

T 3-40

UNIVERSIDAD DE GRANADA  
FACULTAD DE CIENCIAS



Departamento de Electrónica  
y Tecnología de Computadores

UNIVERSIDAD DE GRANADA  
Facultad de Ciencias  
Fecha 18.11.02  
ENTRADA NUM. 4802

UNIVERSIDAD DE GRANADA  
31 OCT. 2002  
COMISION DE DOCTORADO

**SIMULACIÓN DE TRANSISTORES MOSFET:  
CORRIENTE TÚNEL DE PUERTA, DISPERSIÓN  
CULOMBIANA Y AUTOCALENTAMIENTO**

Tesis Doctoral presentada por:

Francisco Jiménez Molinos

para optar al grado de doctor en Ingeniería Electrónica

Granada, 31 de octubre de 2002

*F. Jiménez*

BIBLIOTECA UNIVERSITARIA  
GRANADA  
N.º Documento 613443501  
N.º Copia 15403002

Fdo. Francisco Jiménez Molinos



Departamento de Electrónica  
y Tecnología de Computadores

**D. Francisco Gámiz Pérez** y **D. Alberto Palma López**, Profesores Titulares del Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada.

CERTIFICAN:

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente Memoria, titulada *Simulación de transistores MOSFET: corriente túnel de puerta, dispersión coulombiana y autocalentamiento*, presentada por **D. Francisco Jiménez Molinos** para optar al grado de Doctor en Ingeniería Electrónica, ha sido realizado en su totalidad bajo su dirección en el Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada.

Granada, 31 de octubre, 2002

Fdo. D. Alberto Palma López y D. Francisco Gámiz Pérez  
Profesores del Departamento de Electrónica  
Universidad de Granada

## **Agradecimientos**

Quiero manifestar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que de una u otra forma han colaborado en la realización de este trabajo.

A D. Francisco Gámiz Pérez y a D. Alberto Palma López, mis directores, por su ayuda y dedicación, por estar siempre dispuestos a brindarme su colaboración y por todo lo que me han enseñado.

A D. Juan E. Carceller Beltrán y a D. Pedro Cartujo Estébanez, Catedráticos del Departamento, por su interés y por haber puesto a mi disposición todos los medios necesarios para la realización del trabajo.

A D. Juan A. López Villanueva, de cuya mano me inicié en la investigación de la corriente túnel, por sus acertados comentarios y por las discusiones mantenidas.

Al resto de componentes del Grupo de Investigación en Dispositivos Electrónicos (GRIDE) del Departamento de Electrónica de la Universidad de Granada: D. Luis J. Asensio Morcillo, D. Jesús Banqueri Ozáez, D. Pedro Cartujo Cassinello, D. Andrés Godoy Medina, D. Francisco M. Gómez Campos, D. Juan Antonio Jiménez Tejada, D. Ignacio Melchor Ferrer, D. Salvador Rodríguez Bolívar y D. Juan B. Roldán Aranda. Resulta imposible enumerar toda la ayuda prestada, tanto desde el punto de vista científico como personal. A todos los miembros del Departamento de Electrónica de Computadores de la Universidad de Granada.

A Hans Kosina y a Andreas Gehring, del Instituto de Microelectrónica de la Universidad Técnica de Viena, por su amable acogida y por ayudarme a incorporar el modelo de corriente túnel asistida por trampas en el simulador MINIMOS-NT.

A mis padres y hermanos, por darme siempre su apoyo y por sus buenos consejos. Sin ellos, probablemente este trabajo no hubiera sido posible.

A Milagros, por el tiempo que le he robado, por su pragmatismo y por todo el ánimo que me ha dado para terminar este trabajo.

