

Резонансный перенос носителей заряда через ловушечные состояния в диэлектрике в периодических наноструктурах Si/CaF₂

© Ю.А. Берашевич[¶], А.Л. Данилюк, В.Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
220013 Минск, Белоруссия

(Получена 4 октября 2001 г. Принята к печати 23 ноября 2001 г.)

Предложена модель туннельно-резонансного переноса носителей заряда через дискретный ловушечный уровень в диэлектрике в периодических наноразмерных структурах Si/CaF₂. Необходимым требованием туннельно-резонансного переноса при приложении внешнего смещения к структуре является совпадение энергии носителей заряда в яме кремния с энергетическим положением уровня ловушек в диэлектрике. Показано, что заполнение ловушечных состояний в диэлектрике и нарушение условий туннельно-резонансного переноса носителей через уровень ловушек при превышении энергии носителей в яме уровня ловушек в диэлектрике приводит к спаду токопереноса через структуру и образованию области отрицательного дифференциального сопротивления на вольт-амперных характеристиках периодических структур Si/CaF₂. В результате моделирования данного эффекта было обнаружено, что преимуществами приборов на основе периодических структур кремний/диэлектрик являются широкий диапазон рабочих температур 77–300 К и возможность совмещения с кремниевой технологией изготовления интегральных схем.

1. Введение

Наноразмерные структуры, образующие систему квантовых ям, привлекают все больший интерес исследователей и инженеров, что связано с перспективой построения на их основе твердотельных приборов, использующих квантово-размерные эффекты [1]. Начиная с 70-х годов огромное внимание уделяется периодическим структурам на основе полупроводников типа A^{III}B^{IV} [1–3]. В данных структурах впервые был теоретически предсказан [3], а позднее и экспериментально получен эффект резонансного туннелирования [4], отвечающий за участок отрицательного дифференциального сопротивления (ОДС) на их вольт-амперных характеристиках (ВАХ) в результате квантования энергетических уровней в потенциальной яме, образованной полупроводником с более узкой запрещенной зоной. На основе данного эффекта стало возможно построение логических элементов с высоким быстродействием, ограниченным только временем резонансного туннелирования носителей заряда через барьер. Тем не менее резонансно-туннельные структуры имеют ряд недостатков: низкие рабочие температуры для соблюдения условий квантования уровней в яме и несовместимость технологий получения резонансно-туннельных структур на основе полупроводников типа A^{III}B^{IV} с хорошо развитой кремниевой технологией изготовления интегральных микросхем.

Обнаружение участка отрицательного дифференциального сопротивления на ВАХ периодических Si/CaF₂-структур [5] при комнатной температуре продемонстрировало перспективу для создания логических устройств на базе кремниевой технологии и подтолкнуло к интенсивному изучению квантово-размерных структур на основе кремния [6]. В данном случае при детальном изучении этого эффекта было установлено, что участок

ОДС возникает из-за накопления заряда в диэлектрике при переносе носителей заряда через дискретный уровень ловушек и исчезает при незначительном снижении температуры. Однако изучение тех же структур другой группой экспериментаторов [7,8] выявило поведение, характерное для резонансного транспорта носителей заряда через структуру как при комнатных температурах, так и при температуре жидкого азота (77 К). Тем не менее адекватного объяснения, согласующего условия измерения и электрофизические параметры структуры с механизмом резонансного переноса носителей заряда в этих структурах, не было предложено.

Данная работа посвящена разработке модели транспорта носителей заряда в периодических наноструктурах Si/CaF₂, описывающей появление условий для резонансного переноса и возникновения ОДС.

