

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В НИТРИДЕ КРЕМНИЯ

Ю. Н. МОРОКОВ

*Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: quant@ict.nsc.ru

Б. А. ГРИЦЕНКО

*Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия*

J. B. XU

*Chinese University of Hong Kong, Shatin*

Numerical simulation has been made in the drift-diffusion approximation for charge transport through the thin amorphous silicon nitride films, widely used in modern microelectronics. The simulation included for the first time the calculations of the thermally assisted tunneling integrals for the charge tunneling from contacts and for the electron and hole tunneling from traps. The calculations show that the used at the present time models for the trap ionization don't allow to obtain the agreement with experiment simultaneously at high and low temperatures in the temperature diapason 80–500 K. The possible variants of the model development are proposed.

Аморфный нитрид кремния ( $\text{a-Si}_3\text{N}_4$ ) имеет высокую концентрацию электронных и дырочных ловушек и гигантское время делокализации захваченных на них электронов и дырок ( $\sim 10$  лет при 300 К [1, 2]). Это свойство нитрида кремния широко используется в кремниевых приборах. Однако, несмотря на многочисленные исследования переноса заряда в  $\text{a-Si}_3\text{N}_4$  [1, 2], природа ловушек, ответственных за захват заряда, остается неясной.

Целью данного работы является количественное описание с помощью численного моделирования экспериментальных температурных зависимостей тока для  $\text{a-Si}_3\text{N}_4$ , измеренных в широком температурном диапазоне — от азотных температур до температур порядка 700 К. Такое изучение способно дать существенную информацию о свойствах ловушек в нитриде кремния: энергиях ловушек, сечениях захвата, механизмах ионизации, частотных факторах. Данное исследование было, в частности, инициировано работой [3], где было проведено подобное моделирование для нитрида кремния. Однако это моделирование было проведено в более узком диапазоне температур — от 300 К до 600 К и зависимость от температуры была введена сразу в несколько параметров модели, что ограничивает область применимости полученных результатов.

Задача рассматривается в диффузионно-дрейфовом приближении. Существенным новым элементом в нашем рассмотрении является включение в модель детального рассмотрения процессов туннелирования на контактах и при ионизации ловушек. При этом последовательно учитывается термостимулированное туннелирование (Thermally Assisted Tunneling — TAT) заряда. Работа [3] продемонстрировала, что механизм TAT обязательно должен рассматриваться при изучении проводимости в диэлектриках. Показано также, что TAT эффект описывает ионизацию глубоких уровней в полупроводниках [4].

Задача рассматривается в одномерном приближении (ось  $z$ ). Рассматривается выращенная на кремнии пленка  $\text{a-Si}_3\text{N}_4$  толщиной  $d_n$ . Между кремнием и нитридом может находиться тонкий слой оксида кремния толщиной  $d_o$ , ( $z < 0$ ). На другой границе нитрид контактирует с металлом (Al). Предполагается, что вся система находится при постоянной температуре  $T$ .

## 1. Физическая модель

Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что ток в нитриде кремния лимитируется глубокими электронными и дырочными ловушками, равномерно распределенными по объему образца [1]. Присутствие широкой области с пул-френкелевской зависимостью тока от приложенного поля разной полярности показывает, что эти ловушки могут рассматриваться как кулоновские. Мы будем предполагать, что в нитриде кремния присутствуют электронные ловушки только одного типа с концентрацией  $N_{nt}$  и дырочные ловушки тоже только одного типа с концентрацией  $N_{pt}$ .

Диффузионно-дрейфовое приближение широко используется для описания процессов переноса заряда не только в полупроводниках (см., например, [5, 6]), но и в широкозонных диэлектриках [3, 7]. Эта модель является частным случаем гидродинамических (газодинамических) моделей для задач переноса заряда в полупроводниках (см., например, [8]).