# Índice general

Prólogo	v
<b>1. Preliminares</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Ecuaciones de Schrödinger y Poisson en semiconductores . . . . .	2
1.3. Energía imagen y energía de correlación-intercambio . . . . .	6
1.3.1. Energía imagen . . . . .	6
1.3.2. Energía de correlación-intercambio . . . . .	10
1.3.3. Influencia de las energías imagen y de correlación-intercambio	13
<b>2. Corriente mediante túnel directo a través del óxido de puerta</b>	<b>17</b>
2.1. Introducción . . . . .	17
2.2. Modelos para el cálculo de la corriente túnel . . . . .	19
2.2.1. Métodos basados en la matriz de transferencia . . . . .	23
2.2.2. Métodos basados en la transparencia . . . . .	24
2.2.3. Método de Bardeen . . . . .	26
2.2.4. Comparación de los tres métodos . . . . .	29
2.3. Parámetros y efectos . . . . .	30
2.3.1. Masa efectiva en el dióxido de silicio . . . . .	31
2.3.2. Conservación del momento paralelo y altura de la barrera . . .	32
2.3.3. Energía imagen . . . . .	35
2.3.4. Nivel de Fermi . . . . .	36
2.4. Túnel directo a través del óxido de puerta . . . . .	38

---

2.4.1. Introducción . . . . .	38
2.4.2. Modelo teórico . . . . .	38
2.4.3. Simulaciones y resultados . . . . .	47
2.4.4. Comparación con resultados experimentales . . . . .	53
2.5. Resumen y conclusiones . . . . .	58
<b>3. Corriente túnel asistida por trampas</b>	<b>60</b>
3.1. Introducción . . . . .	60
3.2. Cálculo de la densidad de corriente por túnel asistido por trampas . .	63
3.3. Transiciones elásticas asistidas por trampas . . . . .	67
3.3.1. Introducción . . . . .	67
3.3.2. Constantes de tiempo de captura y emisión . . . . .	68
3.3.3. Resultados y simulaciones . . . . .	74
3.4. Transiciones inelásticas asistidas por trampas . . . . .	85
3.4.1. Introducción . . . . .	85
3.4.2. Revisión histórica de la corriente SILC . . . . .	87
3.4.3. Constantes de tiempo de captura y emisión . . . . .	91
3.4.4. Distribución espacial y carga de las trampas . . . . .	101
3.4.5. Comparación con resultados experimentales . . . . .	103
3.4.6. Simulaciones y resultados . . . . .	108
3.5. Modelo analítico y aplicaciones . . . . .	126
3.5.1. Introducción . . . . .	126
3.5.2. Cálculo analítico de las probabilidades de transición . . . . .	128
3.5.3. Verificación del modelo analítico . . . . .	132
3.5.4. Corriente transitoria . . . . .	136
3.5.5. Simulaciones y resultados . . . . .	140
3.6. Resumen y conclusiones . . . . .	144
<b>4. Dispersión coulombiana en estructuras SOI</b>	<b>147</b>
4.1. Introducción . . . . .	147
4.2. Modelo teórico para la dispersión coulombiana . . . . .	155

---

## Índice general

---

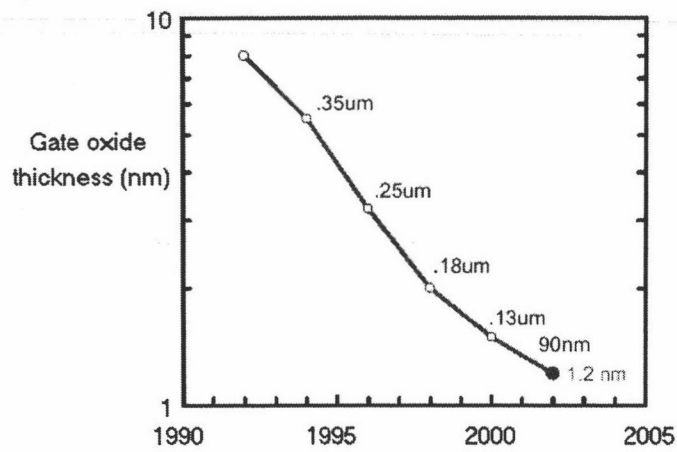
4.2.1. Revisión del modelo teórico previo . . . . .	155
4.2.2. Funciones de Green . . . . .	164
4.3. Resultados . . . . .	167
4.3.1. Comparación con el modelo previo . . . . .	167
4.3.2. Funciones de Green . . . . .	170
4.3.3. Curvas de movilidad . . . . .	176
4.3.4. Apantallamiento . . . . .	184
4.3.5. Efecto de la temperatura . . . . .	190
4.4. Conclusiones . . . . .	197
<b>5. Autocalentamiento</b>	<b>200</b>
5.1. Introducción . . . . .	200
5.2. Modelado del autocalentamiento . . . . .	202
<b>6. Resumen y conclusiones</b>	<b>208</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>214</b>

