

## Форма изолирующего потенциала, создаваемого сверхтонкими слоями окисла кремния

© Е.И. Гольдман, Г.В. Чучева<sup>†</sup>, И.А. Шушарин

Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук, 141190 Фрязино, Московская область, Россия

<sup>†</sup> E-mail: gvc@ms.ire.mssi.ru

Поступила в Редакцию 18 октября 2021 г.

В окончательной редакции 20 ноября 2021 г.

Принята к публикации 20 ноября 2021 г.

Проведена модернизация развитого ранее метода восстановления рельефа изолирующего потенциала, создаваемого сверхтонким слоем окисла кремния, из полевых зависимостей туннельного тока. Рассчитаны параметры трапецеидального модельного потенциала, обеспечивающие максимально близкую к экспериментальной зависимость производной логарифма тока по напряжению. Изменен подход к запуску процедуры последовательных итераций потенциала — вместо обнуления в нулевом приближении значений координаты первой точки поворота использованы функции, вычисляемые из модельной формы. Модернизированный алгоритм применен к экспериментальным полевым зависимостям тока в структурах  $n^+-Si-SiO_2-n-Si$  с толщиной окисла 3.7 нм, обладающих ярко выраженной асимметрией туннельных вольт-амперных характеристик по отношению к полярности внешнего напряжения. Восстановленный из экспериментальных данных эффективный потенциальный барьер всегда существенно тоньше изолирующего слоя, его максимум смещен к контакту с поликристаллическим материалом, а эффективная масса туннелирующего электрона в разы больше типичного для толстого окисла кремния значения.

**Ключевые слова:** вырожденный поликремний-окисел кремния-кремний, сверхтонкий окисел, туннельные вольт-амперные характеристики, изолирующий потенциальный рельеф.

DOI: 10.21883/FTP.2022.03.52119.9756

### 1. Введение

Сверхтонкие (толщиной  $< 5$  нм) слои окисла кремния являются сейчас и останутся в обозримой перспективе основным изолирующим материалом, используемым при создании работающих и новых структур наноэлектроники [1]. В отличие от толстых окислов для сверхтонких  $SiO_2$  форму создаваемого ими изолирующего потенциала нельзя считать прямоугольной. Дело в том, что окисел кремния — это неупорядоченный материал и его атомная структура не стыкуется с кристаллическими решетками полупроводников, из которых изготавливаются активные элементы наноэлектроники. Поэтому на границе раздела (ГР) полупроводник-окисел кремния возникает переходный слой, причем для контакта Si-SiO<sub>2</sub> его минимальная толщина составляет 2 атомных слоя [2]. Поскольку переходы между кристаллическим Si и SiO<sub>2</sub>, а также между окислом и другим полупроводником, например из поли-Si, занимают в сумме не менее 35% объема сверхтонкого диэлектрика [2], то они фактически во многом и определяют свойства изолятора. Чем тоньше изолятор, тем выше доля переходных слоев в его объеме. Контакты подложки с окислом и окисла с поликремнием образуются в неодинаковых технологических процессах, имеют разную кристаллическую структуру. Поэтому естественно ожидать и разных (несимметричных) по форме координатных зависимостей профиля изолирующего потенциала на этих ГР. В зависимости от технологии изготовления окисел имеет разные изолиру-

ющие свойства. Минимальная проводимость, связанная с туннелированием через диэлектрический слой, достигается у SiO<sub>2</sub>, полученных сухим высокотемпературным окислением кремния [3]. Настоящая работа посвящена построению реального профиля изолирующего потенциала из экспериментальных вольт-амперных характеристик (ВАХ) сверхтонких слоев SiO<sub>2</sub> с туннельным типом проводимости.

Отметим важное обстоятельство: нет никаких теоретических оснований, разрешающих для неупорядоченного материала представлять волновую функцию электрона в типичном для метода эффективной массы виде произведения медленно изменяющейся амплитуды и осциллирующей на атомных расстояниях функции [4]. Тем не менее фактически этим представлением пользуется абсолютное большинство исследователей электронных явлений на ГР полупроводник-SiO<sub>2</sub>. В рамках таких представлений еще в прошлом веке были проведены модельные расчеты различных квантовых эффектов [5], к настоящему времени сформировалось направление разветвленных компьютерных вычислений с целью проектирования и создания электронных устройств нанометрового диапазона [6]. Применение для описаний явлений на контактах с окислом уравнения эффективной массы означает, что входящие в это уравнение координатные зависимости потенциала в изолирующем промежутке и значение массы туннелирующего электрона  $m$  должны быть некими величинами, приводящими к совпадающим с экспериментом результатам. В расчетах из-за отсут-

ствия данных об эффективном потенциальном профиле, как правило, используют типичные для толстого окисла прямоугольную (трапецидальную во внешнем поле) форму потенциала и  $m = 0.5m_0$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона. Поэтому результаты подобных работ приводят к неточному определению проникновения электронных волновых функций в глубь изолирующего слоя [7] и, таким образом, к неполному совпадению теоретических и экспериментальных данных. Следовательно, важной физической задачей является построение из экспериментальных туннельных вольт-амперных характеристик (ВАХ) сверхтонких слоев SiO<sub>2</sub> зависимостей эффективного изолирующего потенциала от координаты и величины массы туннелирующего электрона. Такая задача обращения экспериментальных данных была решена ранее в работе [7]. В данной статье мы несколько изменим развитый ранее аппарат и применим его к образцам структур кремний–сверхтонкий окисел–поли- $n^+$ -кремний, подобным исследованным в [7], но с ярко выраженной асимметрией туннельных ВАХ [8].

