

Схема	δ, J	λ			
		0	1	5	10
БМЗ	J	136	133	229	419
	$\delta 10^{-3}$	4,363	4,387	4,413	4,363
НФПП	J	15	19	Расходится	Расходится
	$\delta 10^{-5}$	6,862	2,540	—	—
ПП	J	54	53	76	130
	$\delta 10^{-4}$	4,558	4,973	5,129	4,985
МНФ	J	30	41	107	212
	$\delta 10^{-4}$	2,011	3,357	6,291	6,493
МНФПП	J	15	18	29	45
	$\delta 10^{-5}$	5,446	4,523	3,673	2,823

Отметим, что при $\lambda = 0$ решаемая задача является задачей ДП, а при $\lambda > 0$ — задачей БДП, причем с ростом λ неравенство (7) усиливается. В таблице даны количества итераций J и погрешности δ по разным схемам при $n = 30$ и разных λ . Отсюда следует, что модифицированная схема МНФ, а также комбинированная схема МНФПП сходятся и в случае отсутствия диагонального преобладания в матрице коэффициентов исходной системы уравнений, причем наибольшей скоростью сходимости обладает схема МНФПП.

Приведем зависимости числа итераций J и δ для схемы МНФПП от числа узлов по одному направлению и при $\lambda = 10$:

n	15	20	25	30
J	24	31	37	45
$\delta 10^{-5}$	1,827	1,309	4,123	2,823

Видно, что зависимость J от n линейная.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гинкин В. П. Метод h -факторизации для решения двумерных уравнений эллиптического типа // Вычислительные методы линейной алгебры. — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1977.
2. Гинкин В. П. Метод параболических прогонок для решения двумерных уравнений эллиптического типа. — Обнинск, 1981. — (Препринт/ФЭИ; 1153).
3. Гинкин В. П., Кончик А. П. Элементы теории блочных итерационных методов. — Обнинск, 1985. — (Препринт/ФЭИ; 1738).

Поступила в редакцию 12 июня 1987 г.

УДК 537.222.2

И. В. ТРАВКОВ, В. А. ШВЕЙГЕРТ

(Новосибирск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИКЕ СО СЛУЧАЙНО РАСПОЛОЖЕННЫМИ ГЛУБОКИМИ ЦЕНТРАМИ ЗАХВАТА С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ РАЗОГРЕВА ЭЛЕКТРОНОВ

Возросший в последние годы интерес к теоретическому и экспериментальному изучению переноса заряда через аморфные вещества обусловлен все более интенсивным использованием диэлектрических материалов при создании полупроводниковых приборов. Особую роль в про-

проводимости некоторых диэлектриков (например, Si_3N_4) играют глубокие центры захвата свободных носителей. Свойство нитрида кремния эффективно накапливать и долго хранить захваченный заряд благодаря наличию высокой концентрации ловушек $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ привело к использованию его при создании МНОП (металл — нитрид кремния — оксид кремния — полупроводник) элементов памяти [1].

Для моделирования переноса заряда в системах такого типа широкое распространение получила дрейфовая модель, включающая уравнение непрерывности для свободных носителей, уравнения кинетики заполнения центров локализации и уравнение Пуассона [2, 3].

Однако такая модель не учитывает особенностей процесса протекания тока, обусловленных дискретным и случайным расположением центров захвата и, как следствие флуктуациями электрического поля в объеме диэлектрика и на контакте. Кроме того, данная модель игнорирует возможность разогрева электронов в сильном внешнем поле и связанное с этим изменение вероятности захвата на ловушки.

В настоящей работе для описания переноса заряда с учетом указанных выше особенностей используется метод прямого статистического моделирования.

Модель. При построении модели использовался экспериментальный факт, свидетельствующий о том, что в исходном состоянии неполяризованный диэлектрик квазинейтрален. Предполагалось, что за захват носителей отвечают заряженные центры кулоновского типа (электроны локализируются на положительных акцепторах, дырки — на донорах). В качестве возможных вариантов были рассмотрены случаи коррелированного и некоррелированного расположения ловушек обоих знаков.

В связи с тем, что численное моделирование протекания тока в трехмерном случае потребовало бы огромных затрат машинного времени, для исследования качественной картины в настоящей работе рассматривалась двумерная задача. Объект моделирования — МДП (металл — диэлектрик — полупроводник)-структура. Граничные условия были выбраны периодическими вдоль оси X (в направлении параллельно контактам полупроводник — диэлектрик и диэлектрик — металл), кроме того, учитывался заряд изображений на этих контактах.

