

Дисперсионный транспорт дырочных поляронов в МОП-структурах после ионизирующего излучения

© О.В. Александров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,
197376 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Aleksandr_ov@mail.ru

Поступила в Редакцию 20 июля 2022 г.

В окончательной редакции 22 ноября 2022 г.

Принята к публикации 18 декабря 2022 г.

Показано, что описание дисперсионного транспорта дырочных поляронов на основе модели многократного захвата позволяет количественно описать кинетику накопления и релаксации объемного заряда в МОП-структурах после ионизирующего облучения при низких (80–293 К) температурах. Проведено моделирование временных зависимостей порогового напряжения от температуры, напряженности электрического поля и толщины подзатворного оксида кремния. Показано, что кинетика релаксации объемного заряда определяется прыжковым транспортом дырочных поляронов с уровнями локализованных состояний в диапазоне 0.08–0.55 эВ, концентрацией поляронных состояний, влиянием напряженности электрического поля на среднюю энергию поляронов, а также зависимостью параметра дисперсионности α от толщины подзатворного оксида. Проведена оценка поляронного радиуса.

Ключевые слова: МОП-структура, ионизирующее облучение, дисперсионный транспорт, поляроны, моделирование.

DOI: 10.21883/FTP.2022.12.54516.3947

1. Введение

При ионизирующем облучении (ИО) МОП-структур образуются положительный объемный заряд в подзатворном диэлектрике и поверхностные состояния (ПС) на межфазной границе (МФГ) Si–SiO₂, влияющие на электрические характеристики приборов [1–3]. Образование объемного заряда (ОЗ) в диэлектрике и его последующая релаксация при низких температурах облучения ($T < 300$ К) связаны с низкой подвижностью дырок в диоксиде кремния SiO₂ [4–6]. Релаксация ОЗ дырок после окончания импульса ИО при комнатной температуре происходит за доли секунды, тогда как при более низких температурах может длиться часами [4–6]. В работах [4,7] этот эффект был объяснен образованием дырочных поляронов (комбинация дырки и созданного ею поля упругой деформации) и их прыжковым переносом по локализованным состояниям в запрещенной зоне аморфного SiO₂. В неупорядоченной структуре аморфного SiO₂ дырочные поляроны перемещаются прыжками между потенциальными ямами разной глубины (локализованными состояниями), в которых задерживаются на время, зависящее от глубины ямы. В работах [4–7] такой дисперсионный транспорт описывается моделью случайных блужданий с непрерывным временем (continuous time random walk (CTRW)), развитой Шером и Монтролом [8]. В рамках модели CTRW было получено описание зависимости напряжения плоских зон [4–6] и относительной плотности тока [7] МОП-структур от времени после импульса ИО. Было продемонстрировано соответствие

экспериментальных зависимостей универсальной кривой в масштабе: измеряемая величина, отнесенная к ее максимальному значению, от логарифма времени, отнесенного к времени излома зависимости. По наклону зависимостей определялся параметр дисперсионности α ($0 < \alpha < 1$). Было показано, что параметр α не зависит от температуры ИО [7], но зависит от технологии изготовления МОП-структур, находясь в диапазоне 0.14–0.3 [4,7]. Отметим, что теория CTRW позволяет описать только форму временной зависимости и только относительной измеряемой величины.

Дисперсионный транспорт носителей заряда в неупорядоченных материалах может быть описан также моделью многократного захвата (multiple trapping (MT)) носителей на локализованные состояния (ловушки) с диапазоном энергий связи [9]. В работах [9,10] показана эквивалентность моделей MT и CTRW. В работе [11] при описании дисперсионного транспорта дырок в SiO₂ было продемонстрировано, что модель MT имеет ряд преимуществ перед моделью CTRW. В частности, модель MT позволяет лучше описать экспериментальные зависимости по накоплению заряда дырок при коротких и длительных временах после ИО при разных температурах и напряженностях электрического поля [11]. Более того, как было показано в [12] для H в SiO₂, модель MT позволяет дать количественное описание дисперсионного переноса.

Цель настоящей работы — количественное описание и анализ дисперсионного транспорта дырочных поляронов в подзатворном SiO₂ после ионизирующего облучения МОП-структур при низких температурах на основе модели многократного захвата.