## 2. Аппарат восстановления профиля потенциала из полевых зависимостей туннельного тока через сверхтонкий изолирующий слой

Будем рассматривать туннельные ВАХ структур  $n$ -Si–сверхтонкий SiO<sub>2</sub>– $n^+$ -Si. В условиях, когда изолирующий барьер (см. рис. 1) мало прозрачен для вероятности туннелирования через окисел  $D$  справедливо квазиклассическое выражение

$$D(V, E_{\perp}) = \exp(-\Phi),$$

$$\Phi(V, E_{\perp}) = \left(\frac{8m}{\hbar^2}\right)^{(1/2)} \int_{z_1}^{z_2} \left[U(z) - E_{\perp} - qV \frac{z}{h}\right]^{(1/2)} dz. \quad (1)$$

Здесь  $\hbar$  — постоянная Планка;  $U(z)$  — искомый профиль потенциального рельефа в слое окисла  $0 < z < h$ , отсчитываемый от уровня Ферми инжектирующего электрона вырожденного  $n^+$ -Si ( $z < 0$ );  $z$  — координата по нормали к плоскости ГП Si-SiO<sub>2</sub>,  $z > h$  — область  $n$ -Si;  $q$  — элементарный заряд;  $V$  — падение напряжения внешнего электрического поля на изоляторе с толщиной  $h$ ;  $E_{\perp}$  — энергия туннелирующего электрона, отвечающая движению по нормали;  $z_1(V)$  и  $z_2(V)$  — координаты точек поворота. Разделение потенциала в изоляторе на две составляющие — собственное поле с профилем  $U(z)$  и внешнее поле  $qV(z/h)$  — требует установления начала отсчета напряжения  $V$ . Будем считать, что в равновесии  $V = 0$ . Тогда потенциал  $U(z)$  должен содержать вклады и от зарядов, фиксированных в изолирующем промежутке, и от контактной разности

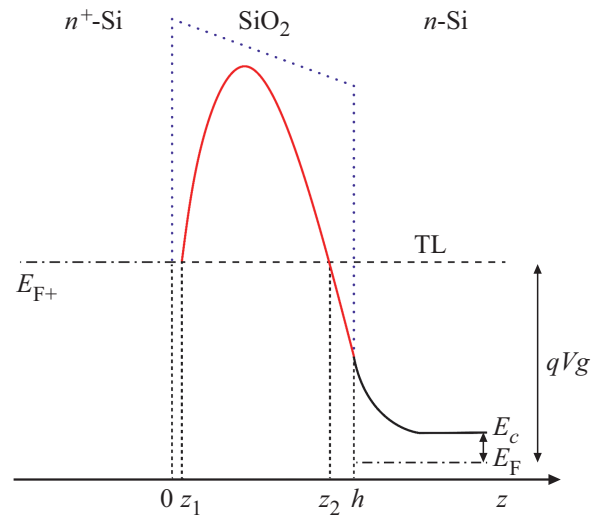


Рис. 1. Потенциальный рельеф  $n^+$ -Si–SiO<sub>2</sub>– $n$ -Si-структуры во внешнем поле. Сплошная линия — реальный потенциальный рельеф, точечная линия — модель трапецидального (прямоугольного) барьера, штрихпунктирная линия — уровень Ферми, TL — уровень туннелирования электронов,  $E_c$  — дно зоны проводимости  $n$ -кремния,  $E_F$  — энергия Ферми в  $n$ -Si,  $E_{F+}$  — уровень Ферми в  $n^+$ -Si.

потенциалов полевой электрод–полупроводник. В сверхтонких изолирующих слоях между локализованными состояниями, сосредоточенными в толще SiO<sub>2</sub>, и зонами проводимости  $n$ -Si и  $n^+$ -Si имеет место интенсивный туннельный обмен электронами.

В результате при увеличении напряжения  $V$  существенно изменяется зарядовое состояние только электронных ловушек, сконцентрированных непосредственно у ГП Si-SiO<sub>2</sub>. Поэтому будем считать, что распределение внешнего поля по изолятору имеет вид  $qV(z/h)$  [см. вторую формулу (1)].

Как показано в [7,9], с повышением уровня туннелирования рост прозрачности барьера толщиной 3.7 нм в  $e = 2.71 \dots$  раз происходит при увеличении энергии  $E_{\perp}$  на  $E_0 \sim 0.055$  эВ. Эта величина заметно превышает энергетические расстояния между соседними квантовыми уровнями электрона в слое обогащения [5], но существенно меньше масштаба изменения потенциала ( $\sim 3$  эВ). Изменение с внешним полем обогащающего изгиба зон в  $n$ -Si у ГП с окислом также несущественно по сравнению с высотой туннельного барьера. Поэтому с целью построения реального потенциального рельефа в слое окисла, как и в [7], для описания зависимости тока  $J$  от напряжения  $V$  будем использовать выражение

$$J = \bar{J} \cdot D(V, 0). \quad (2)$$

Здесь  $\bar{J}$  — предэкспоненциальный фактор, зависимостью которого от напряжения мы также будем пренебрегать. Таким образом, ввиду малости амплитуды не будут учитываться и осцилляции туннельного тока, связанные с интерференцией электронных волн в промежутке между

