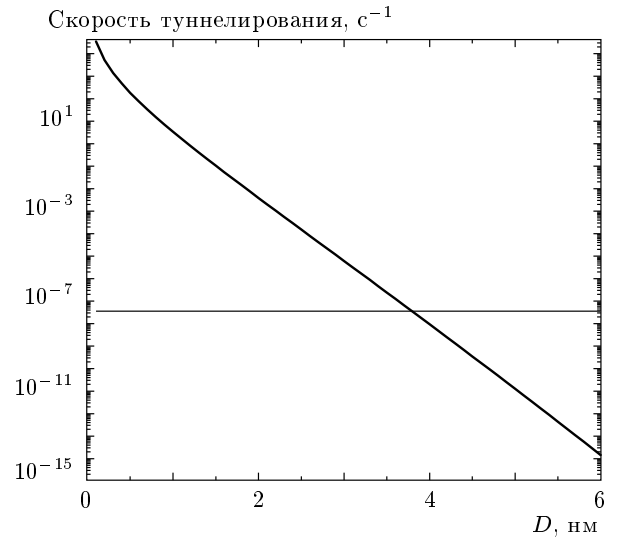


Рис. 7. Зависимость скорости туннелирования от расстояния между ловушками для электрического поля $F = 2$ МВ. Горизонтальной линией показана скорость ионизации ловушки для данного поля. Параметры ловушки: $W_T = 1.5$ эВ, $W_{opt} = 3$ эВ, $m^* = 0.5m_0$

ну проводимости диэлектрика по механизму Фаулера–Нордгейма или через промежуточную ловушку [11, 23] (TAT, trap assisted tunneling). В настоящей работе мы будем исходить из того, что внутри диэлектрика перенос заряда происходит туннелированием между ловушками, без выхода в зону проводимости. Какой из режимов переноса заряда реализуется, туннелирования между ловушками или ионизации ловушек, зависит от того, какая частота выше: туннелирования между ловушками $\bar{\nu}(F, D)$ (19) или частота ионизации ловушки $\nu(F)$ (4). На рис. 7, 8 показаны зависимости скорости туннелирования от расстояния между ловушками при двух значениях электрического поля. Таким образом, чтобы механизм туннелирования давал заметный вклад в перенос заряда, необходима плотность ловушек не меньше 10^{20} см⁻³.

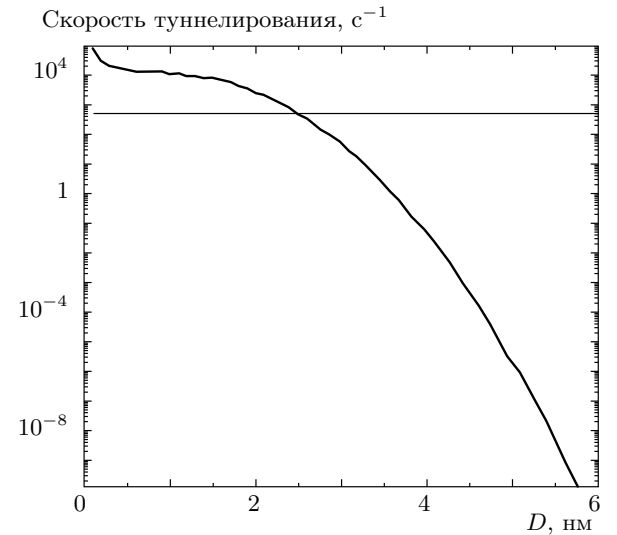


Рис. 8. То же самое, что и на рис. 7, но для $F = 7$ МВ

5. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИКЕ МЕХАНИЗМОМ ТУННЕЛИРОВАНИЯ МЕЖДУ ЛОВУШКАМИ

В численной модели переноса заряда мы используем следующее уравнение для заполнения ловушек внутри диэлектрика:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i = \nu_{i-1,i} n_{i-1} \left(1 - \frac{n_i}{N_t}\right) - \nu_{i,i-1} n_i \left(1 - \frac{n_{i-1}}{N_t}\right) + \nu_{i+1,i} n_{i+1} \left(1 - \frac{n_i}{N_t}\right) - \nu_{i,i+1} n_i \left(1 - \frac{n_{i+1}}{N_t}\right). \quad (20)$$

