

Раздел III. Электроника, радиоэлектроника, нанотехнологии

УДК 681.586.72:543.27.08

С.А. Богданов, А.Г. Захаров, А.А. Лытук

ДИФфуЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ДЕГРАДАЦИИ КОНТАКТОВ МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК С БАРЬЕРОМ ШОТТКИ

Предложена диффузионная модель процесса деградации электрофизических свойств контактов металл-полупроводник с барьером Шоттки, обусловленного перераспределением электрически активных примесей вследствие диффузии во внутренних электрических полях. Модель учитывает наличие в полупроводнике дефектов, обусловленных электрически активными примесями и несовершенством кристаллического строения, их пространственное распределение, а также топологию и структуру диода. Предложенная диффузионная модель процесса деградации электрофизических свойств контактов металл-полупроводник с барьером Шоттки позволяет оценить время наработки на отказ при постепенном отказе диодов Шоттки и может быть использована в системах автоматизированного проектирования элементов интегральных микросхем.

Диод Шоттки; диффузия; потенциал; деградация; уравнение Пуассона; отказ.

S.A. Bogdanov, A.G. Zakharov, A.A. Lytyuk

DIFFUSION MODEL OF DEGRADATION OF METAL-SEMICONDUCTOR CONTACTS WITH SCHOTTKY BARRIERS

The diffusion model of degradation of metal-semiconductor contacts with a Schottky barrier due to rearrangement of electrically active impurities via diffusion in internal electric fields is proposed in the paper. The model accounts semiconductor defects induced by electrically active impurities and imperfections of crystal lattice, and diode topology and structure. The model allows to estimate nonfailure operating time of Schottky diodes and can be exploited in CAD systems for IC design.

Schottky diode; diffusion; potential; degradation; Poisson equation; failure.

В контактах металл-полупроводник с барьером Шоттки наряду с электрическими полями, обусловленными наличием градиентов концентраций ионизированных примесей, существуют электрические поля, обусловленные контактной разностью потенциалов между материалами структуры. Напряженность этих электрических полей достигает значений 10^5 – 10^7 В/м, поэтому уже при комнатной температуре электродиффузия может привести к существенному перераспределению примесных ионов [1, 2]. Таким образом, с течением времени интегральные электрофизические характеристики и параметры контактов металл-полупроводник с барьером Шоттки претерпевают необратимые изменения, т.е. деградируют.

Важнейшие эксплуатационные параметры и характеристики диодов Шоттки – напряжение пробоя $U_{пр}$, высота барьера Шоттки φ_M , контактная разность потенциалов φ_S , емкость C_D и последовательное сопротивление R_D диода, частота отсечки f , интенсивность отказов и др. – во многом определяются свойствами

металла и поверхности раздела металл-полупроводник, наличием в полупроводнике дефектов, обусловленных электрически активными примесями и несовершенством кристаллического строения, их пространственным распределением, а также топологией и структурой диода. Кроме того, существенное влияние на механизмы токопрохождения в областях пространственных зарядов (ОПЗ) диодов Шоттки, а, следовательно, и их вольт-амперные характеристики (ВАХ), оказывает распределение потенциала в полупроводниковом материале контакта металл-полупроводник.

В работе предложена диффузионная модель процесса деградации электрофизических свойств контактов металл-полупроводник с барьером Шоттки, обусловленного перераспределением электрически активных примесей вследствие диффузии во внутренних электрических полях. Модель основана на совместном решении m уравнений диффузии в электрическом поле для диффундирующих примесей и уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_m}{\partial t} = D_m \left[\frac{\partial^2 N_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_m}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 N_m}{\partial z^2} + \frac{q_m}{kT} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(N_m \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(N_m \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(N_m \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \right) \right], \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho. \end{cases} \quad (1)$$

В приведенной системе уравнений (1): N_m – пространственное распределение электрически активных атомов m -й диффундирующей примеси; D_m – коэффициент диффузии атомов m -й диффундирующей примеси; q_m – заряд атома m -той ионизированной примеси; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; φ – распределение потенциала в полупроводниковой области контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки; ε – диэлектрическая проницаемость полупроводника; ε_0 – электрическая постоянная; ρ – плотность электрического заряда.