точкой поворота в окисле и ГР раздела SiO<sub>2</sub>-Si [10,11]. Представим функцию  $U(z)$  параметрически — через две ветви зависимостей координат точек поворота от напряжения:  $z = z_1(V)$ ,  $U = qV[z_1(V)/h]$  при  $z_1(V) < z_m$  и  $z = z_2(V)$ ,  $U = qV[z_2(V)/h]$  при  $z_2(V) > z_m$ ;  $z = z_m$  — координата точки, в которой барьер исчезает с ростом внешнего поля при  $V = V_m$ . Теперь выражение (1) для  $\Phi(V, 0)$  преобразуется в виде

$$\Phi = \frac{1}{\bar{V}^{(1/2)}} \int_V^{V_m} (V' - V)^{(1/2)} \left( -\frac{df}{dV'} \right) dV',$$

$$f(V) = \left\{ \left[ \frac{z_2(V)}{h} \right]^{3/2} - \left[ \frac{z_1(V)}{h} \right]^{3/2} \right\}. \quad (3)$$

Здесь  $\bar{V} = (9h^2/32mh^2q)$ ,  $V_m$  — напряжение снятия барьера.

Обращение уравнения (3) было получено в [7]:

$$f(V) = \frac{2\bar{V}^{(1/2)}}{\pi} \int_V^{V_m} (V' - V)^{-(1/2)} \left[ -\frac{d\Phi(V')}{dV'} \right] dV'$$

$$= \frac{4\bar{V}^{(1/2)}}{\pi} \int_0^{x_m} [-\bar{\Phi}(V + x^2)] dx, \quad (4)$$

где  $\bar{\Phi}(V) = d\Phi/dV$ ,  $x = (V' - V)^{(1/2)}$ ,  $x_m = (V_m - V)^{(1/2)}$ . Кратко повторим предложенный в работе [7] алгоритм построения зависимости  $U(z)$  из экспериментальной функции  $f(V)$ . Измеряются 2 ветви ВАХ: обеднение полупроводника (инжекция из поли-Si) — индекс depl и обогащение кремния (инжекция из Si) — индекс enr. Соответственно из экспериментальных кривых  $\bar{\Phi}_{\text{depl}}(V)$  и  $\bar{\Phi}_{\text{enr}}(V)$  по формуле (4) выражаются 2 функции  $f_{\text{depl}}(V)$  и  $f_{\text{enr}}(V)$ . Для каждого значения массы туннелирующего электрона из некоторого набора, охватывающего диапазон возможных величин  $m$ , вводятся четыре последовательности с номером  $n$  зависимостей  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$ ,  $\frac{z_{\text{depl}}^{(n)}(V)}{h}$  и  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$ ,  $\frac{z_{\text{enr}}^{(n)}(V)}{h}$ . Указанные функции с  $(n+1)$ -м номером вычисляются параметрически из  $n$ -х номеров по формулам:

$$U_{\text{depl}}^{(n+1)} = qV \left\{ f_{\text{depl}}(V) + \left[ \frac{z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)}{h} \right]^{3/2} \right\}^{2/3},$$

$$\frac{z}{h} = \frac{z_{\text{depl}}^{(n+1)}}{h} = \left\{ f_{\text{depl}}(V) + \left[ \frac{z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)}{h} \right]^{3/2} \right\}^{2/3}, \quad (5)$$

$$U_{\text{enr}}^{(n+1)} = qV \left\{ f_{\text{enr}}(V) + \left[ \frac{z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)}{h} \right]^{3/2} \right\}^{2/3} + E_F,$$

$$\frac{z}{h} = \frac{z_{\text{enr}}^{(n+1)}}{h} = 1 - \left\{ f_{\text{enr}}(V) + \left[ \frac{z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)}{h} \right]^{3/2} \right\}^{2/3}. \quad (6)$$

Здесь  $z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)$ ,  $z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)$  — расстояния от инжектирующей поверхности до первой точки поворота в потенциалах  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  соответственно. В формулах (6) учтено, что при инжекции из полупроводника применять выражения (1) и (4) нужно с изменением уровня туннелирования и отсчета координаты. Каждый номер  $n$  обозначает последовательное приближение функций  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  к искомой зависимости  $U(\frac{z}{h})$ . Остановка счета приближений происходит как только графики  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  перестают изменяться с увеличением номера  $n$ . Далее из кривых для разных значений  $m$  отбирается та пара ветвей  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$ , которая максимально сливается в единую линию. Это значение массы и единая кривая  $U(\frac{z}{h})$  и являются искомыми.

Рассчитываемые по найденным из эксперимента функциям  $f_{\text{depl}}(V)$  и  $f_{\text{enr}}(V)$  зависимости  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  получались дискретно заданными в виде столбцов значений с номерами строк  $i$  и  $j$ :  $U_{\text{enr}i}^{(n)}$ ,  $\frac{z_{\text{enr}i}^{(n)}}{h}$ ,  $U_{\text{depl}j}^{(n)}$ ,  $\frac{z_{\text{depl}j}^{(n)}}{h}$ . В данной работе вместо точного решения уравнений типа  $U_{\text{depl}}^{(n)}(z) = qV(\frac{z}{h})$  для приближенного, но более быстрого определения функций  $z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)$ ,  $z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)$  использовался метод линейной интерполяции. Сначала строились дискретные зависимости  $\tilde{z}_{\text{1depl}}^{(n)}(\tilde{V})$ ,  $\tilde{z}_{\text{1enr}}^{(n)}(\tilde{V})$  по правилам:

$$\frac{\tilde{z}_{\text{1enr}j}^{(n)}}{h} = 1 - \frac{z_{\text{depl}j}^{(n)}}{h}, \quad \tilde{V}_j = \frac{h[U_{\text{depl}j}^{(n)} - E_F]}{q[h - z_{\text{depl}j}^{(n)}];}$$

$$\frac{\tilde{z}_{\text{1depl}i}^{(n)}}{h} = \frac{z_{\text{enr}i}^{(n)}}{h}, \quad \tilde{V}_i = \frac{hU_{\text{enr}i}^{(n)}}{qz_{\text{enr}i}^{(n)}}. \quad (7)$$