Здесь N_t — полная плотность ловушек, n_i — плотность заполненных электронами ловушек в узле i расчетной сетки. Расстояние между узлами равнялось среднему расстоянию между ловушками $D = N_t^{-1/3}$. Частоты туннелирования из узла $i - 1$ в i , $\nu_{i-1,i}$, и обратно, $\nu_{i,i-1}$, вычислялись с помощью уравнения (19). Заполнение самой первой ловушки происходит из контакта и описывается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} n_1 = Inj \cdot (N_t - n_1) - Ion \cdot n_1 + \nu_{2,1} n_2 \left(1 - \frac{n_1}{N_t}\right) - \nu_{1,2} n_1 \left(1 - \frac{n_2}{N_t}\right), \quad (21)$$

где коэффициенты заполнения ловушки электронами из контакта Inj и обратной ионизации ловушки в контакт Ion вычисляются в Приложении. Распределение электрического поля внутри диэлектрика находилось решением уравнения Пуассона в разностном представлении:

$$\frac{\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1} - 2\varphi_i}{D^2} = e \frac{n_i}{\varepsilon_d \varepsilon_0}. \quad (22)$$

6. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРИИ

Результаты теории сравнивались с результатами эксперимента по проводимости аморфных пленок нитрида, обогащенного кремнием SiN_x , выращенных при разных соотношениях SiH_4/NH_3 [%]. В эксперименте измерялась зависимость величины тока от напряжения, приложенного к диэлектрику толщиной приблизительно 100 нм. Известно, что увеличение соотношения SiH_4/NH_3 в процессе синтеза SiN_x приводит к уменьшению параметра x , т. е. к увеличению концентрации избыточного, сверхстехиометрического кремния. Увеличение соотношения сопровождается увеличением показателя преломления n , значение которого приведено в подписи к рис. 9. На рис. 9 показаны измеренные вольт-амперные характеристики для стехиометрического нитрида кремния (1, 2) и нитрида кремния, обогащенного кремнием (3, 4), при комнатной температуре.

Обращает на себя внимание факт, что для обогащенного кремнием нитрида кремния ток значительно выше, чем для стехиометрического нитрида кремния. Более того, заметный электрический ток через обогащенный кремнием нитрид кремния начинается уже при низких напряжениях, в то время как в случае стехиометрического нитрида кремния существует некоторый порог по напряжению, когда