2. Модель

Ограничение тонкого слоя кремния слоями широкозонного диэлектрика CaF₂ образует систему, где диэлектрик выполняет функцию потенциального барьера, а кремний — квантовой ямы. В структурах кремний/диэлектрик условия квантования уровней в потенциальной яме нарушены наличием дефектов на границах раздела материалов, концентрация которых достигает 10²⁶ м⁻³ [9]. Однако в ряде экспериментальных работ было выявлено появление резонансного пика на ВАХ в структурах Si/CaF₂. Толщина слоя полупроводника в этих структурах варьировалась в пределах 2.8–3.4 нм. Резонанс наблюдался как при комнатных температурах, так и при температуре жидкого азота (77 К), причем отношение максимального тока к току в минимуме ОДС не снижалось с ростом температуры, что наблюдается в результате уширения резонансного уровня в яме для резонансно-туннельных структур на основе

[¶] E-mail: julia@nano.bsuir.edu.by

полупроводников $A^{III}B^{IV}$ [4]. Условия, при которых были получены эти данные, а именно комнатные температуры, значительные размеры потенциальной ямы, наличие рассеяния носителей заряда на границах раздела исключают появление резонансно-туннельного механизма переноса носителей заряда с участием резонансных уровней в квантовой яме.

В то же время, как было отмечено в наших предыдущих исследованиях [10], посвященных транспорту носителей заряда в периодических структурах Si/CaF₂, в подобных системах преобладает перенос носителей заряда через ловушечные состояния в слоях диэлектрика. Уровень ловушек предположительно образован дефектами кристаллической решетки и по экспериментальным данным этот уровень с концентрацией ловушек $N_t \approx 10^{25} \text{ м}^{-3}$ является дискретным [9]. Как показали исследования механизмов ионизации излучением глубоких ловушечных состояний в различных материалах [14] при условии, когда вероятность активационного процесса ионизации ловушечного состояния намного меньше, чем вероятность туннелирования носителей заряда с этого состояния, последний механизм является преобладающим. В периодических структурах Si/CaF₂ уровень электронных ловушек в диэлектрике является глубоким и располагается вблизи зоны проводимости кремния [9], поэтому вероятность активационного захвата носителей заряда на него из зоны кремния высока. Энергия ионизации таких ловушек, даже для электронов, лежит в пределах 3 эВ и вероятность активационного переноса носителей заряда с ловушки на ловушку незначительна по сравнению с туннелированием захваченных носителей через барьер толщиной, сравнимой с постоянной решетки материала. Следовательно, полагаем, что преобладающий механизм переноса носителей заряда в периодических структурах кремний/диэлектрик при воздействии внешнего электрического поля состоит в активационном захвате носителей заряда из зоны проводимости кремния на граничные состояния ловушечного уровня в диэлектрике $j = 1$ и в последующем их перемещении по ловушечным состояниям посредством туннельных переходов. Идентичность ловушечных уровней в диэлектрике предполагает сохранение энергии и импульса переносимых таким образом носителей. Это приводит к резонансному характеру этого транспортно-го процесса.

Энергетическая диаграмма двухпериодной структуры Si/CaF₂ при приложении внешнего смещения и рассматриваемые механизмы переноса электронов и дырок в ней показаны на рис. 1. Кроме переноса носителей заряда через уровень ловушек в диэлектрике, в модель включено также упругое туннелирование, которое неизменно присутствует в периодических структурах с чередующимися потенциальными барьерами и ямами. Вероятность упругого туннелирования определяем в рамках аппроксимации Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ) [12]. В отсутствие внешнего смещения форму потенциальных барьеров предполагаем прямоугольной.

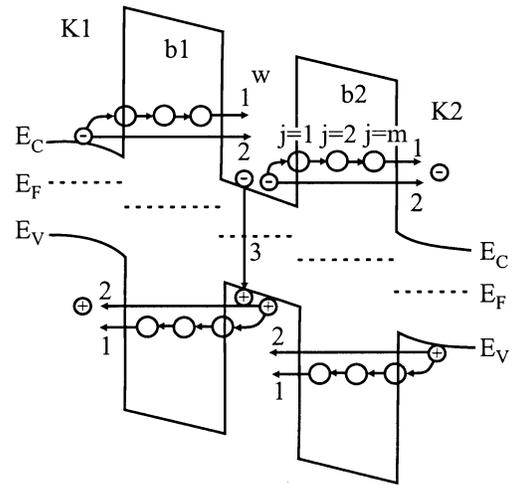


Рис. 1. Энергетическая диаграмма двухпериодной структуры кремний–диэлектрик, процессы переноса и рекомбинации носителей заряда в ней: 1 — перенос по ловушечным состояниям в диэлектрике, 2 — упругое туннелирование через потенциальный барьер, 3 — межзонная рекомбинация.