# Prólogo

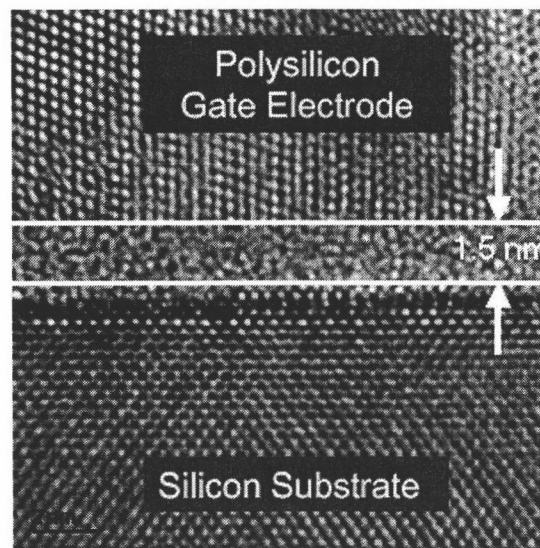
La industria de semiconductores se enfrenta con nuevos problemas cada vez que pretende dar un nuevo paso para miniaturizar un dispositivo y hacerlo más rápido. Algunos de estos problemas impiden seguir escalando los dispositivos y provocan que se tengan que usar nuevos materiales o estructuras. Otros afectan al funcionamiento del dispositivo sin impedir que continúe su uso (al menos mientras se alcanza cierto tamaño), pero requieren un adecuado estudio y modelado.

En el presente trabajo hemos estudiado tres de estos efectos: la corriente túnel a través de óxidos de puerta, que limita el escalado del óxido de puerta en transistores MOSFETs (metal-óxido-conductor de efecto campo), la dispersión coulombiana y el autocalentamiento, que afectan al transporte en MOSFETs de tecnología SOI (silicio sobre aislante) con capas de silicio muy delgadas.

Las reglas de escalado de los transistores MOSFETs requieren la disminución del espesor del óxido de silicio (empleado como aislante de puerta) para minimizar los efectos de canal corto [TBC<sup>+</sup>97]. En la figura 1 se muestra la evolución de este parámetro en los últimos años, mientras que la figura 1 muestra un dispositivo con un óxido de puerta de tan solo 1.5 nm de espesor. Conseguir óxidos tan delgados (con apenas unas cuantas capas atómicas) no supone ningún problema tecnológico y ya han sido fabricados microprocesadores (Pentium 4) con transistores con óxidos de puerta de 1.5 nm [T<sup>+</sup>01]. Sin embargo, el factor limitante lo constituye la corriente que puede atravesar el óxido por efecto túnel. En la figura 3 se representa, para una misma polarización, la corriente de puerta en función del espesor de puerta. Como puede comprobarse, la corriente crece exponencialmente conforme el óxido se hace más delgado.



**Figura 1:** Evolución del espesor del óxido de puerta, según los diferentes hitos pasados por la tecnología CMOS [Boh02].