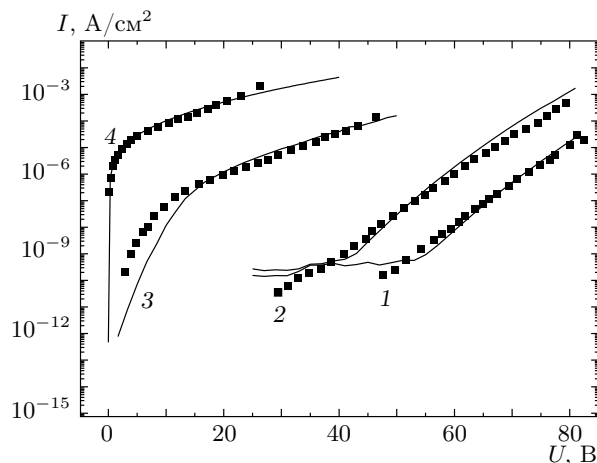


Рис. 9. Экспериментальные (точки) и расчетные (линии) вольт-амперные характеристики для Si_3N_4 с разной концентрацией ловушек. Расчетные параметры ловушек: 1 — $\text{SiH}_4/\text{NH}_3 = 0.02$, $n = 1.96$, параметры расчета $N_t = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $W_T = 1.7 \text{ эВ}$, $W_{opt} = 3.5 \text{ эВ}$, $\Phi = 2.3 \text{ эВ}$, $m^* = 0.5m_0$; 2 — $\text{SiH}_4/\text{NH}_3 = 0.1$, $n = 2.05$, $N_t = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $W_T = 1.5 \text{ эВ}$, $W_{opt} = 3.0 \text{ эВ}$, $\Phi = 2.3 \text{ эВ}$, $m^* = 0.5m_0$; 3 — $\text{SiH}_4/\text{NH}_3 = 0.2$, $n = 2.2$, $N_t = 3 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $W_T = 1.55 \text{ эВ}$, $W_{opt} = 3.0 \text{ эВ}$, $\Phi = 2.1 \text{ эВ}$, $m^* = 0.5m_0$; 4 — $\text{SiH}_4/\text{NH}_3 = 0.5$, $n = 2.35$, $N_t = 3 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $W_T = 1.7 \text{ эВ}$, $W_{opt} = 3.0 \text{ эВ}$, $\Phi = 2.1 \text{ эВ}$, $m^* = 0.5m_0$. Здесь Φ — величина барьера для инжекции электрона из кремниевой подложки в нитрид (разность энергий между зонами проводимости в нитриде кремния и кремнии). В расчетах варьировались величины N_t , W_T , W_{opt} , Φ при фиксированной эффективной массе электрона

появляется заметный ток. Такой разительный контраст по проводимости между стехиометрическим и обогащенным кремнием нитрида кремния мы связываем с высокой концентрацией ловушек в нитриде кремния, обогащенном кремнием. Это согласуется с ранее высказанной гипотезой [24] о том, что природа ловушек в нитриде кремния связана с кремниевыми кластерами и, в частности, Si-Si-связь может служить ловушкой в нитриде кремния, а локальный фонон ассоциирован с этой связью.

Нами были проведены численные расчеты зависимости тока от напряжения в модели, в которой учитывается только ионизация нейтральных ловушек [9] без туннелирования между ними. Эти расчеты показали хорошее согласие с экспериментальными данными для стехиометрического нитрида (кривые 1, 2 рис. 9), но ни при каких условиях не смог-

ли воспроизвести результаты для нитрида кремния, обогащенного кремнием. Только модель, учитывающая туннелирование между ловушками, смогла удовлетворительно описать эти данные (кривые 3, 4 рис. 9). Для хорошего согласия теоретических расчетов с экспериментом необходимо было предполагать высокую концентрацию ловушек, более 10^{21} см $^{-3}$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально и теоретически было показано, что в нитриде кремния, обогащенном кремнием, меняется механизм проводимости по сравнению со стехиометрическим нитридом. Если в последнем перенос электронов происходит путем ионизации электрона из ловушки в зону проводимости с последующим захватом этого электрона другой ловушкой, то в нитриде кремния, обогащенном кремнием, из-за высокой концентрации ловушек и, значит, небольшого расстояния между ними перенос заряда осуществляется путем прямого туннелирования с одной ловушки на другую без выхода электрона в зону проводимости нитрида кремния. Для описания такого переноса была развита теория туннелирования между фонон-связанными ловушками. На основе этой теории численные расчеты показали хорошее согласие с экспериментальными вольт-амперными характеристиками для обогащенного кремнием нитрида кремния. Теория предсказывает, что туннельный переход между фонон-связанными ловушками является термостимулированным процессом и в качестве активационной энергии выступает полуразность оптической и термической энергий ионизации ловушки. Следует отметить, что в нашей модели ловушки нейтральные в отличие от модели Френкеля–Хилла. Полученные данные свидетельствуют в пользу того, что в SiN $_x$ в качестве ловушек выступают нейтральные кремниевые кластеры.

Работа выполнена при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 70.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Скорость инжекции из контакта в ловушку и ионизация ловушки в контакт

Задача о скорости ионизации ловушки с моноуровнем ε из диэлектрика в контакт была рассмотрена в работе [22]. Для широкого круга условий эту скорость можно представить в виде

$$Ion(z) = \frac{V_{out}}{2z} \times \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} [(-\varepsilon)^{3/2} - (-eFz - \varepsilon)^{3/2}]}{eF\hbar}\right) \times \left\{1 + \exp\left(-\frac{\Phi + \varepsilon + eFz}{kT}\right)\right\}^{-1},$$

где Φ — разность между энергией дна зоны проводимости диэлектрика и уровнем Ферми контакта, z — расстояние от ловушки до контакта, V_{out} — скорость электрона в контакте, освободившегося из ловушки.