Предполагалось, что инжекция носителей в объем диэлектрика происходит за счет туннелирования электронов из полупроводника через барьер на контакте в случае положительного потенциала на металлическом электроде. Инжекцией дырок из металла пренебрегали. Вероятность туннелирования записывалась согласно [4] в виде

$$W_{\text{инж}} = AE_k^2 \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m^*e} \frac{V^{3/2}}{E_k}\right). \quad (1)$$

Здесь E_k — напряженность электрического поля на границе диэлектрик — полупроводник; m^* , e — эффективная масса и заряд электрона; \hbar — постоянная Планка; V — высота энергетического барьера на контакте; A — константа, характеризующая поток электронов из полупроводника к границе с диэлектриком. В выражении (1) не учитывалась возможная неоднородность барьера на контакте, что может, вообще говоря, приводить к дополнительным флуктуациям вероятности инжекции и различным направлениям импульса туннелировавшего электрона [5].

Носители, инжектированные в объем диэлектрика, могут захватываться случайно расположенными ловушками. Считалось, что электрон, находящийся в зоне проводимости, переходит в локализованное состояние, если за счет потерь энергии на оптических фононах он оказывается в потенциальной яме центра захвата. Данное условие записывалось таким образом:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) < \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i|} \right\} + eE_{\text{вн}}(y - y_k), \quad (2)$$

где ε — энергия свободного электрона, находящегося в точке с координатой \mathbf{r} ; \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_b — координаты i -й ловушки и положения минимума потенциала для одиночного заряженного центра во внешнем поле; κ — диэлектрическая проницаемость материала; $E_{вп}$ — напряженность внешнего электрического поля, направленного вдоль оси Y .

Вероятность ионизации заполненной ловушки бралась в виде

$$W_{ион} = B \exp(-1/kT) (\Phi_i - \Delta\Phi), \quad (3)$$

где k , T — постоянная Больцмана и температура; Φ_i — энергия уровня в центре захвата, одинаковая для всех ловушек ($\Phi_i \approx 1,5$ эВ); $\Delta\Phi$ — изменение барьера для ионизации за счет как внешнего поля, так и локальных электрических полей, обусловленных присутствием соседних центров; B — частотный фактор ($\sim 10^{13}$ с $^{-1}$).

Расчет траекторий электронов и их энергетических характеристик проводился методом аналогового моделирования. В рамках данного метода предполагается, что носители движутся во внешнем электрическом поле, испытывая последовательные независимые акты рассеяния с испусканием или поглощением фононов. Указанный подход к моделированию переноса заряда основан на использовании метода Монте-Карло. Построение программы подробно описано в [6].

Как отмечалось выше, один из материалов, представляющий наибольший интерес для изучения и характеризующийся наличием высокой концентрации центров захвата, — нитрид кремния. Имеющиеся литературные данные о параметрах, определяющих проводимость пленок Si_3N_4 , позволяют лишь более или менее точно судить о характеристиках глубоких центров захвата. Поскольку о параметрах электрон-фононного взаимодействия известно крайне мало, предполагалось, что для нитрида и оксида кремния они не должны сильно различаться.

Результаты последних теоретических и экспериментальных работ по изучению переноса заряда в пленках SiO_2 в сильных электрических полях [7—9] позволяют сделать вывод, что необходим учет следующих механизмов электрон-фононного взаимодействия: полярное рассеяние на продольных оптических (LO) фононах и неполярное — на акустических фононах. Сила электрон-фононного взаимодействия характеризуется скоростью рассеяния, которую для данных механизмов можно записать в следующем виде:

а) полярные LO -фононы [10] («+» — испускание, «-» — поглощение фонона с квазимпульсом \mathbf{q} и энергией $\hbar\omega_{LO}$):

$$f_{опт}^{\pm} = \sqrt{\frac{m^*}{2}} \frac{e^2 \omega_{LO}}{4\pi\hbar} \left(\frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa} \right) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \ln \left\{ \frac{1 + (1 \mp \hbar\omega_{LO}/\varepsilon)^{1/2}}{\pm 1 \mp (1 \mp \hbar\omega_{LO}/\varepsilon)^{1/2}} \right\}; \quad (4)$$

$$n_q = (\exp(\hbar\omega_{LO}/kT) - 1)^{-1},$$

где n_q — числа заполнения фононов; κ_{∞} — высокочастотная диэлектрическая проницаемость; ω_{LO} — частота LO -фонона;