2. Описание модели

В отличие от кристаллических тел в аморфных телах сохраняется только ближний порядок и отсутствует дальний. В сетке аморфного диоксида кремния SiO₂ имеется разброс в мостиковых углах связи Si–O–Si от 120 до 180° [19], что приводит к разбросу (дисперсии) в энергиях связи дырочного полярона с атомами сетки. Поляронный перенос дырок в аморфном SiO₂ происходит прыжками, как полагалось в [7], по 2p_π(O)-орбиталям кислорода, или, как показано в работе [13], по 3s, 3p, 3d(Si)–2p, 2s(O)-орбиталям, т.е. по близко расположенным атомам Si и O. Рассматриваем потенциальные ямы для дырочных поляронов в SiO₂ как локализованные состояния. В соответствии с моделью многократного захвата непрерывное распределение локализованных состояний по энергиям заменяем на систему k состояний с дискретными уровнями E_{bi}, соответствующими энергии i-х локализованных состояний Si. Захват дырки h⁺ на состояние S_i с образованием полярона P_i⁺ происходит со скоростью k_{1i}, а освобождение со скоростью k_{2i} согласно реакции



При таком многократном захвате и освобождении дырок с k локализованных состояний в соответствии с реакцией (1) уравнения дисперсионного транспорта дырок h⁺ с образованием дырочных поляронов P_i⁺, с учетом их диффузии и дрейфа в электрическом поле МОП-структуры принимают вид:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p \frac{\partial(Ep)}{\partial x} - \sum_{i=0}^k k_{1i} C_{S_i}^0 p + \sum_{i=0}^k k_{2i} C_{P_i}^+ + G, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{P_i}^+}{\partial t} = -\frac{\partial C_{S_i}^0}{\partial t} = k_{1i} C_{S_i}^0 p - k_{2i} C_{P_i}^+, \quad i = 0, 1, 2, \dots, k, \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon \epsilon_0} \left(p + \sum_{i=0}^k C_{P_i}^+ \right), \quad (4)$$

где t — время; x — координата, отсчитываемая от затвора при x = 0 до МФГ с кремниевой подложкой при x = d, d — толщина подзатворного диэлектрика; p — концентрация свободных (нелокализованных) дырок; D_p и μ_p — их коэффициент диффузии и подвижность; C_{S_i}⁰ и C_{P_i}⁺ — концентрации i-х пустых и заполненных поляронных состояний соответственно; k — количество локализованных состояний; V — потенциал, E — напряженность электрического поля, E = -dV/dx, q — заряд электрона; ε — относительная диэлектрическая проницаемость диоксида кремния (ε = 3.9); ε₀ —

электрическая постоянная. Темп генерации электронно-дырочных пар G определяется мощностью радиационной дозы F, коэффициентом генерации электронно-дырочных пар k_g и вероятностью разделения пар электрическим полем до их начальной рекомбинации: G(E) = Fk_gf_y(E), где k_g = 1.3 · 10⁻⁶ Кл · см⁻³/рад. Для f_y(E) использовалась аппроксимация [14]:

$$f_y(E) = \left[\frac{0.27}{(E + 0.084)} + 1 \right]^{-1},$$

где E в МВ/см.

Полагаем, что распределение плотности локализованных состояний по энергии имеет экспоненциальный вид, характерный для некристаллических материалов [15]:

$$C_{P_i}^0(E_{bi}) = N_p^0 \exp(-E_{bi}/E_0), \quad (5)$$

где N_p⁰ — полная концентрация пустых и заполненных поляронных состояний, N_p⁰ = C_S⁰ + C_P⁺, C_S⁰ = ∑_{i=0}^k C_{S_i}⁰, C_P⁺ = ∑_{i=0}^k C_{P_i}⁺; E_{bi} — энергия уровня i-го поляронного состояния, E₀ — характеристическая (средняя) энергия поляронов, связанная с дисперсионным параметром α соотношением α = k_BT/E₀, k_B — постоянная Больцмана, T — температура.