**Figura 2:** Sección de una estructura MOS con un óxido de 1.5 nm de espesor [Boh02].



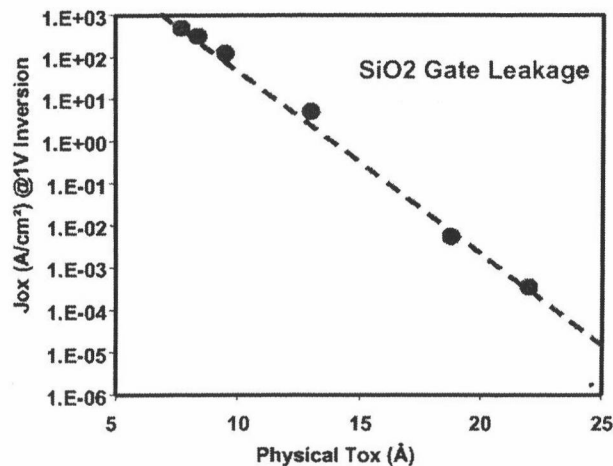


Figura 3: Corriente de puerta en función del espesor del óxido de puerta [MC02].

Esta corriente de puerta se debe a las transiciones que efectúan los portadores de un lado a otro del aislante de puerta mediante efecto túnel directo. No obstante, también se ha comprobado que bajo ciertas condiciones, la corriente de pérdidas no está causada únicamente por transiciones mediante túnel directo, sino que hay una contribución adicional debida a las trampas presentes en el óxido, que favorecen el paso de los electrones de un lado a otro de la barrera [GSSK99].

Por otro lado, tras ciclos repetidos de escritura y borrado de memorias de sólo lectura eléctricamente programables (EEPROM y FLASH), basadas en esta estructura, se ha observado una disminución de los tiempos de retención [ASH<sup>+</sup>93]. Este fenómeno se debe a la generación de trampas en el interior del óxido, causada por la corriente en régimen de Fowler-Nordheim que atraviesa el aislante de puerta durante los procesos de escritura y borrado. Estas trampas favorecen transiciones inelásticas de electrones de un lado a otro de la barrera, provocando la corriente de pérdida causante del empeoramiento del tiempo de retención.

Por todo lo anterior, resulta claro que el diseño actual de dispositivos electrónicos basados en MOSFETs requiere tener en cuenta los diversos fenómenos que involucran transiciones túnel a través del aislante de puerta, así como modelos para su estudio y simulación mediante ordenador. En el presente trabajo se han desarrollado modelos para estudiar los diferentes tipos de corriente túnel a través del óxido de puerta en

dispositivos MOSFETs.

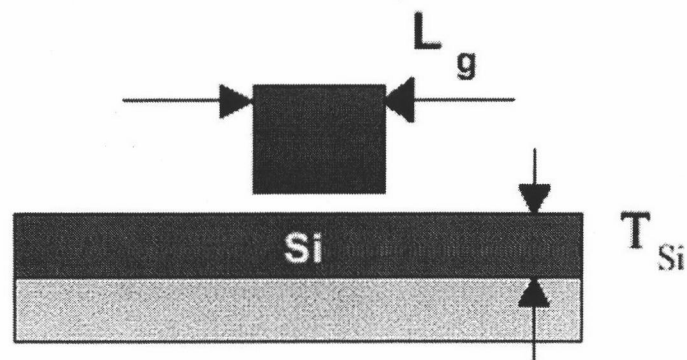
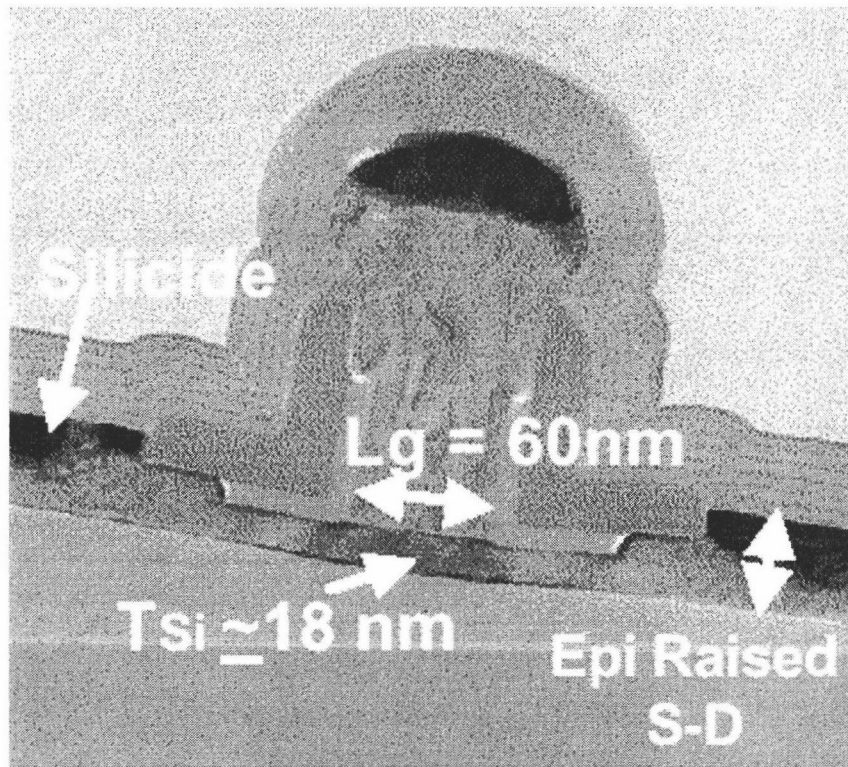
Por otro lado, la tecnología SOI (*silicon on insulator* o aislante sobre silicio), actualmente empleada en aplicaciones en entornos con radiaciones, se presenta como una de las más importantes alternativas para seguir miniaturizando los transistores MOSFETs. En estos transistores, la capa de silicio en la que se forma el canal de inversión está situada entre dos óxidos, el óxido de puerta y otro inferior, normalmente más grueso (salvo que se trate de transistores de doble puerta). En la figura 4 se muestra un MOSFET SOI con una capa de silicio de 18 nm.

