

Особенности туннелирования электронов кремния через окисный слой в сильном поле

© В.А. Федирко, В.Д. Шадрин

Московский государственный технологический университет,
101472 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 12 июля 1996 г.)

В последнее время активно исследуются микровакуумные устройства с полевым эмиттером [1–4] в качестве элементной базы нового класса интегральных электронных и электронно-оптических приборов. Одним из перспективных материалов для создания микрокатодных структур является кремний, позволяющий воспользоваться развитой групповой технологией [5,6].

Важнейшей характеристикой микрокатада служит его эмиссионная способность, которая определяется туннелированием электронов в сильном приповерхностном поле. При исследовании автоэлектронной эмиссии из кремния необходимо учитывать наличие на его поверхности тонкого слоя естественного окисла. Кроме того, в ряде случаев тонкая окисная пленка на поверхности кремниевого автокатада создается технологически для повышения его стабильности и долговечности [7]. Электрическое поле у эмиттирующей поверхности превышает 10^7V/cm . В этих условиях заметную роль может играть туннелирование по состояниям, энергия которых в существенной области пространства лежит глубоко в запрещенной зоне окисла [8]. Адекватное описание таких состояний достигается в рамках четырехзонной модели [9]. При этом, однако, возникают проблемы сшивки огибающих блоховских функций на границах кремний–окисел и окисел–вакуум. Также требует анализа роль электронов различных долин кремния при туннелировании через заданную кристаллическую поверхность.

Расчет туннелирования через сложный потенциальный барьер, возникающий в системе кремний–окисел–вакуум, для широкого диапазона энергий возможен, разумеется, только численно. В настоящей работе исследуются перечисленные проблемы и строится приближенная модель, учитывающая особенности туннелирования электронов проводимости кремния через тонкий окисный слой в сильном поле. На основе развитой модели был разработан алгоритм численного расчета туннельной прозрачности и рассчитывалась энергетическая зависимость туннельной прозрачности в широком диапазоне энергий для тянущих полей $\sim 10^7\text{--}10^8 \text{V/cm}$.

1. Приближенное уравнение для огибающей блоховской функции зоны проводимости окисла

Будем рассматривать туннелирование с грани (001) кремния. Эта кристаллическая ориентация плоскости эмиттера обычно используется в реальных структурах. Если считать систему кремний–окисел трансляционно инвариантной в плоскости раздела, то в процессе туннелирования сохраняется с точностью до вектора обратной решетки составляющая волнового вектора электрона в плоскости раздела.

Как известно, энергетические долины зоны проводимости кремния расположены вдоль кристаллографических осей [100], [010], [001]. Окисную пленку можно считать прямозонным полупроводником с энергией электронного сродства $\psi_{\text{ок}} = 0.9 \text{eV}$ [10,11], запрещенной зоной $E_{g_{\text{ок}}} = 9 \text{eV}$ и эффективной массой на дне зоны проводимости $m_{\text{ок}} = (0.4\text{--}1.0)m_0$, где m_0 — масса свободного электрона [10–12]. Поэтому туннелирование без рассеяния импульса возможно лишь из двух эквивалентных долин, расположенных на оси [001]. В дальнейшем будут рассматриваться только электроны этих долин. Как будет показано далее, вклад остальных долин в туннелирование (с рассеянием импульса) мал. Роль последних сводится поэтому к переносу электронов к поверхности и их перераспределению.

Исходя из изотропной четырехзонной модели [9], положим массу тяжелых дырок $m_{hh} = \infty$ и пренебрежем спин-орбитальным расщеплением. Для огибающих блоховских функций зоны проводимости

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\rho)\varphi_c(z) \quad (1)$$

и трех валентных подзон X , Y и Z типа симметрии

$$\psi_v(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \varphi_x(z) \\ \varphi_y(z) \\ \varphi_z(z) \end{bmatrix} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\rho} \quad (2)$$