Распределение потенциала в структуре учитываем с помощью уравнения Пуассона [10].

При приложении внешнего смещения, когда носители заряда в зоне проводимости кремния находятся ниже уровня ловушек в диэлектрике E_t , темп захвата носителей заряда на ловушку $j = 1$, который прямо пропорционален концентрации пустых ловушек, может быть записан как [12]

$$g_t = S v_T n N_t \frac{D(\varphi_S)}{1 + D(\varphi_S)}, \quad (1)$$

где S — сечение захвата носителей заряда на ловушку; v — тепловая скорость носителей заряда, n — концентрация носителей в зоне проводимости кремния; $q\varphi_S$ — энергия носителей в яме, зависящая от распределения потенциала в структуре; $D(\varphi_S)$ — функция заполнения ловушечных состояний носителями заряда для случае однородного пространственного распределения ловушек, равная [12]

$$D(\varphi_S) = g \exp\left(-\frac{E_t - q\varphi_S}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где g — фактор вырождения ловушек, k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

При внешнем смещении, когда носители заряда имеют энергию, сравнимую с уровнем ловушек в диэлектрике, практически все ловушечные состояния заполнены и темп захвата электронов из зоны проводимости кремния определяется как

$$g_t = S v_T n N_t \left(1 - \frac{D(\varphi_S)}{1 + D(\varphi_S)}\right). \quad (3)$$

Захваченные носители заряда на первую ловушку дискретного уровня ($j = 1$) в диэлектрике перемещаются по ловушечному уровню посредством туннельно-резонансных переходов. Определение вероятности таких переходов подробно описано в работе [13],

Одним из важных параметров, характеризующих электронные приборы, является их быстродействие. В рассматриваемом случае перенос носителей через потенциальный барьер является многоступенчатым процессом. Для определения быстродействия приборов на основе периодических структур кремний/диэлектрик необходимо учитывать временные характеристики процессов активационного захвата носителей заряда на ловушечный уровень, их туннельный перенос по ловушкам, межзонную рекомбинацию и упругое туннелирование. Описание указанных процессов производим с помощью системы кинетических уравнений:

для слоя кремния:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{k1}}{dt} &= G_n - \frac{n_{k1}}{\tau_a} - \frac{n_{k1}p_{k1}/p_{k2}}{\tau_{R0}} - \frac{n_{k1}}{\tau_{VKB}}, \\ \frac{dn_w}{dt} &= \frac{n_{j=m,b1}}{\tau_t} + \frac{n_{k1}}{\tau_{VKB}} - \frac{n_w}{\tau_a} - \frac{n_w p_w/p_{k2}}{\tau_{R0}} - \frac{n_w}{\tau_{VKB}}, \\ \frac{dn_{k2}}{dt} &= \frac{n_{j=m,b2}}{\tau_t} + \frac{n_w}{\tau_{VKB}} - \frac{n_{k2}p_{k2}/n_{k1}}{\tau_{R0}}; \end{aligned}$$

для $j \neq 1$ ловушки в 1 и 2 слое диэлектрика:

$$\frac{dn_{j+1,b1(2)}}{dt} = \frac{n_{j,b1(2)}}{\tau_t} - \frac{n_{j+1,b1(2)}}{\tau_t}; \quad (4)$$

для $j = 1$ ловушки в 1 и 2 слое диэлектрика:

$$\frac{dn_{1,b1(2)}}{dt} = \frac{n_{k1(w)}}{\tau_a} - \frac{n_{1,b1(2)}}{\tau_t},$$