б) неполярное акустическое рассеяние [11], $\varepsilon \ll \varepsilon_{BZ}$:

$$f_{ак1}^{\pm} \approx \frac{3m^{*3/2} C_1^2 kT}{\sqrt{2} \pi \rho c_s^2 \hbar^4} \sqrt{\varepsilon}; \quad (5)$$

в) неполярное акустическое рассеяние [11], $\varepsilon > \varepsilon_{BZ}/2$:

$$f_{ак2}^{\pm} \approx \frac{8\pi^3 \hbar^2 N^2 \sigma}{m^* M_{> \omega_{BZ}}} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{BZ}} \right)^{3/2} \left(n_{q_{BZ}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Здесь C_1 — деформационный потенциал; ρ — плотность; c_s — скорость звука; N — концентрация атомов решетки; $M_{>}$ — масса наиболее тяже-

Потери энергии носителей при взаимодействии с колебаниями решетки обуславливаются рассеянием с испусканием продольных оптических фононов, при этом в силу полярности рассеяния существенных изменений направления квазиимпульса не происходит. При увеличении энергии электрона, как видно из (6), резко возрастает вероятность неполярного квазиупругого рассеяния на акустических фононах (процессы переброса).

Результаты расчетов. Размеры моделируемой области диэлектрического слоя МДП-структуры составляли $d_x \times d_y = 50 \times 50$ нм. Здесь d_y — толщина пленки (ось Y направлена перпендикулярно плоскости контактов). Концентрация центров захвата в разных расчетах варьировалась от $6 \cdot 10^{18}$ до $6 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$, температура задавалась постоянной: $T = 300$ К.

Как показали результаты выполненных расчетов, введение в модель различных механизмов рассеяния электронов на фононах оказывает существенное влияние на характер протекания тока через объем диэлектрика. На рис. 1 представлены типичные траектории носителей, не взаимодействующих с колебаниями решетки (в расчетах использована модель [12]). Как отмечалось в [12], такая пространственная неоднородность обусловлена сильными флуктуациями электрического поля на ионизирующем контакте (рис. 2), вызванными случайным расположением ловушек. На рис. 3 представлены траектории электронов, полученные с помощью численного моделирования для двух значений внешнего электрического поля по изложенному в настоящей работе подходу. Хорошо видно, что для сравнительно слабого поля ($E = 2 \cdot 10^6$ В/см, см. рис. 3, а) реализуется картина протекания заряда канального типа, близкая к приведенной на рис. 1. Однако увеличение напряженности электрического поля ($E = 4 \cdot 10^6$ В/см, см. рис. 3, б), обуславливающее разогрев электронов и их рассеяние на большие углы, приводит к более однородному переносу по объему диэлектрика.

Средняя энергия электронов и их дрейфовая скорость совпадают с результатами [8] для безловушечного SiO $_2$, поскольку использовалась модель процессов рассеяния, аналогичная принятой в данной работе. Упругое рассеяние на кулоновских центрах захвата не вносит какого-

либо заметного вклада в эти величины вследствие того, что при концентрации $N_t \sim 6 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$ длина релаксации

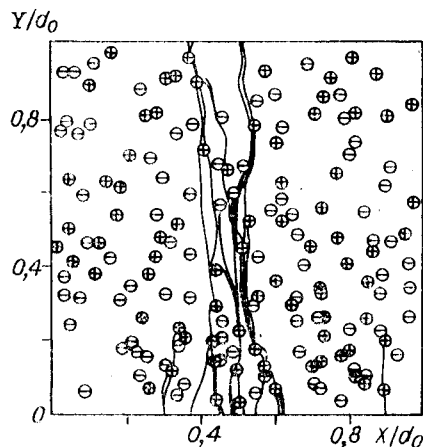


Рис. 1. Траектории электронов в диэлектрике без учета рассеяния на фононах:

$E_{PH} = 4 \cdot 10^6$ В/см; $d_y = 50$ нм; $\Phi_t = 1,5$ эВ; $A = 2,2 \cdot 10^{-6}$ А/В 2 ; $B \pm 10^{13}$ с $^{-1}$; $N_t = 6 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$. Расположение центров захвата некоррелированное