имеем систему уравнений [9]

$$\begin{aligned} [E - V(z)]\varphi_c + i\hbar S \text{div} \varphi_v(\mathbf{r}) &= 0, \\ [E + E_g - V(z)]\varphi_v + i\hbar S \text{grad} \varphi_c &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь \mathbf{k}_{\parallel} — компонента волнового вектора электрона, параллельная плоскости окисного слоя, $\mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$, где $\boldsymbol{\rho}$ — радиус-вектор в плоскости слоя, z — координата в перпендикулярном направлении, энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости, $S = \sqrt{E_{g\text{ox}}/2m_{\text{ox}}}$, m_{ox} — эффективная масса электрона на дне зоны проводимости окисла, $V(z)$ — потенциальная энергия.

Вводя

$$\varphi_{\parallel}(z) = \begin{bmatrix} \varphi_x(z) \\ \varphi_y(z) \end{bmatrix}$$

и выражая $\varphi_z(z)$ и $\varphi_{\parallel}(z)$ через $\varphi_c(z)$, получим из (3) после несложных преобразований

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ox}}} [E + E_{g\text{ox}} - V(z)] \frac{d}{dz} \\ & \times \left[\frac{d\varphi_c(z)}{dz} (E + E_{g\text{ox}} - V(z))^{-1} \right] + E_{g\text{ox}}^{-1} \\ & \times \left[(E - V(z))(E + E_{g\text{ox}} - V(z)) \right. \\ & \left. - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\text{ox}}} E_{g\text{ox}} \right] \varphi_c(z) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

В тех случаях, когда можно считать, что в существенных областях

$$\left| \frac{d}{dz} [\ln(E + E_{g\text{ox}} - V)] \right| \left| \frac{d\varphi_c}{dz} \right| \ll \left| \frac{d^2\varphi_c}{dz^2} \right| \quad (5)$$

уравнение (4) упрощается, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ox}}} \frac{d^2\varphi_c}{dz^2} E_{g\text{ox}}^{-1} \\ & \times \left[(E - V)(E + E_{g\text{ox}} - V) - E_{g\text{ox}} \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\text{ox}}} \right] \varphi_c = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Если отсчитывать энергию от середины запрещенной зоны

$$E' = E + E_{g\text{ox}}/2, \quad (7)$$

уравнение (6) переписывается в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m_{\text{ox}}} \frac{d^2\varphi_c}{dz^2} \\ & \times \frac{(E' - V(z))^2 - (E_{g\text{ox}}^2/4) - (E_{g\text{ox}}\hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\text{ox}})}{E_{g\text{ox}}} \varphi_c = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Для $E = E_{g\text{ox}}/2$ и $V(z) = -eF_{\text{ox}}z$, где F_{ox} — электрическое поле в окисле, условие (5) можно заменить неравенством

$$\frac{eF_{\text{ox}}}{eF_{\text{ox}}z + (E_{g\text{ox}}/2)} |k(z)| \ll k^2(z), \quad (9)$$

где мы положили

$$k(z) = \sqrt{F_{\text{ox}}z + E_{g\text{ox}}/2 - (\hbar^2 S^2 k^2/\hbar S)},$$

считая для оценки $\varphi_c(z) \approx \exp(\mp \int k(z) dz)$.

Оценивая (9) при $k_{\parallel} = 0$, получим неравенство

$$(eF_{\text{ox}}z + (E_{g\text{ox}}/2)) \gg \sqrt{eF\hbar S},$$

которое выполняется, если

$$F_{\text{ox}} \ll F_c = E_{g\text{ox}}^2/4\hbar S. \quad (10)$$

Для $E_{g\text{ox}} \approx 9 \text{ eV}$, $m_{\text{ox}} \cong m_0$ критическое поле $F_c \cong 7 \cdot 10^8 \text{ V/cm}$. Поле в окисле в реальных автоскатадах значительно меньше F_c , поэтому уравнения (6), (8) хорошо описывают процессы туннелирования через окисел. Эти уравнения содержат лишь одну волновую функцию $\varphi_c(z)$, что значительно упрощает расчеты.