Al igual que sucede con los MOSFETs tradicionales (o *bulk*), las dimensiones de los transistores en tecnología SOI están disminuyendo continuamente. Además, algunas de sus ventajas se basan precisamente en contar con una capa de silicio muy delgada (del orden de unos pocos nanómetros). Como sucede siempre en la industria de semiconductores, cada nuevo paso tecnológico implica la aparición de nuevos efectos, que requieren un adecuado estudio y modelización. Por ejemplo, la disminución de la capa de silicio conlleva la mayor cercanía de la interfaz silicio-óxido inferior. Esto modifica las propiedades del transporte de la carga en inversión y se deben desarrollar nuevos modelos para su estudio. En concreto, en este trabajo se presenta un nuevo modelo para el estudio de la dispersión coulombiana, que tiene en cuenta el efecto de la interfaz inferior.

Por otro lado, la presencia del óxido enterrado dificulta la disipación del calor generado por la corriente que atraviesa el dispositivo. Como consecuencia, aumenta la temperatura de la red y se modifica la movilidad de los portadores. Por tanto, este efecto debe tenerse también en cuenta a la hora de estudiar el transporte electrónico en dispositivos SOI.

La presente memoria comienza con un breve capítulo, en el que se repasa la ecuación de Schrödinger que nos proporciona la función de onda electrónica en canales de inversión. Se comenta también el efecto de la energía imagen y de correlación-intercambio sobre las soluciones de esta ecuación. Este capítulo sirve para introducir algunos de los conceptos y expresiones que posteriormente se usarán.

El capítulo 2 está dedicado al estudio de la corriente por túnel directo. Comienza



**Figura 4:** MOSFETs de tecnología SOI con una puerta de longitud igual a 60 nm y un espesor de puerta de 18 nm [C<sup>+</sup>02]. Abajo se muestra un esquema simplificado de la estructura.

con una revisión de algunos de los métodos empleados para su estudio y de los problemas que se plantean al modelar el fenómeno. Posteriormente, se presenta el método de Bardeen, que es el que se usa en este trabajo, y se desarrollan las expresiones necesarias para calcular la corriente a través del óxido de puerta. Se termina el capítulo con una comparación de los resultados proporcionados por el modelo con los que se obtienen experimentalmente.