Полагаем, что в начальный момент времени концентрации дырок и поляронов нулевые:

$$p(x, 0) = 0; \quad C_{P_i}^+(x, 0) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \dots, k. \quad (6)$$

Граничные условия для свободных дырок соответствуют их поглощению на обеих МФГ Si–SiO₂ и SiO₂ — затвор:

$$p(0, t) = p(d, t) = 0. \quad (7)$$

К затвору приложено напряжение V_G:

$$V(0) = V_G; \quad V(d) = 0. \quad (8)$$

Пороговое напряжение МОП-структур определяется объемным зарядом в подзатворном диэлектрике,

$$V_{th} = -Q_{ot}/C_{ox}, \quad (9)$$

где C_{ox} — удельная емкость диэлектрика, C_{ox} = εε₀/d, Q_{ot} — эффективный объемный заряд. Вклад в пороговое напряжение зарядов вблизи кремниевой подложки больше, чем вклад зарядов вблизи затвора, что учитывается в выражении для эффективного объемного заряда:

$$Q_{ot} = \frac{q}{d} \int_0^d x(p + C_P^+) dx, \quad (10)$$

где C_P⁺ — полная концентрация поляронов, C_P⁺ = ∑_{i=0}^k C_{P_i}⁺.

Полагаем, что все поляронные состояния захватывают дырки с одинаковой скоростью: k_{1i} = k₁ = σ_pv_{th}D_p/D_n; где v_{th} — тепловая скорость электронов, v_{th} ≅ 10⁷ см/с,

σ_p — сечение захвата дырок, зависящее от напряженности электрического поля согласно [16]. Использовались следующие значения параметров: $\mu_p = 2 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ [7], $D_p = \mu_p k_B T$. Перескок дырок в другое поляронное состояние происходит путем термоэмиссии со скоростью, зависящей от энергии полярона E_{bi} , $k_{2i} = AT^2 \exp(-\frac{E_{bi}}{k_B T})$, где A — постоянная ($A = 1.6 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$). Минимальная ($E_{b0} = 0.08 \text{ эВ}$ при $T = 80 \text{ К}$, $E_{b0} = 0.26 \text{ эВ}$ при $T \geq 124 \text{ К}$) и максимальная ($E_{bk} = 0.55 \text{ эВ}$) энергии уровней локализованных состояний определялись из сопоставления расчетов с экспериментальными зависимостями.

3. Результаты расчетов

Уравнения модели (2)–(5) решались численно с использованием неявной и явной разностных схем с начальными условиями (6), граничными условиями (7), (8), с учетом (9) и (10). Решения сравнивались с экспериментальными данными работ [5,6] по измерению порогового напряжения МОП-транзисторов после облучения электронами с энергией 13 МэВ импульсами длительностью 4 мкс с дозой 30 крад (SiO_2). Варьировались температура облучения, напряженность внешнего электрического поля ($E_G = V_G/d$) и толщина подзатворного оксида кремния.

Влияние температуры на кинетику сдвига порогового напряжения ΔV_{th} при напряженности внешнего электрического поля $E_G = 1 \text{ МВ/см}$ во время и после ИО показано на рис. 1. На рисунке приведены экспериментальные данные работы [5] (значки 1–7) и расчетные кривые (1'–7') при $\alpha = 0.12$ с учетом дисперсии уровней E_{bi} от $E_{b0} = 0.26 \text{ эВ}$ до $E_{bk} = 0.55 \text{ эВ}$. При расчете варьировалась полная концентрация поляронных состояний N_p^0 . Как видно из рисунка, с повышением температуры среднее время релаксации уменьшается за счет уменьшения концентрации поляронных состояний N_p^0 .