где $j = 1 \dots m$ — номер ловушки на траектории движения носителей заряда по ловушечному уровню; G_n — темп генерации электронов на контакте n -типа k_1 ; n_{b1}, n_{b2} — концентрация носителей заряда на ловушках в первом и во втором барьере соответственно; $\tau_a = n/g_t$ — время захвата носителей заряда на ловушки, $\tau_t = (\omega_0 D_{tun})^{-1}$ — время туннелирования носителей заряда с одной ловушки на другую с вероятностью D_{tun} ; ω_0 — частота локальных колебаний носителей заряда ($\approx 10^{12} \text{ с}^{-1}$ [11]); $\tau_{VKB} = (\omega_0 D_{VKB})^{-1}$ — время упругого туннелирования носителей заряда через барьер, определяемое вероятностью туннелирования D_{VKB} [11]; τ_{R0} — время излучательной рекомбинации. В случае, когда $j = 1$, для первого (второго) барьера

$$\frac{n_{j,b1(b2)}}{\tau_t} = \frac{n_{k1(w)}}{\tau_a}.$$

Нами получено решение системы кинетических уравнений (4) при наличии внешнего смещения для нестационарного случая в виде

$$\begin{aligned} n_{k2}(t) &= n_{k2}(0) + n_{b2}(t) \\ &+ n_w(t) \frac{\tau_1}{\tau_{VKB}} [1 - \exp(-t/\tau_{VKB})], \quad (5) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} n_{b2}(t) &= \sum_{j=1}^m n_{j,b2}(0) \cdot [1 - \exp(-t/\tau_t)]^{j-1} \cdot \exp(-t/\tau_t) \\ &+ n_w(t) \frac{\tau_1}{\tau_a} [1 - \exp(-t/\tau_a)] [1 - \exp(-t/\tau_t)]^m, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n_w(t) &= n_w(0) [1 - \exp(-t/\tau_1)] + n_{b1}(t) \\ &+ n_{k1} \frac{\tau_1}{\tau_{VKB}} [1 - \exp(-t/\tau_{VKB})], \quad (7) \end{aligned}$$

$$\tau_1 = \left[\frac{\tau_R \tau_a + \tau_R \tau_{tun} + \tau_{tun} \tau_a}{\tau_R \tau_a \tau_{tun}} \right]^{-1}, \quad (8)$$

$$\tau_R = \tau_{R0} \frac{p_{k2}}{p_w}. \quad (9)$$

Для первого барьера концентрация носителей заряда на m ловушечном состоянии $n_{m(b1)}(t)$ записывается аналогично выражению (6).

При определении вероятности захвата носителей на ловушки из зоны проводимости кремния, а также при их туннелировании по ловушкам необходимо дополнительно учитывать плотность свободных ловушек. При ступенчатом росте внешнего смещения происходит накопление захваченных носителей заряда на ловушках и уменьшение концентрации пустых ловушек. В импульсном режиме во время подачи импульса Δt заряд накапливается, при отсутствии импульса происходит разряд заполненных ловушечных состояний, при этом темп генерации носителей заряда на инжектирующем контакте принимается равным 0. Для переноса дырок через структуру записывается аналогичная система кинетических уравнений.

Величину тока, протекающего через структуру, определяем из концентрации электронов, прошедших на второй контакт n_{k2} , и дырок, прошедших на первый контакт p_{k1} , с учетом распределения потенциала по структуре [10]. Предполагаем, что уровни ловушек для электронов E_l относительно дна зоны проводимости и дырок относительно потолка валентной зоны кремния равны 0.1 эВ, толщина диэлектрика составляет 1.5 нм. Концентрация носителей на электронном и дырочном контактах полагается равной $n_{k1} = p_{k2} = 5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

3. Результаты моделирования

Основными параметрами, контролирующими процесс переноса носителей заряда в структурах Si/CaF₂ через дискретный ловушечный уровень в диэлектрике, являются соотношение концентраций носителей заряда на контактах и концентрация ловушек, а также закон изменения внешнего смещения и соотношение вероятностей захвата и туннельного перехода носителя заряда с ловушки в яму. Поэтому численное моделирование ВАХ исследуемых структур проводилось с учетом перечисленных факторов.