En el siguiente capítulo se abordan las transiciones asistidas por trampas. Está constituido por tres partes principales. La primera presenta un modelo, también basado en el método de Bardeen, para el estudio de las transiciones elásticas a través del óxido de puerta, mientras que la segunda se ocupa de las que tienen lugar inelásticamente (en las que los electrones pierden parte de su energía). Finalmente, la tercera parte presenta un modelo analítico simplificado, obtenido del anterior, para el cálculo de la corriente asistidas por trampas inelásticamente. Este modelo se aplica para el estudio de algunos fenómenos transitorios en el último apartado de este capítulo.

El cuarto capítulo comienza con la presentación de un nuevo modelo para el estudio de la dispersión culombiana en estructuras SOI. Seguidamente, se estudian sus efectos y la dependencia con algunos parámetros, como la constante dieléctrica del aislante de puerta, el espesor de la capa de silicio o la temperatura. Además, se presentan las curvas de movilidad que se obtienen al incluir el modelo en un simulador de MonteCarlo y se comparan los resultados con los de un modelo previo.

El autocalentamiento se estudia en el capítulo quinto, en el cual se analizan los modelos aplicables para su estudio. En primer lugar se revisan los efectos del autocalentamiento y posteriormente se muestran curvas de corriente de drenador para cuyo cálculo se ha considerado este fenómeno.

Finalmente, se presentan las conclusiones del estudio realizado.

# Capítulo 1

## Preliminares

### 1.1. Introducción

En el presente trabajo se ha realizado un estudio de la corriente túnel a través de óxidos de puerta y de la dispersión culombiana en estructuras SOI. El correcto modelado de ambos fenómenos requiere conocer las funciones de onda de los electrones. Éstas han sido obtenidas mediante un simulador unidimensional que permite la resolución numérica y autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger en diversas heteroestructuras. Este programa ha sido previamente desarrollado por miembros del Grupo de Investigación de Dispositivos Electrónicos de la Universidad de Granada. Igualmente, se ha contado además con un simulador de Monte Carlo de una sola partícula para el estudio del transporte en las mismas estructuras.

En este trabajo no nos vamos a centrar en la descripción de estos programas ni en la de sus bases teóricas, puesto que el lector interesado puede encontrar abundante información en otras referencias [LVMCC93], [GP94], [Pal95], [MF97].

No obstante, en el apartado 1.2 hemos realizado una breve revisión de la teoría y de las aproximaciones que conducen a la ecuación de Schrödinger monoeléctronica. El objetivo ha sido introducir algunos conceptos que aparecerán posteriormente (como la energía imagen o los diversos tipos de subbandas), así como parte de la notación luego empleada.

En el último apartado de este capítulo se estudia el origen de las energías imagen y

de correlación-intercambio, así como las ecuaciones que hemos empleado en el presente trabajo para incluirlas en el simulador de Poisson-Schrödinger. Finalmente, se estudia el efecto de estos dos términos sobre la posición de las subbandas de energía y sobre la densidad de electrones en estructuras MOS.

## 1.2. Ecuaciones de Schrödinger y Poisson en semiconductores

La descripción cuántica rigurosa de los electrones en el seno de sólidos es prácticamente inabordable. Por ello, habitualmente se suele recurrir a una serie de aproximaciones que tienen como objetivo llegar a una expresión monoeléctrica de la ecuación de Schrödinger. Estos desarrollos han sido expuestos y discutidos en numerosas referencias y por tanto no serán tratadas de nuevo aquí (consultar, por ejemplo, [JM00] o [Mad78] para más detalles). Se demuestra que la ecuación de onda independiente del tiempo que describe el movimiento individual de un electrón en un estado próximo al fondo de un valle de energía es la siguiente [Mad78]:

$$[E(-i\nabla) + V(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (1.1)$$

En esta ecuación, la incógnita  $\Psi(\vec{r})$  es la función de onda envolvente, es decir, un factor de la función de onda completa, que modula al término periódico de Bloch. Por otro lado,  $V(\vec{r})$  representa la energía potencial promedio que recoge el efecto del campo eléctrico generado en la estructura por la diferencia entre las funciones trabajo del metal y del semiconductor, por las cargas presentes en la estructura, por el campo eléctrico aplicado y por la interacción entre los electrones. La interacción con el resto de los electrones es meramente la repulsión coulombiana bajo la aproximación de Hartree, mientras que tiene además un término atractivo si se tiene en cuenta el carácter fermiónico de los electrones (aproximación de Hartree-Fock).