Если напряжение  $V = \tilde{V}_i$ , то  $\tilde{z}_{\text{1depl}i}^{(n)}$  — это точное значение функции  $z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)$ ; аналогично и для ветви обогащения — если  $V = \tilde{V}_j$ , то  $\tilde{z}_{\text{1enr}j}^{(n)}$  — это точное значение функции  $z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)$ . Затем на основе найденных из соотношений (7) величин по линейной интерполяции определялись искомые функции:

$$\frac{z_{\text{1enr}}^{(n)}(V)}{h} = \frac{1}{(\tilde{V}_{j+1} - \tilde{V}_j)}$$

$$\times \left[ \frac{\tilde{z}_{\text{1enr}j}^{(n)}}{h} (\tilde{V}_{j+1} - \tilde{V}_j) + \frac{\tilde{z}_{\text{1enr}(j+1)}^{(n)}}{h} (\tilde{V} - \tilde{V}_j) \right],$$

$$\frac{z_{\text{1depl}}^{(n)}(V)}{h} = \frac{1}{(\tilde{V}_{i+1} - \tilde{V}_i)}$$

$$\times \left[ \frac{\tilde{z}_{\text{1depl}i}^{(n)}}{h} (\tilde{V}_{i+1} - \tilde{V}) + \frac{\tilde{z}_{\text{1depl}(i+1)}^{(n)}}{h} (\tilde{V} - \tilde{V}_i) \right]. \quad (8)$$

Номера  $i$  и  $j$  использованных в выражениях (8) значений  $\tilde{z}_{1\text{enr}}^{(n)}$ ,  $\tilde{V}_j$  и  $\tilde{z}_{1\text{depl}}^{(n)}$ ,  $\tilde{V}_i$  выбирались так, чтобы пары  $\tilde{V}_i, \tilde{V}_{i+1}$  и  $\tilde{V}_j, \tilde{V}_{j+1}$  были ближайшими к задаваемому напряжению  $V$ . Отметим, что из-за сходимости с ростом номера  $n$  ветвей  $U_{\text{enr}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(\frac{z}{h})$  при некоторой величине  $m$  к единой кривой — эффективному потенциальному рельефу  $U(\frac{z}{h})$  — значения напряжений  $\tilde{V}_i$  и  $\tilde{V}_j$ , используемые в равенствах (8), все более приближаются к  $V$ . Поэтому точности линейной интерполяции (8) оказывается достаточно для построения зависимости  $U(\frac{z}{h})$ .

### 3. Подготовка данных к применению аппарата восстановления профиля потенциала в сверхтонком изолирующем слое

В реальном эксперименте измерения проводятся в условиях ограничения высоких напряжений  $V < V_{\text{II}}$ , так чтобы при  $V = V_{\text{II}}$  не возникало пробоя образцов. Верхняя граница фиксируемых напряжений  $V_{\text{II}}$ , как правило, существенно меньше величины  $V_m$ . Поэтому отсутствие данных о ВАХ при  $V > V_{\text{II}}$  формально не позволяет найти зависимость  $f(V)$  в этом диапазоне, а в интервале  $V < V_{\text{II}}$  ограничивает точность ее построения. Разделим функцию  $f(V)$  на две части и перепишем уравнение (4) в виде

$$f(V) = \bar{f}(V) + \hat{f}(V),$$

$$\begin{aligned} \bar{f}(V) &= \frac{4\bar{V}^{(1/2)}}{\pi} \int_0^{x_{\text{II}}} [-\bar{\Phi}(V + x^2)] dx, \\ \hat{f}(V) &= \frac{4\bar{V}^{(1/2)}}{\pi} \int_{x_{\text{II}}}^{x_m} [-\bar{\Phi}(V + x^2)] dx, \end{aligned} \quad (9)$$

$x_{\text{II}} = (V_{\text{II}} - V)^{(1/2)}$ . Часть  $\bar{f}(V)$  точно определяется из опыта, а зависимость  $\hat{f}(V)$  должна быть найдена из связанных с экспериментом модельных соображений. В работе [7] для построения графика  $\hat{f}(V)$  использовалась модельная форма потенциального рельефа в виде наклонной прямой  $U_{\text{mod}}(z) = (qV_0/h)[\nu z_2(V_0) + (1 - \nu)z]$ , где напряжение  $V_0$  отвечало точке перегиба экспериментальной характеристики  $d^2\Phi/dV^2|_{V=V_0} = 0$ , а параметр  $\nu$  выражался из данных опыта:  $\nu = [(V_{\text{II}} - V_0)/V_0] \times \{ [\bar{\Phi}(V_0)/\bar{\Phi}(V_{\text{II}})]^{(1/2)} - 1 \}^{-1}$ . Такой подход оказался не приемлем для работы с экспериментальными данными [8], где у образцов при одинаковых напряжениях ток в условиях обогатления полупроводника на порядки больше, чем при обеднении. Для новых условий потребовалось введение более общего модельного потенциального