В диффузионно-дрейфовом приближении система уравнений состоит из четырех кинетических уравнений и уравнения Пуассона.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial t} - \beta_{cn} n(N_{nt} - n_t) + \gamma_n n_t - \beta_{rn} n p_t + g_n, \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial t} - \beta_{cp} p(N_{pt} - p_t) + \gamma_p p_t - \beta_{rp} p n_t + g_p, \\ \frac{\partial n_t}{\partial t} &= \beta_{cn} n(N_{nt} - n_t) - \gamma_n n_t - \beta_{rn} n p_t, \\ \frac{\partial p_t}{\partial t} &= \beta_{cp} p(N_{pt} - p_t) - \gamma_p p_t - \beta_{rp} p n_t, \\ \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon \varepsilon_0 F) &= e(p + p_t - n - n_t). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $n, p, n_t, p_t$  — концентрации свободных электронов в зоне проводимости, свободных дырок в валентной зоне, электронов и дырок, захваченных на соответствующие ловушки;  $\gamma$  — скорости ионизации заполненных ловушек;  $g$  — скорости генерации электронов и дырок (либо образование электрон-дырочных пар, либо туннелирование из контактов в объем приповерхностной области);  $\varepsilon$  — низкочастотная диэлектрическая проницаемость нитрида кремния.

Мы полагаем  $\beta_c = v\sigma_c$ ,  $\beta_r = v\sigma_r$ , где  $\sigma_c$  — сечения захвата для ловушек;  $\sigma_r$  — сечения рекомбинации электронов (дырок) с захваченными дырками (электронами);  $v$  — средние тепловые скорости носителей, выраженные через температуру материала  $T$  и эффективные массы носителей  $m^*$ . Все эти параметры мы считаем независимыми от поля  $F$ .

В рассматриваемом приближении плотности электронных и дырочных токов  $j_n, j_p$  записываются следующим образом [6]

$$\begin{aligned} j_n &= -e\mu_n \tilde{F}_n n + eD_n \frac{\partial n}{\partial z}, \\ j_p &= e\mu_p \tilde{F}_p p - eD_p \frac{\partial p}{\partial z}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $D$  — коэффициенты диффузии, которые предполагаются связанными с подвижностями носителей  $\mu$  (при низких полях  $F$ ) соотношением Эйнштейна:  $D = \mu kT/e$ . Появление в (2) "эффективных полей"  $\tilde{F}$  связано с тем, что для дрейфовых скоростей мы используем следующую аппроксимацию:  $u_d = \mu F v / \sqrt{\mu^2 F^2 + v^2}$ . Подобная аппроксимация часто используется для описания дрейфового движения электронов в полупроводниках [6].

При наличии между кремнием и нитридом кремния тонкой пленки оксида кремния (которая обычно остается на поверхности кремния после жидкостного или газового травления [1, 2]) предполагается, что в оксиде отсутствует захват заряда на ловушки, и отсутствует поверхностный заряд на границе  $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$  [3]. Поэтому влияние оксида сводится только к модификации граничных условий для нитрида на границе  $z = 0$ .

Рассмотрим инжекцию электронов на границе раздела металл/диэлектрик. Энергию электрона  $E$  и положение уровня Ферми  $E_f$  отсчитываем от дна зоны металла. Параметром, характеризующим границу раздела, является энергетический барьер на границе. Так же как в [9] мы пренебрегаем влиянием сил изображений при туннелировании электронов и дырок в нитрид кремния.

Предполагая ферми-дираковское распределение для электронов в металле и проинтегрировав по попечальным скоростям электронов, можно получить следующее выражение для плотности тока, инжектируемого через контакт из металла в диэлектрик

$$j = \frac{2m_0 e k T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^{+\infty} dE \cdot D(E) \cdot \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_f - E}{kT} \right) \right], \quad (3)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона;  $e$  — элементарный заряд;  $k$  — постоянная Больцмана;  $D(E)$  — вероятность туннелирования в зону проводимости диэлектрика для электрона, у которого  $z$ -я компонента кинетической энергии в металле равняется  $E$ . Для надбарьерных же значений энергий  $E > E_f +$  полагается  $D(E) = 1$ . Вероятность туннелирования рассчитывается в квазиклассическом приближении.

Полный инжекционный ток  $j$  можно представить в виде суммы тока надбарьерной (термической) инжекции  $j_s$  и туннельного тока  $j_{\text{tun}}$ . Используя разложение функции  $\ln(1+y)$  в ряд по  $y$  и проводя интегрирование в (3) в пределах от  $E_f +$  до  $+\infty$  для плотности тока надбарьерной инжекции (ток Шоттки) можно получить разложение в ряд, которое непосредственно используется в расчетах. Поскольку поле в оксиде предполагается однородным, то для туннелирования электронов через оксид барьера имеет форму трапеции, и туннельный интеграл вычисляется аналитически.