Влияние внешнего электрического поля на кинетику относительного сдвига порогового напряжения при $T = 80 \text{ К}$ после ИО показано на рис. 2. Значения текущего сдвига $V_{th}(t)$ отнесены к его максимальному значению в начальный момент релаксации (в момент окончания импульса) $\Delta V_{th}(0)$. На рисунке приведены экспериментальные данные работы [6] (значки 1–4). Расчет с учетом дисперсии уровней E_{bi} от $E_{b0} = 0.08 \text{ эВ}$ до $E_{bk} = 0.55 \text{ эВ}$ показан кривыми 1'–4'. При расчете варьировалась характеристическая энергия полярона E_0 . Как видно из рисунка, с увеличением напряженности электрического поля среднее время релаксации уменьшается вследствие уменьшения характеристической энергии полярона E_0 . Для сравнения показана расчетная зависимость при одном уровне $E_{b0} = E_{bk} = 0.08 \text{ эВ}$ (кривая 5'). Как видно из рисунка, только расчет с учетом дисперсии уровней (кривые 1'–4') дает удовлетворительное соответствие с экспериментом.

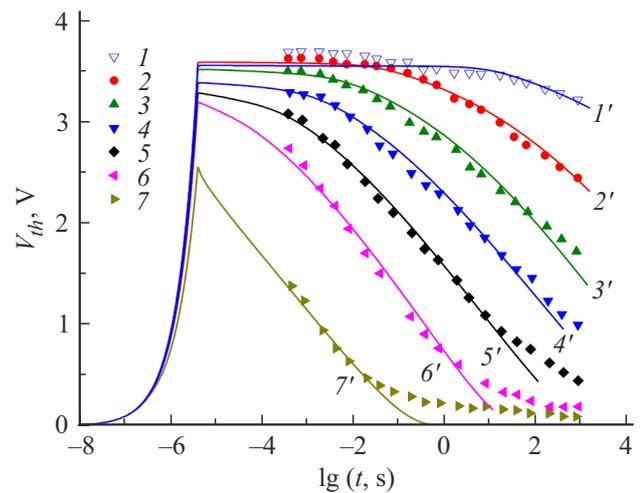


Рис. 1. Влияние температуры на кинетику V_{th} во время и после импульса ИО, К: 1, 1' — 124; 2, 2' — 160; 3, 3' — 181; 4, 4' — 194; 5, 5' — 217; 6, 6' — 247; 7, 7' — 293. Значки 1–7 — эксперимент [5], кривые 1'–7' — расчет при $N_p^0, \text{ см}^{-3}$: 1' — $8 \cdot 10^{20}$, 2' — $3.8 \cdot 10^{20}$, 3' — $2.2 \cdot 10^{20}$, 4' — $1.3 \cdot 10^{20}$, 5' — $8.4 \cdot 10^{19}$, 6' — $5.6 \cdot 10^{19}$, 7' — $2.2 \cdot 10^{19}$. ($E_G = 1 \text{ МВ/см}$, $d = 96.3 \text{ нм}$, $\alpha = 0.12$). (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

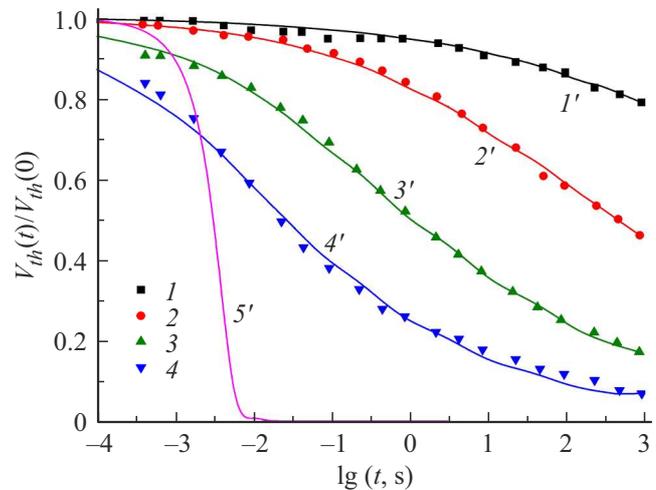


Рис. 2. Влияние напряженности внешнего электрического поля на кинетику $V_{th}/V_{th}(0)$ после импульса ИО, МВ/см: 1, 1' — 3; 2, 2' — 4; 3, 3' — 5; 4, 4' — 6. Значки 1–4 — эксперимент [6], кривые 1'–5' — расчет при $E_0, \text{ эВ}$: 1' — 0.047, 2' — 0.041, 3' — 0.034, 4', 5' — 0.029. Уровни энергии, эВ: 1'–4' — $E_{b0} = 0.08$, $E_{bk} = 0.55$; 5' — $E_{b0} = E_{bk} = 0.08$. ($T = 80 \text{ К}$, $d = 96.3 \text{ нм}$).