Поскольку протекание диффузионных явлений существенно зависит от времени, то и деградационные процессы следует характеризовать временным показателем, в течение которого сохраняется работоспособность элемента твердотельной электроники.

Под надежностью функционирования диода Шоттки будем понимать его способность безотказно выполнять заданные функции в течение требуемого промежутка времени с учетом влияния возмущающих воздействий, например температуры или внешнего электрического поля. Кроме того, будем полагать, что диод Шоттки работоспособен, если его функциональные параметры лежат в некоторых диапазонах, ограниченных допусками. При выходе параметров за эти допуски диод Шоттки начинает работать неудовлетворительно, и это квалифицируется как отказ [3].

Таким образом, устанавливая допуски δ_l и отслеживая с течением времени t изменения l параметров и характеристик диодов Шоттки, обусловленные теми или иными деградационными процессами, будем полагать, что при выходе одного из отслеживаемых параметров за пределы допуска в момент времени t_H наступает постепенный отказ диодов Шоттки. Представленный анализ позволяет определить время безотказной работы диода Шоттки $t \approx t_H$, где t_H – время наработки на отказ.

Рассмотрим контакт металл-кремний n-типа проводимости. Предположим, что на границах раздела полупроводник-среда отсутствуют зарядовые состояния, будем также полагать, что между металлическим электродом и полупроводником отсутствует диэлектрическая прослойка, а свойства полупроводника изотропны. Кроме того, в первом приближении не будем рассматривать изменение высоты потенциального барьера для электронов, движущихся из металла в полупроводник, обусловленное электрическими силами изображения. Учтем неоднородное пространственное распределение электрически активных примесей в полупроводнике, а также краевые эффекты, под которыми будем понимать эффекты, обусловленные конечными размерами металлического электрода и полупроводникового материала с учетом свойств границ раздела полупроводник-среда [1].

Распределение потенциала в полупроводниковой области контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки будем находить, решая трехмерные уравнения диффузии в электрическом поле и Пуассона (1) с учетом следующих начальных и граничных условий для уравнений диффузии

$$N_m(t=0)|_{\forall(x,y,z)\in M} = N_{m0} \text{ и } \frac{\partial N_m}{\partial x} = 0, \frac{\partial N_m}{\partial y} = 0, \frac{\partial N_m}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

для соответствующих граней полупроводника, и для уравнения Пуассона

$$\frac{E_{\perp cp}}{E_{\perp n}} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{cp}}, \quad \varphi|_{\forall(x,y,z)\in G} = \varphi_S. \quad (3)$$

В выражениях (2), (3): M – область точек, принадлежащих полупроводнику; N_{m0} – распределения примесей в момент формирования структуры металл-полупроводник; $E_{\perp cp}$ – нормальная составляющая напряженности электростатического поля в окружающей полупроводник среде к границе раздела полупроводник-среда; $E_{\perp n}$ – нормальная составляющая напряженности электростатического поля в полупроводнике к границе раздела полупроводник-среда; ε_{cp} – диэлектрическая проницаемость среды, окружающей полупроводник; G – область точек, принадлежащих границе раздела металл-полупроводник; φ_S – поверхностный потенциал, равный разности термодинамических работ выхода электрона из металла и полупроводника.

В рассматриваемом случае выражение для определения плотности электрического заряда будет иметь вид:

$$\rho = e \left(p - n + \sum_0^i N_{id}^+ - \sum_0^j N_{ja}^- \right), \quad (4)$$

где e – элементарный заряд; p , n – концентрации свободных дырок и электронов соответственно; i , j – количество донорных и акцепторных примесей соответственно, в том числе и создающих глубокие энергетические уровни (ГУ) в запрещенной зоне полупроводника; N_{id}^+ , N_{ja}^- – концентрации ионизированных атомов i донорной и j акцепторной примесей соответственно.

Концентрации свободных носителей зарядов в невырожденном полупроводнике можно определить, используя известную методику [4].