Традиционно для расчета плотности тока туннельной инжекции через контакт используется формула Фаулера-Нордхейма [3]. Мы отказались от использования этой формулы в пользу прямого численного расчета туннелирования электронов в объем диэлектрика. Основанием для этого послужил проведенный нами анализ приближений, сделанных при выводе формулы Фаулера-Нордхейма, показавший, что для ряда интересующих нас задач эти приближения являются слишком грубыми.

Данная схема используется и для описания туннельной инжекции дырок из металла, а также туннелирования электронов и дырок из кремния. Поскольку мы рассматриваем прямое туннелирование в объем диэлектрика, туннельные токи не включаются в граничные условия для токов и концентраций.

В общем случае ток на границе (без учета туннельного тока) можно представить в виде суммы двух компонент, одной из которых является ток надбарьерной инжекции  $j_s$ , забрасывающий заряд из металла (или кремния) в диэлектрик. Второй компонентой является ток  $j_{\text{st}}$ , соответствующий диффузионно-дрейфовому стоку заряда из диэлектрика обратно в металл (или кремний).

Для оценки тока  $j_{\text{st}}$  можно предположить в духе диффузионно-дрейфового подхода, что электроны в зоне проводимости диэлектрика имеют максвелловское распределение по скоростям в системе отсчета, движущейся с дрейфовой скоростью  $u_{dn}$ . Тогда для случая левой границы, например, мы получаем

$$j_{\text{st}}^{nl} = en_\gamma \left\{ \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} \exp\left(-\frac{m^* u^2}{2kT}\right) - \frac{1}{2} \left[ u - |u| \cdot \operatorname{erf}\left(|u|\sqrt{\frac{m^*}{2kT}}\right) \right] \right\}. \quad (4)$$

Здесь  $n_\gamma$  — концентрация электронов на границе, и через  $u$  обозначена скорость дрейфа  $u_{dn}$ .

В отличие от работы [3], где предполагалось, что ловушки имеют два дискретных уровня, мы рассматриваем непрерывное Больцмановское распределение электронов по энергии. Возникновение такого распределения можно объяснить столкновениями электронов с фононами, находящимися в тепловом равновесии.

Вероятность  $D(E)$  туннелирования электрона из ловушки оцениваем в одномерном квазиклассическом приближении, предполагая, что электрон туннелирует по траектории, вдоль которой энергетический барьер минимален. В этом случае для скорости освобождения электрона из ловушки получаем выражение

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \nu \cdot \exp\left(-\frac{\phi_e - \beta\sqrt{F}}{kT}\right) + \nu \cdot \frac{1}{kT} \int_0^{\phi_e - \beta\sqrt{F}} dE \cdot \exp\left[-\frac{E}{kT} - \frac{\sqrt{8m^*}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dz \sqrt{V(z) - E}\right], \\ V(z) &= \phi_e - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon^\infty\varepsilon_0 z} - eFz, \quad \beta = \sqrt{\frac{e^3}{\pi\varepsilon^\infty\varepsilon_0}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\phi_e$  — энергия ловушки;  $F$  — средняя напряженность электрического поля в окрестности ловушки;  $\varepsilon^\infty$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость нитрида. Первое слагаемое в (5) соответствует механизму надбарьерной ионизации Пула-Френкеля (внутренний эффект Шоттки), а второе — термостимулированному туннелированию (ТАТ).

Туннельные интегралы в показателе экспоненты в (5) мы рассчитывали точно, явно выразив их через полные эллиптические интегралы 1- и 2-го рода и используя разложение эллиптических интегралов в ряды.

## 2. Численная модель

Для построения численной схемы рассматриваемая область  $0 < z < d_n$  разбивается на три области, две из которых  $0 < z < d_s$  и  $d_n - d_s < z < d_n$  являются приграничными, и в них строилась достаточно мелкая равномерная сетка. В средней области  $d_s < z < d_n - d_s$  строилась неравномерная сетка с разрешением сетки в центре расчетной области. Основные расчеты проводились для  $d_s = 100\text{\AA}$ . В каждой из приграничных областей бралось до 200 узлов.