рельефа трапецеидальной формы:

$$U_{\text{mod}}(z) = U_* \times \begin{cases} 0, & 0 < z < a_l - b_l \\ \frac{z - a_l}{b_l} + 1, & a_l - b_l < z < a_l \\ 1, & a_l < z < h - a_r \\ -\frac{z - (h - a_r)}{b_r} + 1, & h - a_r < z < h - (a_r - b_r) \\ 0, & h - (a_r - b_r) < z < h \end{cases} \quad (10)$$

Отметим, что заданный формулами (10) вид зависимости  $U_{\text{mod}}(z)$  учитывает и оба переходных слоя, и их возможные сдвиги внутри слоя изолятора. Параметры этого потенциала  $U_*$ ,  $\frac{a_l}{h}$ ,  $\frac{b_l}{h}$ ,  $\frac{a_r}{h}$ ,  $\frac{b_r}{h}$ , должны подчиняться неравенствам:  $b_l < a_l < h - a_r$ ,  $a_r > b_r$ ; их конкретные значения для каждой величины массы туннелирующего электрона определялись из условия максимального сближения модельной  $\bar{\Phi}_{\text{mod}}(V)$  и экспериментальной  $\bar{\Phi}(V)$  характеристик. С этой целью минимизировался функционал

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{\int_0^{V_{\text{Idepl}}} [\dot{\Phi}_{\text{depl}}(V) - \dot{\Phi}_{\text{mod depl}}(V)]^2 dV}{V_{\text{Idepl}}} \\ &+ \frac{\int_0^{V_{\text{Ienr}}} [\dot{\Phi}_{\text{enr}}(V) - \dot{\Phi}_{\text{mod enr}}(V)]^2 dV}{V_{\text{Ienr}}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Вычисляемые из соотношения (1) с заменой  $U(z)$  на  $U_{\text{mod}}(z)$  формулы для  $\bar{\Phi}_{\text{mod}}(V)$ ,  $\hat{f}(V) = \frac{4\bar{V}^{(1/2)}}{\pi} \times \int_{x_{\text{II}}}^{x_m} [-\bar{\Phi}_{\text{mod}}(V + x^2)] dx$  выражаются через элементарные функции, но имеют громоздкий вид, и поэтому в тексте данной статьи не приводятся.

Еще одно изменение, сделанное в настоящей работе по сравнению с [7], связано с запуском процедуры последовательных приближений (5), (6). Для этого необходимо задать соответствующие нулевому приближению зависимости  $z_{1\text{depl}}^{(0)}(V)$ ,  $z_{1\text{enr}}^{(0)}(V)$ . В случае практически симметричного барьера  $z_1(V) \ll z_2(V)$ , поэтому, в статье [7] полагалось  $z_{1\text{depl}}^{(0)}(V) = 0$ ,  $z_{1\text{enr}}^{(0)}(V) = 0$ . В данной работе такие равенства не позволили обеспечить сходимость последовательных приближений. Поэтому из модельного потенциала (10) были вычислены соотношения

$$\begin{aligned} \frac{z_{1\text{depl}}^{(0)}}{h} &= \frac{(a_l - b_l)}{h \left(1 - \frac{qVb_l}{U_*h}\right)}, \\ \frac{z_{1\text{enr}}^{(0)}}{h} &= \frac{(a_r - b_r)}{h \left(1 - \frac{qVb_r}{U_*h}\right)} + \frac{E_F b_r}{U_* h \left(1 - \frac{qVb_r}{U_*h}\right)}, \end{aligned} \quad (12)$$

которые использовались далее при старте расчетов по формулам (5), (6). Отметим, что для модельного потенциала (10) напряжения снятия барьера составляют:  $V_m = \frac{U_* h}{q a_1}$  при обеднении полупроводника и  $V_m = \frac{(U_* - E_F) h}{q a_r}$  при обогащении.

#### 4. Восстановление профиля потенциала в сверхтонком изолирующем слое из экспериментальных вольт-амперных характеристик

Как уже упоминалось выше, мы будем строить эффективный потенциальный рельеф в сверхтонком окисле кремния, опираясь на результаты измерений туннельных ВАХ [8]. В указанной работе исследовались Si-МОП-структуры с полевым электродом Al- $n^+$ -Si:P (площадь полевого электрода  $S = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-2}$ ), изолированным от (100)  $n$ -Si подложки слоем окисла с оптической толщиной  $\sim 3.7 \text{ нм}$ , энергия Ферми электронов в кремнии составляла 0.26 эВ. Были проведены измерения ВАХ и высокочастотных вольт-фарадных характеристик (ВФХ) объектов на частотах 1 и 0.5 МГц с использованием прецизионного измерителя LCR Agilent E4980A [12]. „Одномоментная“ фиксация тока и емкостей на двух высоких частотах позволила, работая в нестационарных условиях, определять падение внешнего напряжения на изолирующем слое  $V$  и, таким образом, получить требуемые для данной работы зависимости  $\Phi_{\text{depl}}(V)$  и  $\Phi_{\text{enr}}(V)$  (см. рис. 2). Принятая в [8] методология проведения экспериментов обеспечила, по сравнению с квазистационарными опытами, взятыми за основу в [7], строгое измерение распределения внешнего напряжения по образцу.