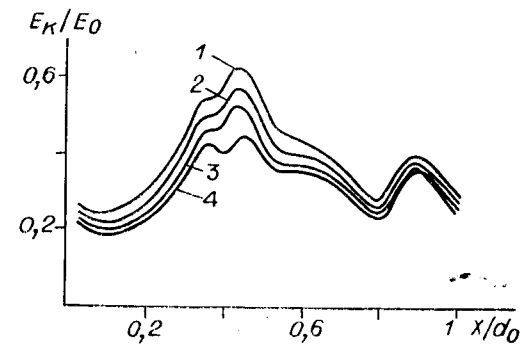


Рис. 2. Электрическое поле вдоль контакта полупроводник — диэлектрик в различные моменты времени при поляризации структуры:

$E_0 = 8,1 \cdot 10^6$ В/см; $1 - t = 0$, $2 - 10^{-8}$, $3 - 10^{-6}$, $4 - 10^{-3}$ с. Параметры расчета как для рис. 1

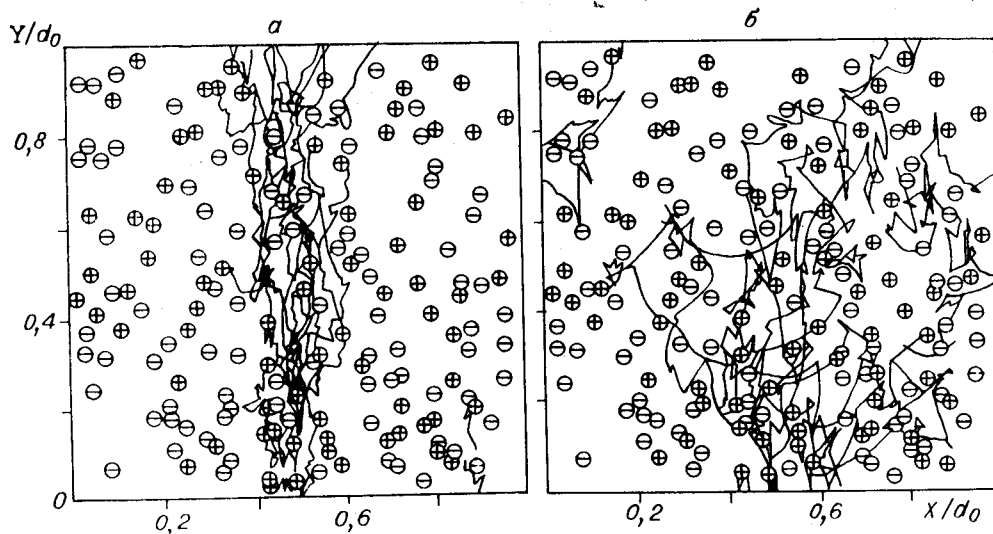


Рис. 3. Траектории электронов с учетом взаимодействия с фононами:
 а — $E_{\text{вн}} = 2 \cdot 10^6$ В/см; б — $E_{\text{вн}} = 4 \cdot 10^6$ В/см. Остальные параметры как для рис. 1

импульса электрона с $\varepsilon = 1$ эВ составляет ~ 100 нм (что значительно больше характерных длин остальных процессов). Локализация носителей на ловушках также не должна оказывать влияния на функцию распределения ввиду того, что типичное значение длины пробега электронов до захвата $l_3 \sim 50\text{--}150$ нм (при $N_t \sim 10^{20}$ см $^{-3}$; E от $2 \cdot 10^6$ до $5 \cdot 10^6$ В/см) превышает длину релаксации энергии электронов $\sim 7\text{--}15$ нм [8].