В литературе показано [5], что для такой задачи, включающей несколько сильно различающихся времен релаксации, наилучшую сходимость дает полностью неявная схема. Поэтому расчеты проводились с использованием полностью неявной консервативной разностной схемы первого порядка по времени и второго — по пространственной переменной. Разностные уравнения для первых двух уравнений из (1) и для уравнения Пуассона имеют вид

$$\begin{aligned} n^k &= n^{k-1} + \frac{\tau}{e \Delta_i} [j_{n,i+1/2}^k - j_{n,i-1/2}^k] + \tau [-\beta_{cn} n^k (N_{nt} - n_t^k) + \gamma_n n_t^k] - \beta_{rn} n^k p_t^k + g_n^k, \\ p^k &= p^{k-1} - \frac{\tau}{e \Delta_i} [j_{p,i+1/2}^k - j_{p,i-1/2}^k] + \tau [-\beta_{cp} p^k (N_{pt} - p_t^k) + \gamma_p p_t^k] - \beta_{rp} p^k n_t^k + g_p^k, \\ \frac{1}{\Delta_i} [F_{i+1/2}^k - F_{i-1/2}^k] &= \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} (p^k + p_t^k - n^k - n_t^k), \end{aligned}$$

где у переменных величин для простоты записи опущен индекс  $i$ , указывающий номер пространственного узла;  $\Delta_i = (h_i + h_{i-1})/2$ , и  $h_i$  — расстояние между узлами с номерами  $i$  и  $(i+1)$ .

Соответствующие разностные уравнения для захваченного на ловушки заряда можно записать в виде, разрешенном относительно концентраций  $n_t^k$  и  $p_t^k$ ,

$$\begin{aligned} n_t^k &= \frac{n_t k - 1 + \tau \beta_{cn} n^k N_{nt}}{1 + \tau (\beta_{cn} n^k + \beta_{rp} p^k + \gamma_n)}, \\ p_t^k &= \frac{p_t k - 1 + \tau \beta_{cp} p^k N_{pt}}{1 + \tau (\beta_{cp} p^k + \beta_{rn} n^k + \gamma_p)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Система разностных уравнений (6) после подстановки в них выражений  $n_t^k$  и  $p_t^k$  из (6) решается итерированием по нелинейности с использованием метода Ньютона и матричной прогонки.

Для контроля точности расчета для каждого из двух последовательных временных шагов  $\tau$  проводился пересчет с удвоенным временным шагом  $2\tau$  на интервале времени  $(t_k, t_k + 2\tau)$  [5]. В случае большой разности в полученных решениях шаг по времени уменьшался. При хороших параметрах сходимости шаг по времени увеличивался.

Для рассматриваемой задачи характерно сильное изменение концентраций заряженных частиц (на несколько порядков) по пространственной координате и относительно плавное поведение плотности тока  $j(z)$  и напряженности электрического поля  $F(z)$ . В силу этого, для более точной аппроксимации выражений (2) для токов использовалось преобразование Гуммеля [5, 6]. Существенным достоинством этого преобразования является также и то, что оно автоматически обеспечивает плавный переход от "разностей вперед" к "разностям назад" в разностной схеме при изменение знака поля в дрейфовом режиме.

Сильная нелинейность подобных гидродинамических моделей вызывает серьезные математические проблемы как при анализе их в дифференциальной постановке (см., например, [10]), так и при обосновании алгоритмов их численной реализации [5].

### 3. Результаты расчетов

Разработанная программа предназначена для расчета нестационарных процессов поляризации и деполяризации пленок нитрида кремния. Подобные расчеты были проведены нами для моделирования экспериментальных температурных зависимостей для электронного тока через пленки а-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, подвергнутые радиационному облучению ионами [11]. Экспериментальные данные для образцов, имплантированных ионами бора, представлены на рис. 1 (линии 1-3). Кривые 1'-3' получены на образцах, подвергнутых отжигу после имплантации при температуре 700 °C. При этом, значения токов падают до величин, характерных для исходных необлученных образцов. В работе [11] возрастание тока при имплантации объяснено образованием при облучении дефектов Si-Si, способных захватывать электроны. В экспериментах, представленных в работе [11], ток измерялся в режиме термостимулированной деполяризации при плавном охлаждении предварительно нагреветого до высокой температуры образца. Отклонение экспериментальных зависимостей от линейных на рис. 1 свидетельствует о наличии ТАТ-эффекта.