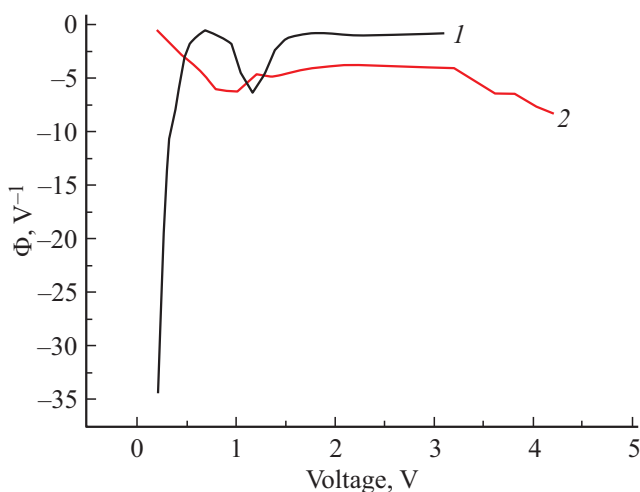


Рис. 2. Экспериментальные ветви производных от натурального логарифма туннельного тока. 1 —  $\Phi_{\text{depl}}(V)$ , 2 —  $\Phi_{\text{enr}}(V)$ .

Значения параметров модельного потенциала для  $m = 1.2m_0$

$U_*$	$\frac{a_l}{h}$	$\frac{a_r}{h}$	$\frac{b_l}{h}$	$\frac{b_r}{h}$
3.52 эВ	0.18	0.677	0.14	0.024

Обработка полученных данных начиналась с задания тестируемого набора из 10 значений массы туннелирующего электрона:  $m/m_0 = 0.2, 0.4, \dots, 1.8, 2.0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона. Минимизация функционала (11) проводилась отдельно для каждой массы путем перебора чисел  $\Omega$ , отвечающих разным комбинациям значений параметров функции  $U_{\text{mod}}(z)$ . Для сокращения времени машинных вычислений использовалась схема последовательных переходов ко все более сужающимся интервалам между соседними величинами исходных параметров зависимости (10). Вначале задавались грубые сетки — по 6 величин на первые три и по 4 на два оставшихся параметра:

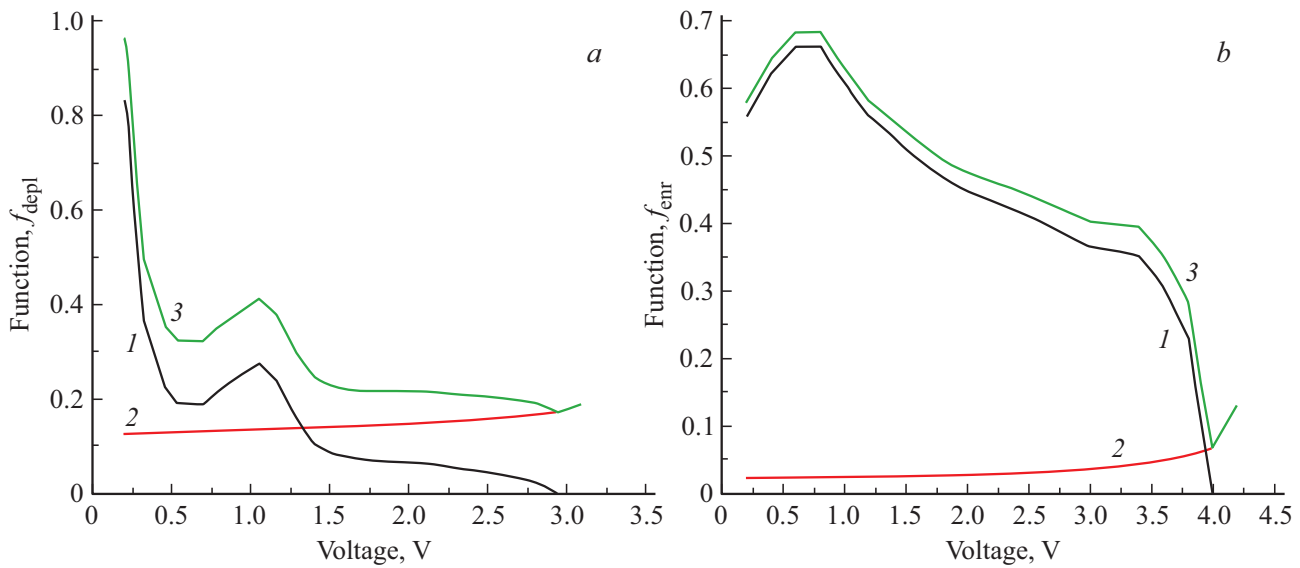
$$\begin{aligned}
 U_* &= 1.5, 2.0, 3.0, 3.5, 4.0 \text{ эВ}, \\
 \frac{a_l}{h} &= \frac{0.4}{3}, \frac{0.8}{3}, 0.4, \frac{1.6}{3}, \frac{2}{3}, 0.8; \\
 \frac{a_r}{h} &= \left( \frac{0.4}{3}, \frac{0.8}{3}, 0.4, \frac{1.6}{3}, \frac{2}{3}, 0.8 \right) \left( 1 - \frac{a_l}{h} \right); \\
 \frac{b_l}{h} &= (0.2, 0.4, 0.6, 0.8) \frac{a_l}{h}; \\
 \frac{b_r}{h} &= (0.2, 0.4, 0.6, 0.8) \frac{a_r}{h}.
 \end{aligned}$$