Проблемы сшивки огибающих блоховских функций рассматривались в ряде работ [13–16]. Наиболее распространенный прием состоит в добавлении δ -образного потенциала, локализованного на границе раздела. Для рассматриваемой системы мы будем, следуя [13], использовать однородные граничные условия на поверхности раздела $z = z_b$ как для границы кремний–окисел, так и для границы окисел–вакуум. В принятой геометрии они имеют вид

$$\varphi_c(z) \Big|_{z_b-0} = \varphi_c(z) \Big|_{z_b+0},$$

$$\frac{1}{m_z} \frac{d\varphi_c(z)}{dz} \Big|_{z_b-0} = \frac{1}{m_z} \frac{d\varphi_c(z)}{dz} \Big|_{z_b+0}, \quad (11)$$

где m_z — значение эффективной массы электрона по направлению z , соответственно слева от границы $z = z_b - 0$ и справа от границы $z = z_b + 0$.

2. Расчет туннельной прозрачности

Коэффициент туннелирования электронов кремния рассчитывается численно на основе уравнения (8), дополненного уравнениями для огибающей блоховской функции зоны проводимости кремния и уравнения Шредингера в вакууме с граничными условиями (11). Потенциал $V(z)$ в вакууме задавался в простейшем случае в виде $V(z) = -eFz$, где F — тянущее электрическое поле у эмитирующей поверхности, в окисле — в виде $-eF_{\text{ox}}z$. Программа расчета предусматривает также использование потенциала, учитывающего известным образом силы электрического изображения [17]. Влияние электрического поля, проникающего в полупроводник, на туннельную прозрачность не учитывается.

Для расчета коэффициента туннелирования известный метод [18] модифицировался для применения к исследуемой задаче. Особенность уравнения (8) по

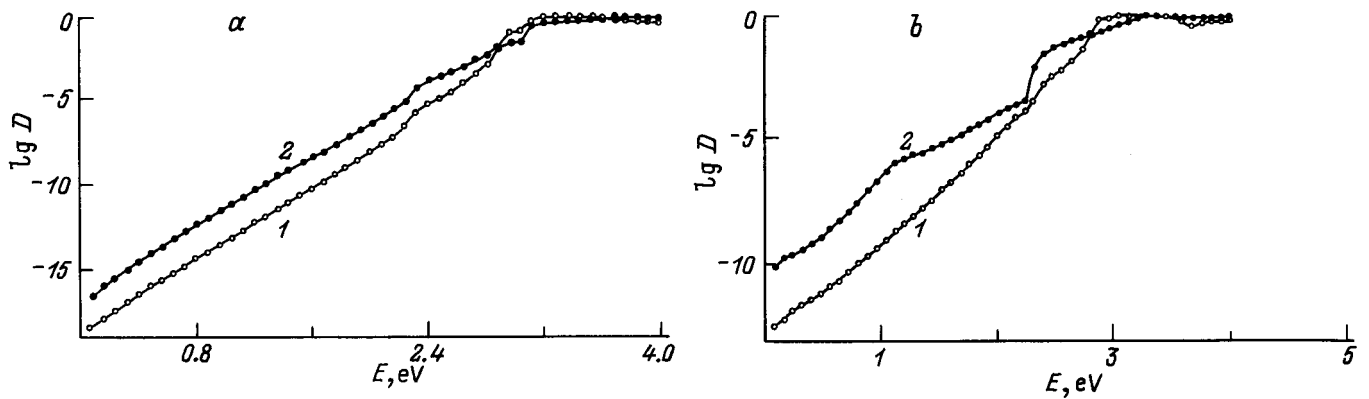


Рис. 1. Энергетическая зависимость коэффициента туннелирования через окисный слой толщиной 1 nm. F (10^7 V/cm): $a - 2$, $b - 4$. 1 — многозонная модель, 2 — однозонная модель.