Степень ионизации донорной и акцепторной примесей зависит от энергетического положения E , обусловленного примесью энергетического уровня в запрещенной зоне полупроводника, относительно разрешенных зон. Поэтому для

определения концентрации ионизированных атомов примеси N_m^\pm необходимо учитывать вероятность заполнения носителями заряда соответствующего энергетического уровня $f(E, \varphi)$:

$$N_m^\pm = N_m f(E, \varphi). \quad (5)$$

Наиболее часто используются следующие функции, характеризующие вероятность заполнения электронами энергетического уровня с энергией E относительно дна зоны проводимости [5]. Для мелких уровней

$$f(E, \varphi) = \frac{1}{1 + g \exp\left(\frac{-E - E_F - \varphi}{kT}\right)}, \quad (6)$$

где E_F – энергетическое положение уровня Ферми, относительно дна зоны проводимости в электрически нейтральной области полупроводника, g – фактор вырождения уровня, который зависит от структуры зон кристалла и определяется экспериментально. Вероятность отсутствия электронов на уровне соответственно будет равна $(1 - f(E, \varphi))$.

Для ГУ, в случае малой инжекции, более предпочтительно использовать функцию вероятности заполнения ГУ с энергетическим положением $E = E_t$, исходя из модели рекомбинации Шокли-Рида-Холла [6].

Вероятность заполнения электронами акцепторного ГУ:

$$f(E_t, \varphi) = \frac{\gamma_n n + \gamma_p p_1}{\gamma_n (n + n_1) + \gamma_p (p + p_1)}; \quad (7)$$

вероятность отсутствия электронов на донорном ГУ:

$$f(E_t, \varphi) = \frac{\gamma_p p + \gamma_n n_1}{\gamma_n (n + n_1) + \gamma_p (p + p_1)}. \quad (8)$$

В выражениях (7, 8): $\gamma_n = \sigma_n V_n$, $\gamma_p = \sigma_p V_p$ – скорости термического захвата электронов и дырок ГУ, определяемые через сечения захвата носителей заряда σ_n , σ_p и их средние значения тепловых скоростей движения V_n , V_p ;

$n_1 = N_C \exp\left(\frac{E_t - E_C}{kT}\right)$ – концентрация электронов в зоне проводимости при

$E_F = E_t$; $p_1 = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_t}{kT}\right)$ – концентрация дырок в валентной зоне при

$E_F = E_t$; N_C и N_V – плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно, E_C и E_V – энергетические положения дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, соответственно.

В объеме полупроводника выполняется условие электронейтральности $\rho = 0$, следовательно,

$$n - p = \sum_0^i N_{id}^+ - \sum_0^j N_{ja}^-. \quad (9)$$

Уравнение (9) является основным соотношением, позволяющим определить положение уровня Ферми в электрически нейтральной области полупроводника, а, следовательно, концентрации ионизированных примесей, а также свободных носителей заряда.

При определении распределения потенциала в полупроводниковой области контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки в широком диапазоне температур необходимо учитывать температурные зависимости коэффициента диффузии $D(T)$ и ширины запрещенной зоны полупроводника $E_g(T)$. Для кремния изменение ширины запрещенной зоны от температуры можно оценить следующей эмпирической зависимостью [4]:

$$E_g(T) - E_g(0) = -\frac{\alpha T^2}{T + \beta}, \quad (10)$$

где $E_g(0) = 1,17 \text{ эВ}$ – ширина запрещенной зоны при 0 К; $\alpha = 4,73 \cdot 10^{-4} \text{ эВ} \cdot \text{К}^{-1}$, $\beta = 636 \text{ К}$ – постоянные коэффициенты.

При использовании диодов Шоттки в СВЧ-схемах важно отслеживать выход за пределы установленного допуска частоты отсечки, оценить которую можно из выражения [4]

$$f = \frac{1}{2\pi RC}. \quad (11)$$

Здесь $R = R_C + R_n + R_o$ – последовательное сопротивление, в котором R_C – сопротивление омических контактов к подложке с учетом величин сопротивлений растекания, R_n – сопротивление квазинейтральной области полупроводника, R_o – дифференциальное сопротивление контакта металл-полупроводник; $C \equiv \frac{\partial Q}{\partial \varphi_s}$ –

дифференциальная емкость области пространственного заряда полупроводника, $Q = \iiint_V \rho dx dy dz$ – пространственный заряд в объеме V полупроводника.