Из вычисленных функционалов  $\Omega$  находился минимальный  $\Omega_{\text{min}}$ , и отбиралась пятерка значений исходных параметров, приводящая к этому минимальному числу  $\Omega = \Omega_{\text{min}}$ . Составлялась более мелкая сетка для задания величин исходных параметров. Если полученное ранее значение лежало в середине грубой сетки, то вокруг него брался двойной интервал этой сетки, делился на 7 равных частей и выбирались 6 новых значений, окружающих полученное ранее. Если найденное на грубой сетке значение параметра лежало на ее краю<sup>1</sup>, то для мелкой сетки брался двойной грубый интервал с выходом за старую границу, он делился на 7 равных частей и выбирались 6 новых значений. Процедура переходов ко все более мелким сеткам повторялась до тех пор, пока величина  $(\Omega_{\text{min}}/\Xi)^{1/2}$  не начинала уменьшаться менее чем на 0.05. Здесь

$$\Xi = \frac{\int_0^{V_{\text{Idepl}}} \left[ \dot{\Phi}_{\text{depl}}(V) \right]^2 dV}{V_{\text{Idepl}}} + \frac{\int_0^{V_{\text{Ienr}}} \left[ \dot{\Phi}_{\text{enr}}(V) \right]^2 dV}{V_{\text{Ienr}}}.$$

полученные при минимизации функционала (11) с  $m = 1.2m_0$  данные представлены в таблице.

<sup>1</sup> Так получалось для некоторых значений  $m$  при подборе высоты барьера  $U_*$ .



**Рис. 3.** Функции  $\bar{f}(V)$ ,  $\hat{f}(V)$  и  $f(V)$  при  $m = 1.2m_0$ . *a* — ветвь обеднения полупроводника; 1 —  $\bar{f}_{\text{depl}}(V)m$ , 2 —  $\hat{f}_{\text{depl}}(V)$ , 3 —  $f_{\text{depl}}(V)$ . *b* — ветвь обогащения полупроводника; 1 —  $\bar{f}_{\text{enr}}(V)m$ , 2 —  $\hat{f}_{\text{enr}}(V)$ , 3 —  $f_{\text{enr}}(V)$ .

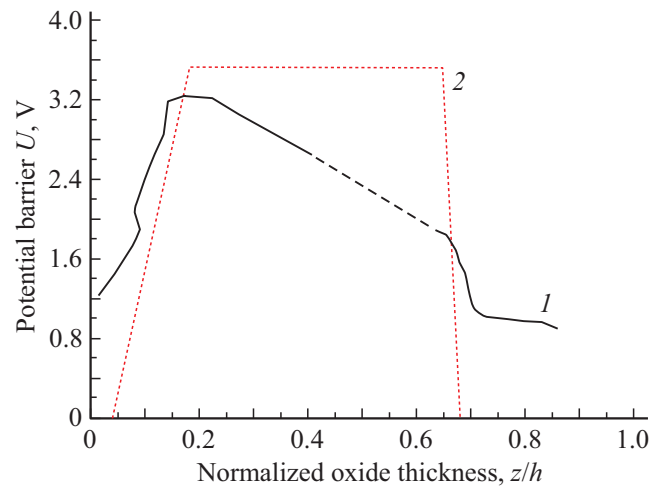
Это значение массы туннелирующего электрона соответствует наилучшему переходу ветвей  $U_{\text{enr}}^{(n)}(z)$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(z)$  в единую кривую эффективного потенциального рельефа (по этому поводу см. далее).

По найденным значениям исходных параметров модельного потенциала для каждой величины  $m$  из тестируемого набора, исходя из равенств (9), была построена система функций  $\bar{f}(V)$ ,  $\hat{f}(V)$  и  $f(V)$ . Их графики, соответствующие  $m = 1.2m_0$ , приведены на рис. 3.

После этого была запущена процедура последовательных приближений (5), (6) с функциями  $z_{\text{depl}}^{(0)}(V)$ ,  $z_{\text{enr}}^{(0)}(V)$ , вычисляемыми по формулам (12). Изменение зависимостей  $U_{\text{enr}}^{(n)}(z)$  и  $U_{\text{depl}}^{(n)}(z)$  с номером прекращалось после 5–6 итераций. Из всех значений массы туннелирующего электрона наилучшую сходимость в единую кривую показали графики ветвей  $U_{\text{enr}}^{(6)}(z)$  и  $U_{\text{depl}}^{(6)}(z)$  при  $m = 1.2m_0$ . Соответствующие этой массе кривые  $U(z)$  и  $U_{\text{mod}}(z)$  показаны на рис. 4.

По форме реальный потенциальный рельеф в сверхтонком изолирующем слое, так же, как и полученный в работе [7], заметно отличается от типичного для толстых окислов кремния прямоугольного барьера. Его часть с высотой  $> 1$  эВ на 40% тоньше пленки  $\text{SiO}_2$ , а масса туннелирующего через него электрона в разы превышает  $0.5m_0$ . Подтвердились и предположения об асимметрии барьерного профиля, выдвинутые ранее в статьях [8,13]. По сравнению с результатами работы [7] в нашем случае потенциальный рельеф в изоляторе имеет максимум, существенно смещенный к ГР окисел–поликремний; спад потенциала в сторону контакта с полупроводником гораздо более пологий, чем в направлении поли- $n^+$ -Si.