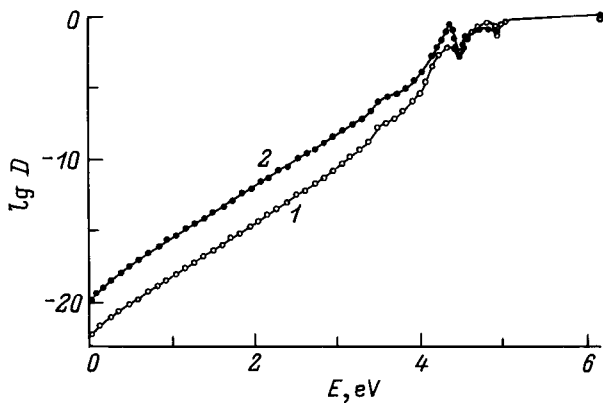


Рис. 2. Энергетическая зависимость коэффициента туннелирования через окисный слой толщиной 1.5 nm в поле $F = 2 \cdot 10^7$ V/cm. 1 — многозонная модель, 2 — однозонная модель.

сравнению с обычным уравнением Шредингера состоит в том, что кинетическая энергия движения электрона в z -направлении не является простой аддитивной функцией полной и потенциальной энергии. Это требует изменения вычислительной процедуры. Модель и алгоритм легли в основу прикладного пакета программ "Барьер" для расчета туннельной прозрачности на IBM PC, разработанного О.И. Казьминым с участием одного из авторов (В.Ф.).

На рис. 1, a, b и 2 показаны рассчитанные численно энергетические зависимости коэффициента туннелирования $D(\epsilon)$ при различных значениях тянущего поля F для толщин окисла $d = 10$ и 15 \AA для $k_{\parallel} = 0$ и энергии ϵ , отсчитанной от дна зоны проводимости кремния. Для сравнения приведены также зависимости $D(\epsilon)$, рассчитанные при тех же значениях F и d в однозонной модели для электронных состояний в окисле, описываемых уравнением Шредингера для огибающей блоховских волновых функций зоны проводимости окисла $\varphi_c(z)$ с той же эффективной массой m_{ox} и теми же условиями сшивки (11).

Как видно из этих рисунков, значения коэффициента туннелирования, вычисленные в различных моделях, существенно отличаются: при не слишком больших энергиях разница достигает нескольких порядков. Указанные различия связаны с многозонной природой состояний туннелирующего электрона в запрещенной зоне окисла. Происходит эффективное "утяжеление" электрона, которое тем больше, чем глубже состояние расположено в запрещенной зоне. При малых энергиях состояние туннелирующего электрона в значительной части окисла лежит глубоко в запрещенной зоне, поэтому именно при этих энергиях многозонная модель (8) приводит к значительному уменьшению коэффициента туннельной прозрачности по сравнению с однозонной моделью. При больших энергиях это различие, естественно, уменьшается, так как уменьшается доля областей, где состояние туннелирующего электрона лежит глубоко в запрещенной зоне окисла (рис. 3). Обратим также внимание на то, что при больших тянущих полях в спектре коэффициента туннельной прозрач-

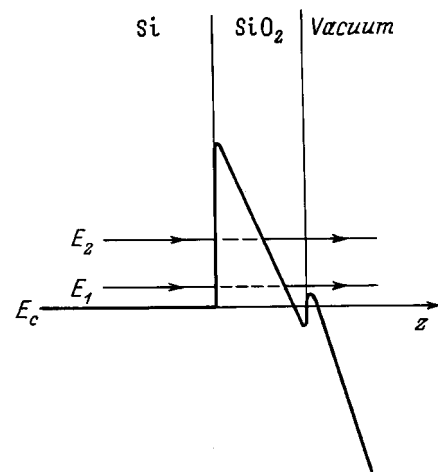


Рис. 3. Энергетическая схема туннелирования электронов кремния через окисный слой.

ности возникают области немонотонности, которые, видимо, связаны со сложной формой барьера и наличием областей как надбарьерного, так и подбарьерного прохождения в некоторых диапазонах энергии.