Для фонон-связанной ловушки эту скорость ионизации необходимо усреднить по функции распределения осциллятора:

$$Ion = \int \frac{V_{out}}{2z\sqrt{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{(Q - Q_0)^2}{2kT} - \frac{4}{3} \frac{(2m^*)^{1/2} [(-\varepsilon)^{3/2} - (-eFz - \varepsilon)^{3/2}]}{eF\hbar}\right) \times \left\{1 + \exp\left(-\frac{\Phi + \varepsilon + eFz}{kT}\right)\right\}^{-1} dQ, \\ \varepsilon = -Q_0(Q - Q_0) - W_{opt}.$$

Скорость инжекции Inj из контакта в ловушку найдем, учитывая, что в стационарных условиях ее заполнение должно соответствовать статистике с уровнем Ферми контакта:

$$n_1 = \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{\Phi - W_T}{kT}\right)}.$$

Из этих соображений и из стационарного уравнения (21) без учета переноса на следующие ловушки получим

$$Inj = \exp\left(-\frac{\Phi - W_T}{kT}\right) Ion.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. R. M. Hill, Phil. Mag **23**, 59 (1971).
2. D. Ielimi, Phys. Rev. B **78**, 035308 (2008).
3. J. Frenkel, Tech. Phys. USSR **5**, 685 (1938).
4. J. Frenkel, Phys. Rev. **54**, 647 (1938).
5. V. A. Gritsenko, K. A. Nasyrov, Yu. N. Novikov, A. L. Aseev, S. Y. Yoon, J.-W. Lee, E.-H. Lee, and C. W. Kim, Sol. St. Electron. **47**, 1651 (2003).
6. C.-H. Lee, K.-C. Park, and K. Kim, Appl. Phys. Lett. **87**, 073510 (2005).

7. H. Bachhofer, H. Reisinger, E. Bertagnolli, and H. von Philipsborn, *J. Appl. Phys.* **89**, 2791 (2001).
8. K. A. Nasyrov, V. A. Gritsenko, M. K. Kim, H. S. Chae, S. D. Chae, W. I. Ryu, J. H. Sok, J.-W. Lee, and B. M. Kim, *IEEE Electron Dev. Lett.* **23**, 336 (2002).
9. K. A. Nasyrov, V. A. Gritsenko, Yu. N. Novikov, E.-H. Lee, S. Y. Yoon, and C. W. Kim, *J. Appl. Phys.* **96**, 4293 (2004).
10. К. А. Насыров, Ю. Н. Новиков, В. А. Гриценко, С. Ю. Юн, Ч. В. Ким, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 455 (2003).
11. K. A. Nasyrov, S. S. Shaimeev, V. A. Gritsenko, and J. H. Han, *J. Appl. Phys.* **105**, 123709 (2009).
12. A. V. Vishnyakov, Yu. N. Novikov, V. A. Gritsenko, and K. A. Nasyrov, *Sol. St. Electron.* **53**, 251 (2009).
13. К. А. Насыров, С. С. Шаймеев, В. А. Гриценко, Ж. Х. Хан, С. В. Ким, Ж. В. Ли, *ЖЭТФ* **129**, 962 (2006).
14. S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley & Sons, New York (1981).
15. V. A. Gritsenko, E. E. Meerson, and Yu. N. Morokov, *Phys. Rev. B* **57**, R2081 (1997).
16. M. I. Vexler, S. E. Tyaginov, and A. F. Shulekin, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 8057 (2005).
17. N. Novikov, V. A. Gritsenko, and K. A. Nasyrov, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 222904 (2009).
18. S. Makram-Eeid and M. Lannoo, *Phys. Rev. B* **25**, 6406 (1982).
19. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, Изд-во Петербургского института ядерной физики РАН, Санкт-Петербург (1997).
20. V. V. Voskoboynikov, V. A. Gritsenko, N. D. Dikovskaya, and S. P. Sinitza, *Microelectronics* **5**, 369 (1976).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
22. I. Lundstrom and C. Svensson, *J. Appl. Phys.* **43**, 5045 (1972).
23. К. А. Насыров, С. С. Шаймеев, В. А. Гриценко, *ЖЭТФ* **136**, 1 (2009).
24. V. A. Gritsenko, in *Silicon Nitride in Electronics*, Elsevier, New York (1988), p. 138.