Влияние толщины подзатворного оксида на кинетику относительного сдвига порогового напряжения при $E_G = 1 \text{ МВ/см}$ и $T = 220 \text{ К}$ показано на рис. 3. На рисунке приведены экспериментальные данные работы [6] (значки 1–4) и расчетные кривые (1'–4'). При расчете кроме толщины варьировались значения дисперсионного

параметра α . Как видно из рисунка, с уменьшением толщины среднее время релаксации уменьшается.

4. Обсуждение результатов

Как следует из рис. 1, уменьшение времени релаксации ОЗ с увеличением температуры происходит вследствие уменьшения полной концентрации поляронных состояний. Зависимость N_p^0 от температуры построена на рис. 4. При низких температурах энергия активации, определяемая наклоном зависимости, мала и составляет $E_a \sim 0.04$ эВ при $T = 80-160$ К, а с ростом температуры увеличивается до $E_a \sim 0.13$ эВ при $T = 247-293$ К, что соответствует увеличению характеристической энергии поляронов с температурой согласно соотношению $E_0 = k_B T / \alpha$ при $\alpha = 0.12 = \text{const}$.

В работе [4] наблюдалось подобное увеличение энергии активации для времени релаксации порогового напряжения от $E_a = 0.06-0.1$ эВ при $T < 125$ К до $E_a = 0.3-0.5$ эВ при $T > 200$ К. Примерно соответствующие значения имеют в нашем случае минимальная ($E_{b0} = 0.08$ эВ при $T = 80$ К и $E_{b0} = 0.26$ эВ при $T \geq 124$ К) и максимальная ($E_{bk} = 0.55$ эВ) расчетные границы диапазона энергий поляронов для рис. 1 и 2. Отметим, что увеличение энергии активации с ростом температуры является одним из характерных свойств поляронов [4,7]. По характеристической (средней) энергии E_0 можно оценить средний радиус полярона [17]: $r_p = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 E_0}$. Расчет показывает, что радиус полярона уменьшается с ростом температуры от $r_p = 200$ Å при 80 К до $r_p = 55$ Å при 293 К, оставаясь значительно больше межатомного расстояния Si-O (1.5–1.7 Å). Таким образом, дырочные поляроны, ответственные за накопление и релаксацию ОЗ в SiO₂, имеют не малый,

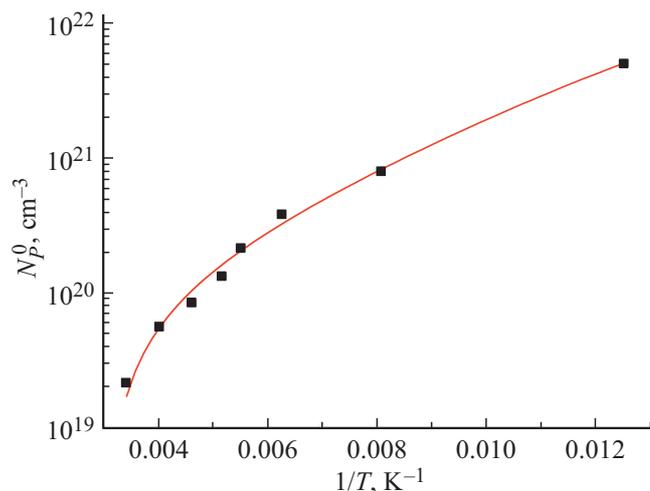


Рис. 4. Температурная зависимость N_p^0 . Значки — расчет к рис. 1, 2; кривая — аппроксимация.