3. Оценка вероятности туннелирования с рассеянием импульса

В настоящем разделе оценивается туннелирование из энергетических долин, расположенных на кристаллографических осях, параллельных эмитирующей поверхности. Оно возможно, как указывалось, лишь при рассеянии импульса с изменением компоненты волнового вектора в плоскости поверхности на величину порядка вектора обратной решетки.

Учтем, например, переходы с испусканием фонона из рассматриваемых долин в состояния под центральной вышерасположенной долиной кремния с симметрией Γ_2 , совпадающей с симметрией зоны проводимости окисла.

Туннельный ток определяется известным выражением

$$I_1 = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} |\langle f | H_{e-f} | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_0), \quad (12)$$

где H_{e-f} — гамильтониан электрон-фононного взаимодействия через деформационный потенциал, $\langle f |$ и $| i \rangle$ — соответственно конечное и начальное состояния электрон-фононной системы, а E_f и E_i — энергии электрона в этих состояниях, отсчитанные от дна зоны проводимости кремния, ω_0 — частота фонона. Суммирование ведется по всем конечным состояниям электрона \mathbf{k} .

Огибающую блоховской функции электрона в начальном состоянии $| i \rangle$ в кремнии выберем в виде $\psi_i(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sin kz e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\boldsymbol{\rho}}$, где Ω — нормировочный объем, а в плоскости раздела кремний-окисел принято $z = 0$.

Для упрощения оценки при определении конечного состояния электрона пренебрежем электрическим полем в вакууме и используем квазиклассическое приближение в области окисла, считая, что во всем окисле $E_f < E_{\text{cox}}$, где E_{cox} — дно зоны проводимости окисла. Тогда для волновой функции конечного состояния электрона можно положить

$$\psi_f(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\boldsymbol{\rho}} \times \begin{cases} C_1 e^{k'z}, & z \leq 0, \\ C_2 \exp\left(\int_0^z k_{\text{ox}}(z') dz'\right) + C_2' \exp\left(-\int_0^z k_{\text{ox}}(z') dz'\right), & 0 < z < d, \\ \sin(k_v z + \delta), & z > d. \end{cases} \quad (13)$$

Здесь

$$\begin{aligned} k' &= \sqrt{2m'(E_0 - E_f) + k_{\parallel}^2}/\hbar, \\ k_{\text{ox}}(z) &= \sqrt{2m_{\text{ox}}[\Delta E_c + V(z) - E_f]}/\hbar, \\ k_v &= \sqrt{2m_0[E_f - V(d)]}/\hbar, \end{aligned} \quad (14)$$

E_0 — энергетический зазор между минимумами основных долин и упомянутой выше центральной долины, которую мы в целях упрощения считаем изотропной, m' — эффективная масса электрона в этой долине, ΔE_c — высота барьера на границе кремний-окисел.

Используя условие сшивки (11), получим при $z < 0$

$$\psi_f(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{A}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}'\boldsymbol{\rho} + k'z}, \quad (15)$$

где постоянная A равна

$$A = 2 [1 + \alpha^2]^{-1/2} [1 + \beta]^{-1} \int_0^d k(z) dz, \quad (16)$$

$$\alpha = m_0 k_v / m_{\text{ox}} k_{\text{ox}}(0), \quad \beta = m_{\text{ox}} k_v / m' k_{\text{ox}}(0).$$

Приближенное вычисление матричного элемента $\langle f | H_{e-f} | i \rangle$ приводит к следующей оценке туннельного тока (12):

$$I_1 = \frac{e}{\tau} \frac{\Delta E_c}{\sqrt{(E_0 - E_i + \hbar\omega_0)E_i}} \frac{\sqrt{m_{\text{ox}}}}{m_d^{3/2}} T_{\text{ox}}. \quad (17)$$

Здесь мы ввели стандартное время электрон-фононных столкновений τ [19] с деформационным потенциалом D_0 ,

$$\tau^{-1} = \frac{D_0^2 m^{3/2} \sqrt{E_i}}{\sqrt{2\pi\hbar^3 \rho \omega_0}}, \quad (18)$$