Сопоставляя модельный и реальный потенциальные профили (см. рис. 4), можно сделать вывод, что мо-



**Рис. 4.** Реальный и модельный рельефы потенциала в сверхтонком изолирующем слое. 1 — реальный потенциал, 2 — модельный потенциал. Из-за ограничения максимальных напряжений ветви  $U_{\text{enr}}^{(6)}(z)$  и  $U_{\text{depl}}^{(6)}(z)$  не сошлись. Этот участок на кривой 1 показан мелким пунктиром.

дельную форму нельзя использовать для строгого описания проникновения волновых электронных функций в глубь сверхтонкого изолирующего слоя  $\text{SiO}_2$ . И это несмотря на то, что функция (10) с параметрами из таблицы отражает особенности потенциального профиля в сверхтонком окисле — сдвиг барьера в сторону контакта с полевым электродом. Роль модели сводится лишь к вспомогательным функциям: для дополнения экспериментальных данных — построения зависимости  $\hat{f}(V)$  — и для запуска процедуры последовательных приближений.

## 5. Заключение

Отсутствие для окисла кремния теоретических оснований, допускающих использовать при описании волновой функции электрона уравнение эффективной массы, ставит задачу об экспериментальном определении действующего потенциального рельефа в сверхтонком изолирующем слое. Такая постановка задачи делает результат ее решения заложником технологии изготовления конкретного образца. Тем не менее построенные из экспериментальных данных для разных объектов реальные зависимости изолирующего потенциала от координаты по нормали к плоскости слоя имеют ряд важных общих свойств. Барьер всегда существенно тоньше изолирующего слоя, его максимум смещен к контакту с поликристаллическим материалом, а эффективная масса туннелирующего электрона в разы больше типичного для толстого окисла кремния значения  $m = 0.5m_0$ . Выяснение физической природы такой картины потенциального рельефа требует послойных кристаллографических исследований структур со сверхтонким SiO<sub>2</sub> и лежит вне рамок этой работы. Полученные данные о форме изолирующего потенциала, создаваемого пленкой окисла кремния, могут быть использованы в расчетах самых различных нанoeлектронных устройств.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания и частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты РФФИ № 18-29-11029-мк, № 19-07-00271-а и № 19-29-03042-мк).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] F.A. Zwanenburgh, A.S. Dzurak, A. Morello, M.Y. Simmons, L.C.L. Hollenberg, G. Klimeck, S. Rogge, S.N. Coppersmith, M.A. Eriksson. *Rev. Mod. Phys.*, **85** (3), 961 (2013).
- [2] A.P. Baraban, V.V. Bulavinov, P.P. Konorov. *Electronics of layers on silicon* (Leningrad, State University, 1988) p. 303.
- [3] E.H. Nicollian, I.R. Brews. *MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology* (N.Y., John Wiley and Sons, 1982).
- [4] E.E. Tahtomirov, V.A. Volkov. *ZhETH*, **116** (5), 1843 (1999).
- [5] T. Ando, A. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.*, **54** (2), 437 (1982).
- [6] R. Vasudevan, G. Pilania, P.V. Balachandran. *J. Appl. Phys.*, **129**, 070401 (2021).
- [7] Е.И. Гольдман, А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, М.В. Черняев. *ФТП*, **42** (1), 94 (2008).
- [8] Е.И. Гольдман, С.А. Левашов, Г.В. Чучева. *ФТП*, **53** (4), 481 (2019).
- [9] F. Rana, S. Tiwari, D.A. Buchanan. *Appl. Phys. Lett.*, **69** (8), 1104 (1996).

- [10] A. Hadjadi, G. Salace, C. Petit. *J. Appl. Phys.*, **89** (12), 7994 (2001).
- [11] E.I. Goldman, N.F. Kukharskaya, A.G. Zhdan. *Solid-State Electron.*, **48** (5), 831 (2004).
- [12] Е.И. Гольдман, А.И. Левашова, С.А. Левашов, Г.В. Чучева. *ФТП*, **49** (4), 483 (2015).
- [13] Д.А. Белорусов, Е.И. Гольдман, В.Г. Нарышкина, Г.В. Чучева. *ФТП*, **55** (1), 24 (2021).

Редактор Г.А. Оганесян

## The shape of the insulating potential relief created by ultra-thin layers of silicon oxide

E.I. Goldman, G.V. Chucheva, I.A. Shusharin

Fryazino Branch of the Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, 141190 Fryazino, Moscow region, Russia

**Abstract** The previously developed method for reconstructing the relief of an insulating potential created by an ultrathin silicon oxide layer from the field dependences of the tunneling current has been modernized. Parameters of the trapezoidal model potential, which provide the dependence of the derivative of the logarithm of the current with respect to voltage as close as possible to the experimental one, are obtained. The approach to starting successive iterations of the potential has been changed in such a way that instead of zeroing the coordinates of the first turning point in the zero approximation, functions calculated using the model form are used. The modernized algorithm is applied to experimental field dependences of the current in  $n^+$ -Si-SiO<sub>2</sub>- $n$ -Si structures with an oxide thickness of 3.7 nm, which have a pronounced asymmetry of the tunneling current-voltage characteristics with respect to the polarity of the external voltage. The effective potential barrier reconstructed from the experimental data is always significantly thinner than the insulating layer; its maximum is shifted towards the contact with the polycrystalline material, and the effective mass of the tunneling electron is several times greater than the value typical for bulk silicon oxide.