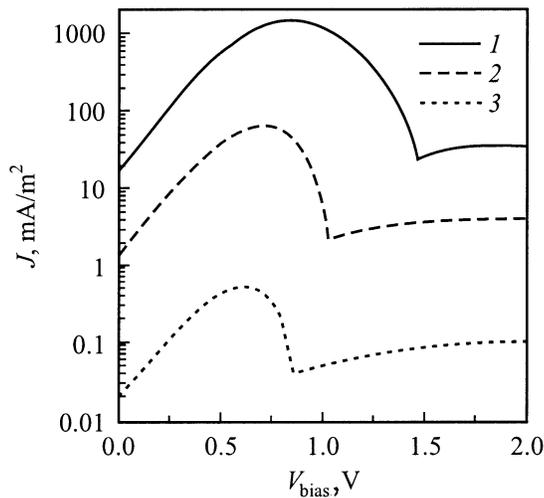


Рис. 2. Влияние концентрации ловушек на ВАХ двухпериодной структуры Si/CaF₂ при $T = 300$ К, $\Delta t = 5 \cdot 10^{-8}$ с, $V_{step} = 0.1$ В, $N_t, \text{м}^{-3}$: 1 — $3 \cdot 10^{24}$, 2 — $5 \cdot 10^{23}$, 3 — 10^{23} .

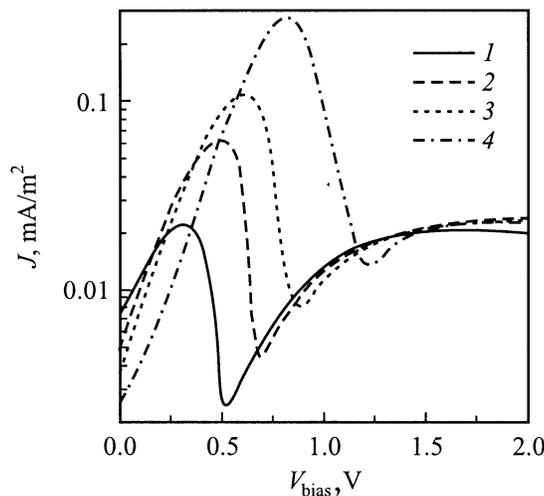


Рис. 3. Влияние шага изменения внешнего смещения на ОДС в двухпериодной структуре Si/CaF₂ при $T = 300$ К, $\Delta t = 5 \cdot 10^{-8}$ с, V_{step} , В: 1 — 0.02, 2 — 0.05, 3 — 0.1, 4 — 0.2.

Рост внешнего смещения, приложенного к структуре кремний–диэлектрик, ведет к росту скорости переноса носителей заряда через дискретный ловушечный уровень в диэлектрике. При этом перенос носителей путем упругого туннелирования носителей через барьер, определяемый в рамках ВКБ-аппроксимации, незначителен. При заполнении всех ловушек скорость активационного захвата носителей заряда на уровень, так же как и туннельно-резонансный перенос по нему, снижается и определяется скоростью освобождения ловушек. Причем за счет снижения скорости захвата носителей на ловушки из зоны проводимости кремния происходит увеличение вклада других процессов: рекомбинации и

упругого туннелирования носителей через барьер [система уравнений (4)].

На рис. 2 представлены результаты расчета ВАХ двухпериодной структуры Si/CaF₂ для различных концентраций ловушек в диэлектрике. Увеличение концентрации ловушек, при постоянном значении концентрации носителей заряда на контактах и постоянных параметрах структуры, влечет за собой рост плотности тока через структуру. Как следствие, происходит увеличение тока в максимуме и отношения максимального тока к минимальному току в области ОДС J_{max}/J_{min} . При этом максимум тока смещается в сторону больших внешних смещений. Это происходит за счет роста концентрации носителей заряда, необходимых для заполнения всех ловушек, чем и обуславливается уширение токового пика.

Кроме того, на накопление заряда влияет также продолжительность шага Δt приложения смещения V_{step} в пошаговом режиме подачи внешнего смещения. Результаты расчета вольт-амперных характеристик двухпериодной структуры Si/CaF₂ в зависимости от V_{step} представлены на рис. 3. Так, уменьшение шага V_{step} смещает наступление резонансного условия в структуре в сторону больших смещений, в результате увеличивается пиковый ток и отношение J_{max}/J_{min} .