В расчетах, представленных в данной работе, для барьеров на границах мы использовали значения, приведенные на энергетической диаграмме в работе [9]. Для других параметров использовались следующие значения:  $\varepsilon_{Si_3N_4} = 7.0$ ,  $\varepsilon_{Si_3N_4}^\infty = 4.0$ ,  $\varepsilon_{SiO_2} = 3.9$ ,  $d_n = 1000 \text{ \AA}$ ,  $d_o = 15 \text{ \AA}$ . И для электронов и для дырок использовались значения (в случае, если они не оптимизировались):  $\sigma_e = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2$ ,  $\sigma_r = 0$ ,  $\mu = 20 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ ,  $m^* = 0.5 m_0$ ,  $N_t = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $\nu = 10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

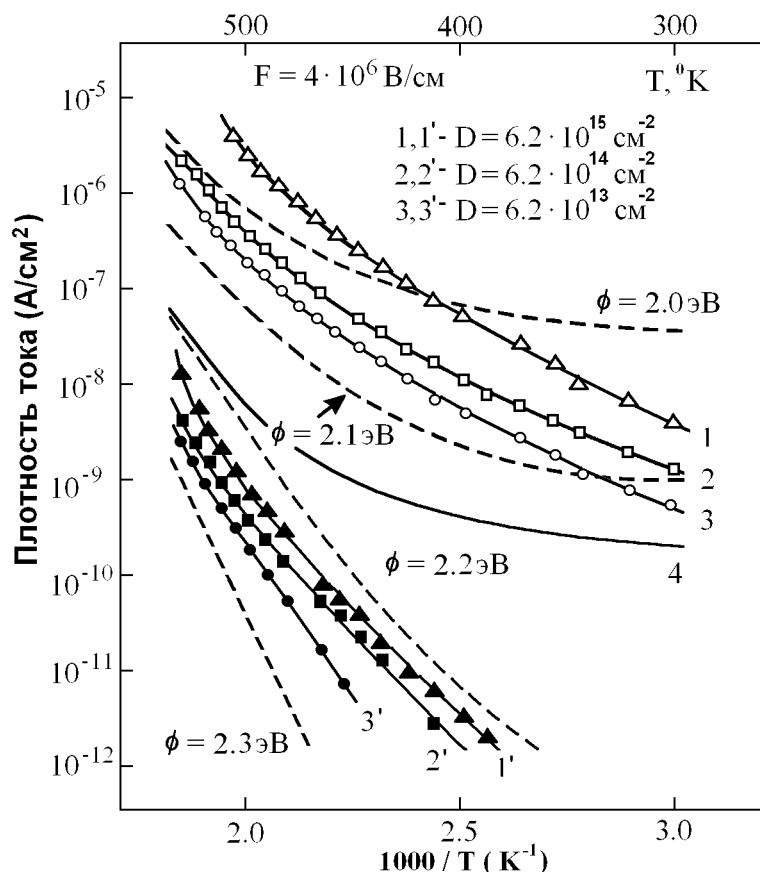


Рис. 1. Температурная зависимость тока для образцов а- $\text{Si}_3\text{N}_4$ , имплантированных ионами бора. 1–3 — экспериментальные данные, соответствующие разным дозам облучения  $D$ . 1'–3' получены для образцов, подвергнутых отжигу после имплантации. Теоретические кривые для скорости охлаждения 20 К/с и разных значений энергии ловушек  $\phi$  изображены штрих-пунктирными линиями. 4 — стационарный ток для  $\phi = 2.2$  эВ.

Расчет стационарного тока для энергии ловушки  $\phi = 2.2$  эВ (кривая 4 на рис. 1) дает быстрый выход на туннельный режим при увеличении обратной температуры, что не согласуется с экспериментальными данными.

Для объяснения этого расхождения можно предположить, что при низких температурах в таких экспериментах релаксационные процессы деполяризации не успевают завершиться, что ведет к более низким значениям токов по сравнению со стационарными токами для данной температуры. Поэтому для воспроизведения экспериментальных данных необходимо моделирование нестационарных процессов деполяризации. Результаты таких расчетов для скорости охлаждения 20 К/сек, представленные на рис. 1 штриховыми линиями для разных энергий ловушек, качественно согласуются с экспериментом для отожженных образцов для энергий  $\phi_e = 2.2 - 2.3$  эВ (три нижние экспериментальные кривые). Это согласуется с результатами работы [3], где получено в рамках ТАТ-модели значение  $\phi = 2.2$  эВ при частотном факторе  $\nu = 10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

Однако скорость охлаждения 20 К/сек примерно на порядок превышает оценку для конкретных экспериментальных условий. Для больших токов (кривые 1–3) даже такая скорость охлаждения образца уже недостаточна для воспроизведения экспериментальных кривых, то есть не удается одновременно описать экспериментально наблюдаемое поведение тока в высокотемпературной и низкотемпературной областях.