Таким образом, соотношения (1–10) позволяют оценить время наработки на отказ при постепенном отказе диодов Шоттки, учитывая наличие в полупроводнике дефектов, обусловленных электрически активными примесями и несовершенством кристаллического строения, их пространственное распределение, а также топологию и структуру диода.

Предложенная диффузионная модель процесса деградации электрофизических свойств контактов металл-полупроводник с барьером Шоттки может быть использована в системах автоматизированного проектирования элементов интегральных микросхем.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Стриха В.И., Бузанева Е.В.* Физические основы надежности контактов металл-полупроводник в интегральной электронике. – М.: Радио и связь, 1987. – 256 с.
2. *Абдуллаев Г.Б., Джафаров Т.Д.* Атомная диффузия в полупроводниковых структурах. – М.: Атомиздат, 1980. – 280 с.
3. *Янишин А.А.* Теоретические основы конструирования, технологии и надежности ЭВА. – М.: Радио и связь, 1983. – 312 с.
4. *Зи С.М.* Физика полупроводниковых приборов. – М.: Энергия, 1973. – 656 с.
5. *Блекмор Дж.* Статистика электронов в полупроводниках. – М.: Мир, 1964. – 392 с.
6. *Милнс А.* Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. – М.: Мир, 1977. – 562 с.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н. А.И. Жорник.

Богданов Сергей Александрович – Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге; e-mail: bogdanov_sa@mail.ru; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 88634371663; кафедра физики; к.т.н.; доцент.

Захаров Анатолий Григорьевич – e-mail: zakharov@egf.tsure.ru; кафедра физики; д.т.н.; профессор.

Лытюк Александр Анатольевич – e-mail: realspolock@gmail.com; кафедра физики; аспирант.

Bogdanov Sergey Aleksandrovich – Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”; e-mail: bogdanov_sa@mail.ru; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia; phone: +78634371663; the department of physics; cand. of eng. sc.; associate professor.

Zakharov Anatoliy Grigorievich – e-mail: zakharov@egf.tsure.ru; the department of physics; dr. of eng. sc.; professor.

Lytyuk Alexander Anatolievich – e-mail: realspolock@gmail.com; the department of physics; postgraduate student.

УДК 539.217.5:546.28

В.В. Петров, Н.К. Плуготаренко, А.А. Вороной

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОК
НАНОРАЗМЕРНОГО МАТЕРИАЛА SiO_2SnO_x , ПОЛУЧЕННОГО
ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ***

Изучены особенности формирования золь-гель методом тонких пленок газочувствительного материала состава SiO_2SnO_x . Установлено, что для пленок, полученных из золей с температурой его формирования 30°C , при увеличении в золе соотношения $\text{TEOS}/\text{SnCl}_4$ количество выступов уменьшается, и образуются поры, количество которых возрастает. Показано, что поверхности пленок, сформированных из золей, которые были приготовлены, созрели и хранились при 10°C , показали отсутствие пор на поверхности вне зависимости от температуры отжига. Определено, что для пленок, полученных по такой технологии, с увеличением температуры отжига при неизменном соотношении $\text{TEOS}/\text{SnCl}_4$, высота выступов увеличивается. Все образцы имеют поверхность с равномерно распределенными выступами.

Золь-гель метод; газочувствительный материал; морфология поверхности пленки.

V.V. Petrov, N.K. Plugotarenko, A.A. Voronoy

**RESEARCH OF MORPHOLOGY OF SURFACE OF FILMS NANO-SIZED
MATERIAL SiO_2SnO_x , RECEIVED ZOL-GEL METHOD**

Features formation zol-gel by method of thin films gas sensing structure SiO_2SnO_x material have been studied. It is established that for films obtained from the sols with the temperature of its formation 30°C , with an increase in the ash ratio of $\text{TEOS}/\text{SnCl}_4$ number of peaks decreases, and the pores are formed, the number of which is growing. It is shown that the surface of the films obtained from the sols formed, which were prepared, matured and kept at 10°C showed the ab-

* Данная работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.», государственный контракт № 02.740.11.0122).