В результате расчета найдено, что времена заряда и разряда ловушечных состояний ограничены значениями 10^{-10} – 10^{-8} с. При временном шаге подачи внешнего смещения в диапазоне $\Delta t = 10^{-6}$ – 1.0 с ВАХ исследуемой структуры практически не изменяется и имеет ярко выраженную область ОДС. При уменьшении Δt пе-

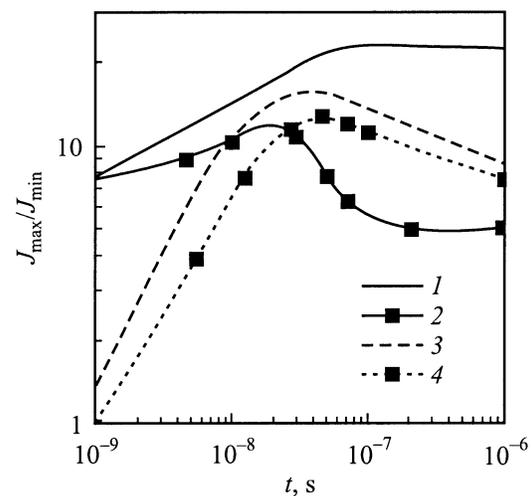


Рис. 4. Влияние времени задержки t_D и длительности импульса t_I на отношение токов в максимуме и минимуме ОДС при подаче напряжения в импульсном режиме для двухпериодной и трехпериодной структур Si/CaF₂ при $T = 300$ К, $N_t = 10^{24} \text{м}^{-3}$. Изменение времени задержки t_D при $t_I = 10^{-6}$ с, число периодов N : 1 — 2, 2 — 3. Изменение времени длительности импульса t_I при $t_D = 10^{-9}$ с, число периодов N : 3 — 2, 4 — 3.

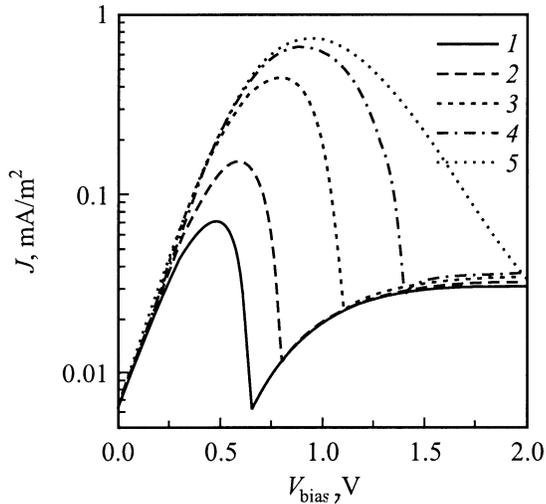


Рис. 5. Влияние времени задержки импульса t_D на вольт-амперные характеристики двухпериодной структуры Si/CaF₂ при $T = 300$ К, $N_t = 10^{24}$ м⁻³, $t_l = 10^{-6}$ с, t_D , с: 1 — 10^{-9} , 2 — 10^{-8} , 3 — $3 \cdot 10^{-8}$, 4 — $5 \cdot 10^{-8}$, 5 — 10^{-7} .

ренос носителей заряда через ловушки экспоненциально уменьшается и при $\Delta t = 5 \cdot 10^{-10}$ с область ОДС исчезает.

Импульсный режим подачи внешнего смещения характеризуется двумя временными параметрами: длительностью импульса t_l , определяющей степень зарядки ловушечных состояний в диэлектрике, и временем задержки t_D — временным интервалом между двумя ближайшими импульсами, обуславливающим разряд состояний. Два этих параметра оказывают влияние на вид области ОДС на вольт-амперных характеристиках периодических структур кремний/диэлектрик.

Результаты расчета отношения токов в максимуме и минимуме ОДС (J_{\max}/J_{\min}) в зависимости от времени задержки импульса и его длительности для структур Si/CaF₂ с двумя и тремя барьерами представлены на рис. 4. Как показали результаты расчета, рост числа периодов N ведет к уширению резонанса на вольт-амперных характеристиках и размыванию области ОДС, которая исчезает при $N = 14$.

На рис. 5 приведена ВАХ двухпериодной структуры Si/CaF₂ для различных времен задержки импульса t_D . Как видно из приведенных результатов, рост времени разряда ловушечных состояний ведет к увеличению максимального тока и к уширению резонанса за счет уменьшения скорости накопления захваченного заряда на ловушечном уровне в диэлектрике.