В связи с этими проблемами мы провели более подробное изучение модели для случая стационарных токов в нитриде кремния. Стационарные решения находились методом установления. Мы использовали температурные зависимости токов (рис. 2), полученные в других экспериментальных условиях в работе [7]. Данные, представленные на рис. 2 маленькими кружками, получены для N-обогащенных пленок нитрида кремния толщиной 650 Å. Темные кружки соответствуют положительному потенциалу на металлическом контакте (Al), а открытые кружки — отрицательному потенциалу на металле. В первом случае доминирует инжекция электронов из кремния, а во втором — инжекция дырок из кремния [7]). Четко вы-

раженный выход графиков на туннельное плато при увеличении обратной температуры свидетельствует о том, что графики действительно соответствуют стационарному режиму.

Для изучения проблемы проводимости нитрида кремния полезным оказывается часто используемое приближение среднего поля (см., например, [2, 7]), оправданное в тех случаях, когда можно пренебречь пространственном зарядом в объеме диэлектрика. В рамках этого приближения мы предполагаем, что плотность стационарного тока электронов (или дырок) через образец пропорциональна вероятности ионизации соответствующих ловушек

$$j = e \cdot B \cdot \int_0^{\infty} dE f(E, T) D(E, F), \quad (7)$$

где  $B$  — эмпирическая константа. Подобная простая модель рассматривалась еще Френкелем [12]. Отличие состоит в том, что в [12] рассматривался только пул-френкелевский механизм ионизации ловушек, и  $B$  линейно зависело от поля. Мы пренебрегли зависимостью  $B$  от поля, предполагая применение этой модели для случая достаточно больших полей, для которых должны проявляться эффекты насыщения дрейфовой скорости. Кроме параметра  $B$  выражение (7) зависит также от эффективной туннельной массы  $m^*$  электрона (или дырки) и энергии ловушки  $\phi$ . Основная возникшая перед нами проблема хорошо

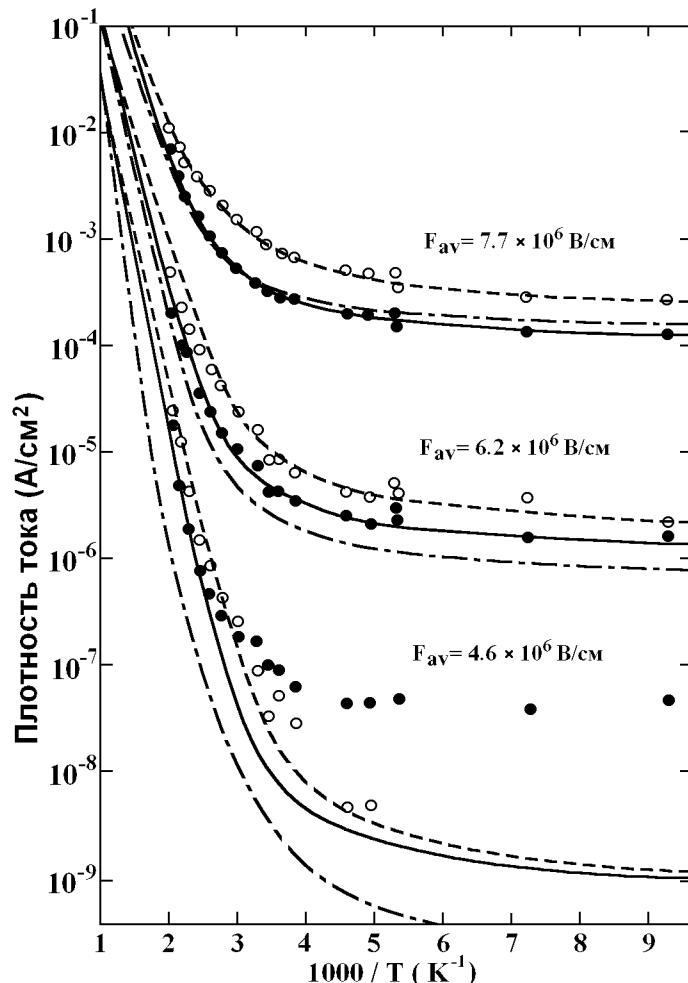


Рис. 2. Температурная зависимость стационарного тока. Темные кружки — экспериментальные данные для электронного тока; светлые кружки — для дырочного тока. Сплошные линии — расчет по модели среднего поля. Штриховые линии — то же для дырочного тока. Штрих-пунктирные линии — расчет по диффузионно-дрейфовой модели.