Следует указать на ряд существенных отличий результатов работ [2, 3, 13, 14] и расчетов по модели [12]. Возрастание энергии носителей в достаточно сильном поле вызывает увеличение длины свободного пробега до захвата ловушкой. Как следствие этого, на первом этапе накопления заряда (до начала ионизации заполненных центров захвата) реализуется сравнительно однородное по толщине диэлектрика расположение локализованных электронов. Указанный эффект проявляется в возрастании центроида захваченного заряда до значений $\sim 0,3\text{--}0,4 d_0$ на рис. 4 для $N_t = 6 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$. На втором этапе поляризации структуры (после начала ионизации) происходит перераспределение локализованных носителей за счет освобождения электронов в первую очередь с ловушек, ближайших к металлическому контакту и находящихся в области более сильного поля. Центроид заряда при этом уменьшается и достигает стационарного уровня при установлении равновесия между токами инжекции и эмиссии с центров захвата. На наш взгляд, такая качественная картина поляризации структуры возникает при достаточно сильном электрическом поле, обеспечивающем разогрев носителей ($E \approx 2 \cdot 10^6$ В/см), и концентрации центров $\sim 10^{19}$ см $^{-3}$. Другими словами, должна реализоваться ситуация со сравнительно большой l_3 . В нашем случае уменьшение σ_0 и, как следствие, рост l_3 обусловлены ростом энергии носителей при движении в электрических полях. Малое сечение захвата и аналогичная картина кинетики поляризации соответственно могут иметь место в отсутствие разогрева носителей для ловушек дипольного либо нейтрального типа, а также для дефектов со сложной структурой.

В результате проведенных расчетов показано, что инжектированные носители с энергией несколько электронвольт могут захватываться на ловушки в непосредственной близости (~ 1 нм) от контакта полупроводник — диэлектрик. Объяснение этому может быть следующим: на первой стадии при движении электрона в глубь объема его энергия

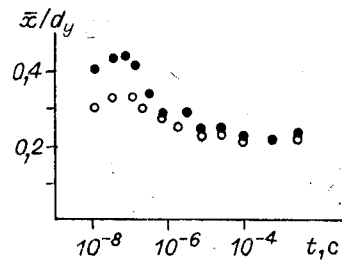


Рис. 4. Зависимость центроида захваченного заряда от времени для двух значений концентрации центров захвата: ● — $N_t = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; ○ — $N_t = 6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Параметры расчета как для рис. 1

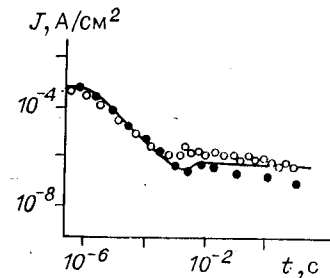


Рис. 5. Ток через структуру как функция времени:

● — экспериментальные данные [13]; сплошная кривая — результаты расчетов по одномерной дрейфовой модели [13]; ○ — результаты данной работы; $E_{\text{вн}} = 6,5 \cdot 10^6 \text{ В/см}$; $d_y = 76 \text{ нм}$. Остальные параметры как для рис. 1

релаксирует к средней энергии распределения; затем из-за изотропности рассеяния на коротковолновых акустических фоновых направлениях дрейфа может смениться на противоположное и электрон окажется в приконтактной области, потеряв энергию при движении по полю.

При моделировании накопления заряда в структуре с концентрацией ловушек $N_t = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ было получено, что количество носителей, пересекающих слой диэлектрика без захвата по отношению к числу инжектированных электронов, достигает 30 % в отсутствие и 50 % при наличии корреляции в расположении ловушек обоих знаков. Процент носителей, прошедших диэлектрик без захвата, снижается при таком увеличении концентрации ловушек, которое не приводит к существенным изменениям стационарного значения центроида захваченного заряда (см. рис. 4).

Следует указать, что в зависимости тока через МНОП-структуру от времени (рис. 5) и в значениях стационарной проводимости нет значительных отличий между результатами расчетов по одномерной [2, 3, 13] и изложенной в настоящей работе моделям. На наш взгляд, такое согласие между интегральными характеристиками обусловлено тем, что уровень тока главным образом определяется степенью экранировки инжектирующего контакта. Снижение поля на данном контакте за счет накопления заряда на ловушках слабо зависит от введенных в рассмотрение флуктуаций потенциала и различных микроскопических процессов при условии, что происходит однородный перенос электронов по объему диэлектрика.

На основе выполненных в настоящей работе расчетов можно сформулировать основные выводы.

1. Разогрев свободных носителей в сильном электрическом поле приводит к более однородному протеканию тока по объему диэлектрика за счет изотропного рассеяния на акустических фоновых.

2. Моделирование поляризации структуры показывает возможность немонойтонной зависимости центроида захваченного заряда от времени.

3. Одномерная модель [2, 3] качественно верно описывает кинетику релаксации заряда в структуре и при соответствующем выборе параметров может давать количественное согласие с экспериментальными данными. Расчеты методом Монте-Карло по модели, изложенной в настоящей работе, позволяют на микроскопическом уровне проследить вклад отдельных процессов и более точно определить значения их электрофизических параметров.