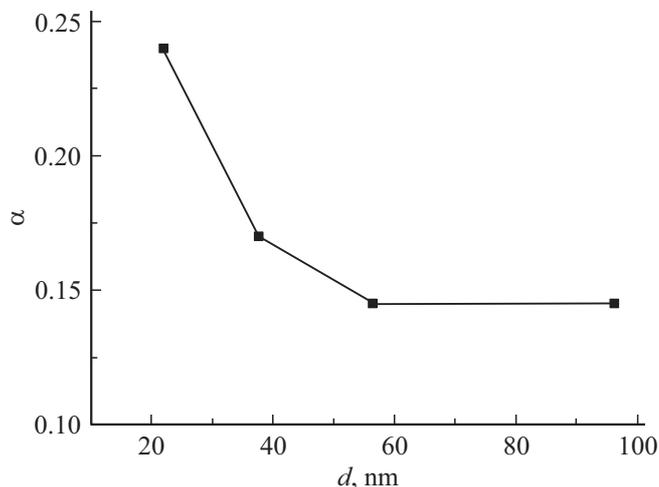


Рис. 5. Зависимость параметра дисперсионности α от толщины подзатворного оксида. Значки — расчет к рис. 3.

как полагалось в [7], а большой радиус. Этот результат согласуется с работой [18], в которой предполагалось существование в аморфном SiO₂ автолокализованных состояний большого радиуса.

Из рис. 2 следует, что уменьшение времени релаксации ОЗ с увеличением напряженности электрического поля происходит вследствие уменьшения средней энергии полярона E_0 . Влияние напряженности электрического поля на E_0 аппроксимируется линейной зависимостью:

$$E_0 = 0.064 - 0.057E \text{ (МВ/см), эВ.}$$

Такое влияние может быть обусловлено увеличением дрейфовой скорости дырок, в результате чего дырка отрывается от своей потенциальной ямы. В сильных полях поляронные состояния исчезают [17].

С уменьшением толщины оксида среднее время релаксации убывает (см. рис. 3). Эффект связан не только

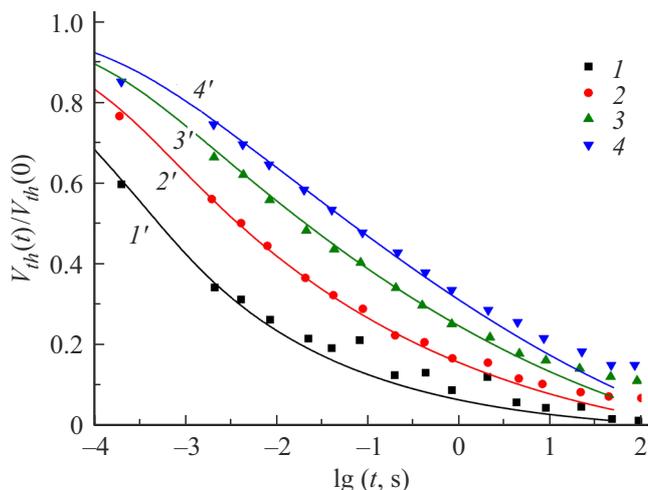


Рис. 3. Влияние толщины подзатворного оксида на кинетику $\Delta V_{th}/V_{th}(0)$ после импульса ИО, нм: 1, 1' — 21.8; 2, 2' — 37.6; 3, 3' — 56.6; 4, 4' — 96.3. Значки 1–4 — эксперимент [6], кривые 1'–4' — расчет при α : 1' — 0.24, 2' — 0.17, 3' — 0.145, 4' — 0.145. ($E_G = 1$ МВ/см, $T = 220$ К).

с уменьшением расстояния до стоков на обеих МФГ (см. граничные условия (7)), но также и с изменением параметра дисперсионности α . Как показано на рис. 5, параметр α растет при уменьшении толщины от 0.145 до 0.24. Рост параметра α с уменьшением толщины можно объяснить наличием в термическом диоксиде кремния напряженной области вблизи МФГ с кремнием протяженностью до 30–50 нм, в которой происходит структурная перестройка и изменяются мостиковые углы [19,20]. Отметим, что величина α не зависит от температуры, но зависит от технологии получения термического оксида кремния, изменяясь, по данным [4,7], в диапазоне 0.14–0.3.