илюстрируется уже на простой модели (7). Рассчитанные в рамках этой модели кривые 1 и 2, представленные на рис. 3, соответствуют энергиям ловушек 2.1 и 1.5 эВ. Для обоих случаев параметры  $B$

и  $m^*$  подбирались из условия воспроизведения низкотемпературных экспериментальных туннельных токов при полях 6.2 and  $7.7 \cdot 10^6$  В/см. Проблема состоит в том, что не удается одновременно описать экспериментально наблюдаемое поведение тока в высокотемпературной и низкотемпературной областях. Аналогичная проблема сохраняется и в расчетах по диффузионно-дрейфовой модели (1), учитывающей пространственный заряд.

Поскольку физика процессов, которые могут влиять на подавление туннельной ионизации ловушек, остается неясной, мы попытались рассмотреть эту проблему на феноменологическом уровне. Для включения эффекта подавления туннелирования мы формально переопределили частотный фактор в (5), записав его в виде

$$\nu(E) = \nu \cdot \exp[-\alpha \cdot (V_{\max} - E)] \quad (8)$$

для  $V_{\max} - E > 0$ , где  $V_{\max}$  — энергия, соответствующая вершине потенциального барьера на пути туннелирования электрона;  $\alpha$  — свободный параметр модели. Такой же экспоненциальный множитель мы вводим, соответственно, и в формулу (7). Оптимизация четырех параметров ( $\phi$ ,  $m^*$ ,  $B$ ,  $\alpha$ ) в рамках

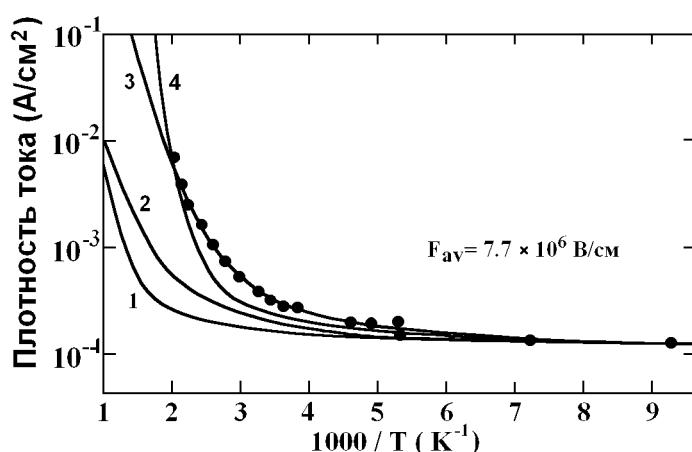


Рис. 3. Расчет по модели среднего поля для температурной зависимости стационарного электронного тока. 1, 2 —  $\alpha = 0$ :  $\phi = 2.1$  эВ (1),  $\phi = 1.5$  эВ (2). 3, 4 — с оптимизацией  $\alpha$ :  $\phi = 1.5$  эВ (3),  $\phi = 2.2$  эВ (4).

модели (7) для полей 6.2 and  $7.7 \cdot 10^6$  В/см позволила получить почти идеальное согласие с экспериментом для этих полей. Результаты расчетов представлены на рис. 2 сплошными линиями для электронов ( $\phi_e = 1.5$  эВ,  $m_e^* = 0.5 m_0$ ,  $B = 2.6 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $\alpha = 18 \text{ эВ}^{-1}$ ) и штриховыми линиями для дырок ( $\phi_e = 1.4$  эВ,  $m_h^* = 0.7 m_0$ ,  $B = 7.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $\alpha = 19 \text{ эВ}^{-1}$ ). Расхождение для туннельного электронного тока для более низкого поля  $4.6 \cdot 10^6$  В/см (темные кружки) возможно связано с какими-то медленными релаксационными процессами при относительно низких полях в конкретных экспериментальных условиях работы [7].