В заключение следует отметить, что аномальная зависимость центроида от времени и число носителей, проходящих диэлектрик без захвата, могут существенно измениться при отсутствии разогрева электронов. Снижение энергии электронов может быть обусловлено существованием

в нитриде кремния (в отличие от SiO₂) дополнительного механизма рассеяния. Имеющиеся в настоящее время литературные данные не позволяют сделать однозначный вывод о существовании такого механизма.

Авторы выражают благодарность за полезное обсуждение результатов работы Г. В. Гадияку и С. П. Синеца.

ЛИТЕРАТУРА

1. Чжан. Полупроводниковые ЗУ с сохранением информации при отключении питания // ТИИЭР.— 1976.— Т. 64, № 7.
2. Arnett P. C. Transient conduction in insulators at high fields // J. Appl. Phys.— 1975.— V. 46, N 12.— P. 5236.
3. Мальцев А. И., Масловский В. М., Нагин А. П. и др. Пространственное распределение заряда в диэлектрике МНОП-структуры // Микроэлектроника.— 1976.— Т. 5, № 3.
4. Lundström I., Svensson C. Properties of MNOS-structures // IEEE Trans. Electron. Devic.— 1972.— V. ED-19, N 6.— P. 826.
5. Крылов В. М., Суриц Р. А. Туннелирование электронов сквозь слои со статистически шероховатыми поверхностями // ЖЭТФ.— 1985.— Т. 88, № 6.
6. Jacoboni C., Reggiani L. The Monte-Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials // Rev. Mod. Phys.— 1983.— V. 55, N 3.— P. 645.
7. Fitting H.-J., Friemann J.-U. Monte-Carlo studies of the electron mobility in SiO₂ // Phys. Stat. Sol. (a).— 1982.— V. 69, N 1.— P. 349.
8. Fischetti M. V., DiMaria D. J., Brorson S. D. e. a. Theory of high-field electron transport in silicon dioxide // Phys. Rev. B.— 1985.— V. 31, N 12.— P. 8124.
9. Porod W., Ferry D. K. Monte-Carlo study of high electric field quantum transport in SiO₂ // Physica.— 1985.— V. 134B, N 1.— P. 137.
10. Fröhlich H. Electrons in lattice fields // Adv. Phys.— 1954.— V. 3, N 11.— P. 325.
11. Sparks M., Mills D. L., Warren R. e. a. Theory of electron-avalanche break-down in solids // Phys. Rev. B.— 1981.— V. 24, N 6.— P. 3519.
12. Гадияк Г. В., Травков И. В. Моделирование проводимости диэлектриков в сильных электрических полях // Статистическая механика. Численные методы в кинетической теории газов.— Новосибирск, 1986.
13. Гриценко В. А., Кольдяев В. И., Синеца С. П., Финк В. Д. Монополярная инжекция электронов в МНОП-структурах: эксперимент и математическое моделирование.— Новосибирск, 1984.— (Препринт/АН СССР, Сиб. отд-ние, ИФП; 4).
14. Гадияк Г. В., Травков И. В. Инжекция и перенос заряда в МНОП-структурах // Автометрия.— 1986.— № 5.

Поступила в редакцию 10 февраля 1987 г.

УДК 621.315.592

Ю. А. БЕРЕЗИН, М. П. ФЕДОРУК, В. Н. ХУДИК

(Новосибирск)

БАЛЛИСТИЧЕСКИЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ ДИОДЕ

По мере миниатюризации электронных приборов математические модели полупроводников, основанные на дрейфово-диффузионном [1] или трехмоментном приближении [2], становятся неприменимыми. Наиболее адекватным подходом является в таких случаях кинетический, основанный на использовании уравнений Больцмана для электронов и дырок (в общем случае) с учетом их движения в самосогласованном электрическом поле и процессов рассеяния [3—5]:

$$\frac{\partial f_{n,p}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{n,p}}{\partial \mathbf{r}} \mp \frac{e\mathbf{E}}{m_{n,p}^*} \frac{\partial f_{n,p}}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f_{n,p}}{\partial t} \right)_{\text{ст}};$$

$$\operatorname{div} \varepsilon \nabla \varphi = -4\pi e \left(\int f_p(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} - \int f_n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} + n^+ - n^- \right).$$