5. Заключение

Показано, что описание дисперсионного транспорта дырок на основе модели многократного захвата позволяет количественно описать кинетику релаксации ОЗ в МОП-структурах после ионизирующего облучения при низких температурах. На основе модели МТ проведено количественное моделирование временных зависимостей сдвига порогового напряжения от температуры, напряженности внешнего электрического поля и толщины подзатворного оксида кремния. Показано, что кинетика релаксации определяется уровнями локализованных поляронных состояний в SiO₂ в диапазоне 0.08–0.55 эВ. Влияние роста температуры связано с уменьшением концентрации поляронных состояний. При этом радиус полярона уменьшается от 200 Å при 80 К до 55 Å при 293 К, оставаясь значительно больше межатомного расстояния Si–O (1.5–1.7 Å). Зависимость сдвига порогового напряжения от напряженности электрического поля связана с уменьшением характеристической энергии поляронов. Обнаружен рост параметра дисперсионности α при толщинах оксида < 50 нм.

Конфликт интереса

Автор заявляет, что у него нет конфликта интереса.

Список литературы

- [1] T.R. Oldham, F.B. McLean. IEEE Trans. Nucl. Sci., **50** (3), 483 (2003).
- [2] К.И. Таперо, В.Н. Улимов, А.М. Членов. *Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах космического применения* (М., БИНОМ, 2012).
- [3] О.В. Александров. ФТП, **55** (2), 152 (2021).
- [4] F.B. McLean, N.E. Boesch, J.M. McGarrity. IEEE Trans. Nucl. Sci., **23** (6), 1506 (1976).
- [5] N.E. Boesch, J.M. McGarrity, F.B. McLean. IEEE Trans. Nucl. Sci., **25** (3), 1012 (1978).
- [6] N.E. Boesch, F.B. McLean, J.M. McGarrity, P.S. Winokur. IEEE Trans. Nucl. Sci., **25** (6), 1239 (1978).
- [7] R.C. Hughes. Phys. Rev. B, **15** (4), 2012 (1977).
- [8] H. Scher, E.W. Montrol. Phys. Rev. B, **12** (6), 2455 (1975).
- [9] J. Noolandi. Phys. Rev. B, **16** (10), 4466, 4474 (1977).
- [10] B. Hartenstein, A. Jakobs, K.W. Kehr. Phys. Rev. B, **54** (12), 8574 (1996).
- [11] O.L. Curtis, J.R. Srouf. J. Appl. Phys., **48** (9), 3819 (1977).
- [12] О.В. Александров. ФТП, **54** (10), 1029 (2020).
- [13] В.А. Гриценко, Р.М. Иванов, Ю.Н. Мороков. ЖЭТФ, **108** (6), 2216 (1995).
- [14] J.M. Benedetto, H.E. Boesch. IEEE Trans. Nucl. Sci., **33** (6), 1318 (1986).
- [15] V.I. Arkhipov, A.I. Rudenko. Phil. Mag. B, **45** (2), 189, 209 (1982).
- [16] R.J. Krantz, L.W. Aukerman, T.C. Zietlow. IEEE Trans. Nucl. Sci., **34** (6), 1196 (1987).
- [17] Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский. *Квазичастицы в физике конденсированного состояния* (М., Физматлит, 2005) с. 396.
- [18] D.L. Griscom. J. Non-Cryst. Sol., **149** (1–2), 137 (1992).
- [19] Г.Я. Красников, Н.А. Зайцев. *Система кремний-диоксид кремния субмикронных СБИС* (М., Техносфера, 2003).
- [20] О.В. Александров, А.И. Дусь. ФТП, **42** (11), 1400 (2008).

Редактор Г.А. Оганесян

Dispersive transport of Hole polarons in MOS-structures after the ionizing radiation

O.V. Aleksandrov

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,
197376 St. Petersburg, Russia

Abstract It is shown that the description of the dispersive transport of hole polarons based on the multiple capture model makes it possible to quantitatively describe the kinetics of the accumulation and relaxation of space charge in MOS- structures after ionizing irradiation at low temperatures. Modeling of time dependences of threshold voltage on temperature, electric field strength and gate oxide thickness is carried out. It is shown that the kinetics of space charge relaxation is determined by the hopping transport of hole polarons with the levels of localized states in the range of 0.08–0.55 eV, the concentration of polaron states, the influence of the electric field strength on the average polaron energy, as well as gate oxide thickness on dispersive parameter. The polaron radius is estimated.