На рис. 3 для сравнения с оптимизированной кривой для электронов (3) ( $\phi_e = 1.5$  эВ) представлена также кривая 4, полученная для энергии ловушки  $\phi_e = 2.2$  эВ ( $m_e^* = 0.15 m_0$ ,  $B = 1.35 \cdot 10^{28} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $\alpha = 18 \text{ эВ}^{-1}$ ). Такое значение  $\phi_e$  получено Манзини [3]. Видно, что форма этой кривой существенно отличается от экспериментальных данных работы [7]. Поэтому, предполагая, что в работах [7, 3] мы имеем дело с одинаковыми ловушками, можно сделать вывод, что модель Манзини [3] представляет из себя интерполяционную схему, которая хорошо работает в ограниченной температурной области. При этом согласование с наклоном пул-френкелевской части тока осуществляется за счет введения температурной зависимости в другие параметры модели.

На рис. 2 штрих-пунктирными линиями представлены результаты расчетов электронного тока по диффузионно-дрейфовой модели (1) с использованием трех параметров, оптимизированных в рамках модели (7) ( $\phi_e = 1.5$  эВ,  $m^* = 0.5 m_0$ ,  $\alpha = 18 \text{ эВ}^{-1}$ ), и значений  $d_n = 650 \text{ \AA}$ ,  $d_o = 0$  из работы [7]. Мы оптимизировали только частотный фактор  $\nu$ . Его значение  $\nu = 4.3 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$  было определено из воспроизведения экспериментального значения тока для  $F = 7.7 \cdot 10^6$  В/см и  $10^3/T = 3.0 \text{ К}^{-1}$ . Видно, что даже этот неоптимизированный набор параметров неплохо воспроизводит экспериментальные данные.

Таким образом, результаты проведенного в данной работе численного моделирования проводимости в тонких пленках нитрида кремния показали, что существующие модели ионизации глубоких ловушек

не позволяют одновременно описать имеющиеся экспериментальные данные в широком температурном диапазоне от 80 до 700 К. Физические причины такого расхождения остаются неясными. Однако показано, что введение простой зависимости частотного фактора от энергии туннелирующего электрона позволяет на феноменологическом уровне добиться удовлетворительного согласия с экспериментом.

## Список литературы

- [1] Гриценко В. А. Строение и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП структурах. Новосибирск: Наука, 1993.
- [2] Нитрид кремния в электронике, под ред. Ржанова А. В. Новосибирск: Наука, 1982.
- [3] MANZINI S. Electronic processes in silicon nitride // J. of Applied Physics. 1987. Vol. 62, No. 8. P. 3278–3284.
- [4] GANICHEV S. D., ZIEMANN E., PRETTL W., YASSIEVICH I. N., ISTRATOV A. A., WEBER E. W. Distinction between the Poole-Frenkel and tunneling models of electric-field-stimulated carrier emission from deep levels in semiconductors, Physical Review. 2000. Vol. 61, No. 15. P. 10361–10365.
- [5] Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига: Зинатне, 1986.
- [6] Мулярчик С. Г. Численное моделирование микроэлектронных структур. Минск: Изд. Университетское, 1989.
- [7] WATANABE K., WAKAYAMA S. Electric conduction in nitrogen-rich silicon nitride films produced by SiH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub> // J. of Applied Physics. 1982. Vol. 53, No. 1. P. 568–575.
- [8] БЕРЕЗИН Ю. А., Вшивков В. ., Головнев И. Ф., Яненко Н. Н. Математические модели и численные методы расчета полупроводниковых устройств. I., Препринт ИТПМ СО АН ССР. 1983, № 32–83. 47 с.
- [9] GRITSENKO V. A., MEERSON E. E., MOROKOV Yu. N. Thermally Assisted Hole Tunnelling at Au-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Interface and Energy-Band Diagram of MNOS Structures Physical Review B 57 1998. No.4. R2081–R2083.
- [10] Блохин А. М., Мищенко Е. В. О решениях стационарной гидродинамической модели переноса заряда в полупроводниках // Вычислите. технологии. 2000. Т. 5, № 5. С. 3–25.
- [11] GRITSENKO V. A., MOROKOV Yu. N., XU J. B., PRIDACHIN N. ., KALININ V. V., NG A. C., LAU L. W. M., KWOK R. W. M. Charge Transport and Nature of Traps in Implanted Silicon Nitride // Proc. of Hong Kong Electron Devices Meeting, June 1999, Hong Kong. P. 62–65.
- [12] FRENKEL J. On Pre-Breakdown Phenomena in Insulators and Electronic Semi-Conductors // Physical Review. 1938. Vol. 54, No. 8. P. 647–648.