где m_d — эффективная масса плотности состояний в зоне проводимости кремния, ρ — плотность кристаллического кремния, и квазиклассический коэффициент прозрачности окисного барьера

$$T_{\text{ox}} = (1 + \beta)^{-2} (1 + \alpha^2)^{-1} \times \exp\left[(-2)^d \int_0^d dz k_2(z)\right] k = 0. \quad (19)$$

Для интересующих нас энергий оценка (17) дает $J_1 \approx \frac{e}{\tau} T_{\text{ox}}$. Для туннельного тока из долины, лежащей на оси [001], по порядку величины можно записать

$$J_0 \approx \frac{1}{\hbar} e E_i T_{\text{ox}} + J_1. \quad (20)$$

Отношение J_1/J_0 составляет для $E_i \geq kT$

$$\frac{J_1}{J_0} \approx \frac{\hbar}{\tau E_i} \approx 10^{-4}, \quad (21)$$

если принять типичное значение $\tau \approx 10^{-11}$ с и $T = 300$ К. Оценка (21) позволяет пренебречь непрямыми туннельными переходами из четырех долин по осям [100] и [010], что было сделано в разделе 2.

Таким образом, проведенные расчеты показывают, что полевая эмиссия с грани [001] кремния через окисный слой осуществляется из двух долин, расположенных вдоль направления [001]. Величина и спектр коэффициента туннельной прозрачности существенным образом определяются сложной структурой состояний в запрещенной зоне окисла и должны вычисляться исходя из четырехзонного приближения. Расчет по стандартной модели эффективной массы дает сильно завышенные значения туннельной прозрачности, так как не учитывает эффективного "утяжеления" электрона при туннелировании по состояниям глубоко в запрещенной зоне.

Авторы благодарят О.И. Казьмина за выполнение численных расчетов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 95-01-00384).

Список литературы

- [1] C. Spindt, C. Holland, R. Stowell. *Appl. Surf. Sci.* **16**, 268 (1983).
- [2] K. Betsui. *Tech. Dig. of IVMC-91. Nagahama* (1991). P. 26.
- [3] R. Meyer. *Ibid.* P. 6.
- [4] J. Browning. *Techn Digest of 8th IVMC (Portland, Oregon, USA, July 30-Aug.3, 1995)*. P. 1-4.
- [5] Y. Toma, S. Kanemaru, J. Itoh. *Ibid.* P. 9-13.
- [6] G.G. Lee, H.Y. Ahn, J.D. Lee, H.S. Park. *Ibid.* P. 14-16.
- [7] D.V. Eremtchenko, V.I. Makhov. *Surf. Sci.* **266**, 63 (1992).
- [8] В.А. Федирко. В кн.: Тез. докл. IV Всерос. науч.-техн. конф. "Физика окисных пленок". Петрозаводск (1994). С. 76.
- [9] Л.В. Келдыш. Глубокие уровни в полупроводниках. *ЖЭТФ* **45**, 2(8), 364 (1983).
- [10] M. Lenzlinger, E.H. Snow. *J. Appl. Phys.* **40**, 278 (1963).
- [11] А.П. Ковговцев. *ФТТ* **21**, 10, 3055 (1979).
- [12] J. Moserjiam. *J. Vac. Sci. Tech.* **11**, 6, 996 (1974).
- [13] T. Ando, S. Mori. *Surf. Sci.* **113**, 124 (1982).
- [14] В.А. Волков, Т.Н. Пинскер. *ЖЭТФ* **70**, 76, 2268 (1974).
- [15] Qi-Gao Zhu, H. Kroemer. *Phys. Rev.* **B 27**, 6, 3519 (1983).
- [16] В.Д. Шадрин. *ФТП* **24**, 3, 456 (1990).
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред. ФМ, М.* (1959). С. 60.
- [18] J. Ando, T. Itoh. *J. Appl. Phys.*, 4, 1497 (1987).
- [19] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Т. Калашников. *Физика полупроводников. Наука, М.* (1977). С. 473.