Уменьшение температуры снижает вероятность захвата носителей заряда на ловушки. В результате ток на возрастающем участке ВАХ снижается и растет вклад переноса носителей заряда через структуры по механизму упругого туннелирования. Однако вплоть до температуры 77 К отношение J_{\max}/J_{\min} практически не меняется для ловушечных уровней в диэлектрике, расположенных вблизи зоны проводимости кремния.

Ниже температуры 77 К это соотношение уменьшается и исчезает в результате доминирования вклада упругого туннелирования, который слабо зависит от температуры.

4. Заключение

Для описания механизма возникновения резонансных условий в периодических наноструктурах кремний/диэлектрик предложена модель резонансного переноса носителей заряда через дискретный уровень ловушек в диэлектрике наряду с упругим туннелированием носителей через потенциальный барьер.

Показано, что перенос носителей заряда через ловушечный уровень при близких значениях концентрации носителей заряда на контактах и концентрации ловушечных состояний в диэлектрике контролируется концентрацией этих ловушек и достигает своего максимального значения при совпадении энергии носителей заряда в яме и положением ловушечного уровня в диэлектрике. Дальнейший рост энергии носителей заряда ведет к снижению вероятности переноса носителей заряда через ловушечный уровень в диэлектрике из-за уменьшения концентрации пустых ловушек. При этом основное влияние на появление резонансных условий в структуре оказывает скорость заполнения ловушек при подаче внешнего смещения, которая определяется шагом изменения этого смещения и временем его действия.

Преимуществами приборов на основе данных структур являются широкий диапазон рабочих температур 77–300 К и возможность совмещения с кремниевой технологией изготовления интегральных микросхем.

Работа выполнена в рамках Межвузовской программы „Наноэлектроника“ и проекта Т99-102 Фонда фундаментальных исследований республики Беларусь.

Список литературы

- [1] C.G. Smith. Rep. Prog. Phys., **59**, 235 (1994).
- [2] L.L. Chang, P.J. Stiles, L. Esaki. J. Appl. Phys., **38**, 4440 (1967).
- [3] L. Esaki. Phys. Rev., **109**, 63 (1958).
- [4] R. Tsu, L. Esaki. Appl. Phys. Lett., **22**, 562 (1973).
- [5] S. Ménard, A.N. Kholod, M. Liniger, F. Bassani, V.E. Borisenko, F. Arnaud d'Avitaya. Phys. St. Sol. (a), **181**, 561 (2000).
- [6] L. Vervoort, F. Bassani, I. Michalcescu, J.C. Vial, F. Arnaud d'Avitaya. Phys. St. Sol. (b), **190**, 123 (1995).
- [7] M. Watanabe, T. Funayama, T. Teraji, N. Sakamaki. Jap. J. Appl. Phys., **39**, pt. 2, L716 (2000).
- [8] M. Watanabe, I. Iketani, M. Asada. Japan J. Appl. Phys., **39**, pt. 2, L964 (2000).
- [9] V. Ioannou-Sougleridis, V. Tsakiri, A.G. Nassiopoulou. In: *Silicon Modules for Integrated Light Engineering*, Report on the ESPRIT Project N 28 741 (Marseille, France, 2000) p. 133.
- [10] Ю.А. Берашевич, А.Л. Данилюк, А.Н. Холод, В.Е. Борисенко. ФТП, **35**, 110 (2001).

- [11] С.Д. Ганичев, И.Н. Яссиевич, В. Преттл. ФТП, **39**, 1905 (1997).
- [12] К. Као, В. Хуанг. *Перенос электронов в твердых телах* (М., Мир, 1984) т. 1. [Пер. с англ.: K.C. Kao, W. Hwang. *Electrical transport in solids* (N.Y., Pergamon Press) v. 1].
- [13] В.Я. Кирпиченков. ЖЭТФ, **116**, 1048 (1999).

Редактор Л.В. Беляков

Resonance-assisted transfer of charge carriers in periodical Si/CaF₂ nanostructures through trap states

Yu.A. Berashevich, A.L. Danilyuk, V.E. Borisenko

Belorussian State University of Information Technology and Radioelectronics,
220013 Minsk, Belarus