Como se ve, en la anterior ecuación no se incluye explícitamente ningún término de interacción con el potencial periódico de la red, sino que sus efectos son incluidos a través de la relación de dispersión  $E(-i\nabla)$ .

En general, las aproximaciones realizadas hasta llegar a esta ecuación se recogen bajo el nombre de aproximación de la función de onda envolvente.

Si suponemos una relación de dispersión de tipo parabólico (lo cual puede hacerse siempre en las proximidades de los extremos de una banda), la relación entre la energía y el vector de onda  $\vec{K}$  vendrá dada a través del denominado tensor de masa efectiva inversa  $m^{*-1}$ :

$$E(\vec{K}) = \frac{\hbar^2}{2} \vec{K} m^{*-1} \vec{K} \quad (1.2)$$

De este modo, los electrones en la banda de conducción de un sólido se pueden tratar, con la aproximación de la masa efectiva como libres, pero con una masa diferente de la del electrón libre y que, en general, es dependiente de la dirección espacial (es un tensor).

Si consideramos un sistema de referencia en el que este tensor sea diagonal podremos escribir:

$$E = \sum_i E_i = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i^*} k_i^2 \quad (1.3)$$

con  $i = x, y, z$ .

De este modo tendremos:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{m_i^*} \frac{\partial}{\partial x_i} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1.4)$$

Si suponemos que la estructura MIS o SOI se extiende infinitamente en el plano  $XY$ , la energía potencial  $V(\vec{r})$  depende únicamente de la coordenada  $z$ . En este caso, la curvatura de la banda de conducción a lo largo del eje  $z$  perpendicular a las interfaces viene dada por [SDS84]:

$$V(z) = E_{c0}(z) - e\phi(z) + E_{im}(z) + E_{ex}(z) \quad (1.5)$$

donde  $E_{c0}(z)$  tiene en cuenta la discontinuidad en la banda de conducción y  $\phi(z)$  es el potencial electrostático originado por todas las cargas y que viene dado por la ecuación de Poisson:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\epsilon(z) \frac{\partial \phi}{\partial z}) = -\rho(z), \quad (1.6)$$

siendo  $\rho(z)$  la densidad total de carga.

Finalmente, en la ecuación (1.5),  $E_{ex}(z)$  y  $E_{im}(z)$  son correcciones que representan, respectivamente, la energía imagen y la energía de correlación-intercambio. Más adelante comentaremos brevemente su origen y expondremos la expresiones empleadas para su cálculo.

En estas condiciones, en las que el potencial depende sólo de la coordenada  $z$ , la función de onda del electrón  $\Psi(\vec{r})$  podrá expresarse como el producto de un factor que depende únicamente de  $z$  y una onda plana que representa el movimiento libre del electrón en el plano paralelo a la superficie [MF97]:

$$\Psi(\vec{r}) = \xi(z)e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (1.7)$$

Sustituyendo la función (1.7) en la ecuación de Schrödinger (1.4) se obtiene que la función  $\xi(z)$  debe satisfacer la siguiente ecuación de onda:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z) \right] \xi(z) = E_z \xi(z), \quad (1.8)$$

cumpléndose además que:

$$E = E_z + E_{||}, \quad (1.9)$$

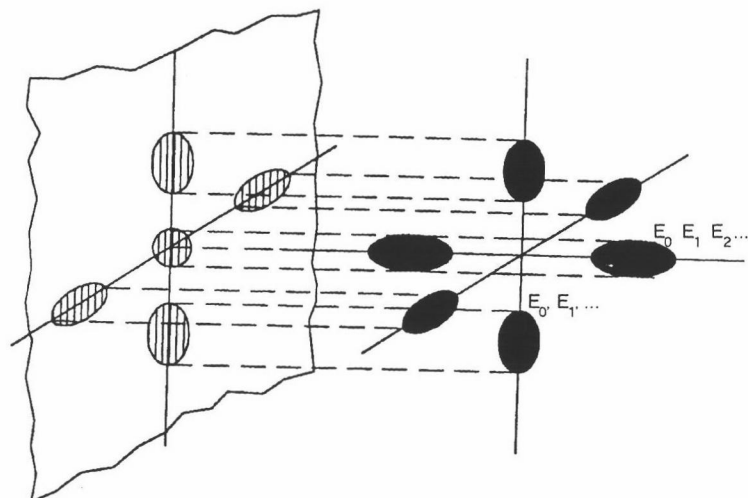
con:

$$E_{||} = \frac{\hbar^2}{2m_x} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} k_y^2. \quad (1.10)$$

En las situaciones que trataremos debe tenerse en cuenta que, en la dirección  $z$  perpendicular a la interfaz semiconductor-aislante, se forma un pozo de potencial que discretiza los valores de la energía en esa dirección, permitiéndose sólo aquellos que son solución de la ecuación de Schrödinger (1.8). Sin embargo, la energía paralela no está cuantizada, por lo que para cada valor de  $E_z$  existen infinitos valores de  $E_{||}$ . Por ello decimos que se forman subbandas, cuyo valor más bajo de energía es el correspondiente a la energía transversal  $E_z$  ( $E_{||} = 0$ ).

Por otro lado, debemos tener en cuenta que en el silicio, la relación  $E(\vec{K})$  tiene seis mínimos equivalentes. Las superficies isoenergéticas cerca de éstos (valles) son





**Figura 1.1:** Elipsoides isoenergéticos de la banda de conducción del silicio. Se muestran los seis valles en la dirección  $\langle 100 \rangle$  del espacio de momentos y su proyección sobre la superficie (100).

elipsoides de revolución, como se muestra en la figura 1.1, en la que la superficie de separación entre el silicio y el dióxido de silicio coincide con el plano cristalino (100). Según la orientación del valle considerado respecto a la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>, tendremos diferente solución para la ecuación (1.8), pues cambia el valor de la masa transversal  $m_z$ . En concreto, en la situación mostrada en la figura 1.1 (que es la que se considerará a lo largo del presente trabajo), en los dos valles perpendiculares a la interfaz  $m_z = 0.98m_0$ , mientras que en los otros cuatro  $m_z = 0.19m_0$ . En lo sucesivo, denominaremos valles transversales o no prima a los primeros y paralelos o prima a los segundos. A la energía de las subbandas correspondientes las llamaremos  $E_0, E_1, E_2, \dots$  y  $E'_0, E'_1, E'_2, \dots$ , respectivamente.

En este apartado sólo hemos pretendido recopilar los resultados conocidos sobre la función de onda electrónica en semiconductores y establecer parte de la notación usada en lo sucesivo. Más detalles sobre todo lo expuesto en este apartado pueden ser consultados en las referencias [GP94], [MF97], [Sha75] y [Mad78]. Además, en [LVMCC93] se generaliza la ecuación de Schrödinger para el caso en el que la relación

de dispersión es no parabólica.

Finalmente, señalaremos que en las estructuras aquí consideradas, la energía  $V(z)$  depende, a través de la ecuación de Poisson, de  $\phi(z)$ , que depende de la distribución de cargas  $\rho(z)$  que, a su vez, depende de las soluciones de la ecuación de Schrödinger. Por tanto, deberán resolverse estas dos ecuaciones conjuntamente mediante un proceso iterativo.

Como ejemplo, en la figura 1.2 se muestran los resultados obtenidos tanto en una estructura metal-aislante-semiconductor (MOS o MIS) como en una estructura de silicio sobre aislante (SOI). No se han incluido los términos de la energía imagen ni de correlación-intercambio.

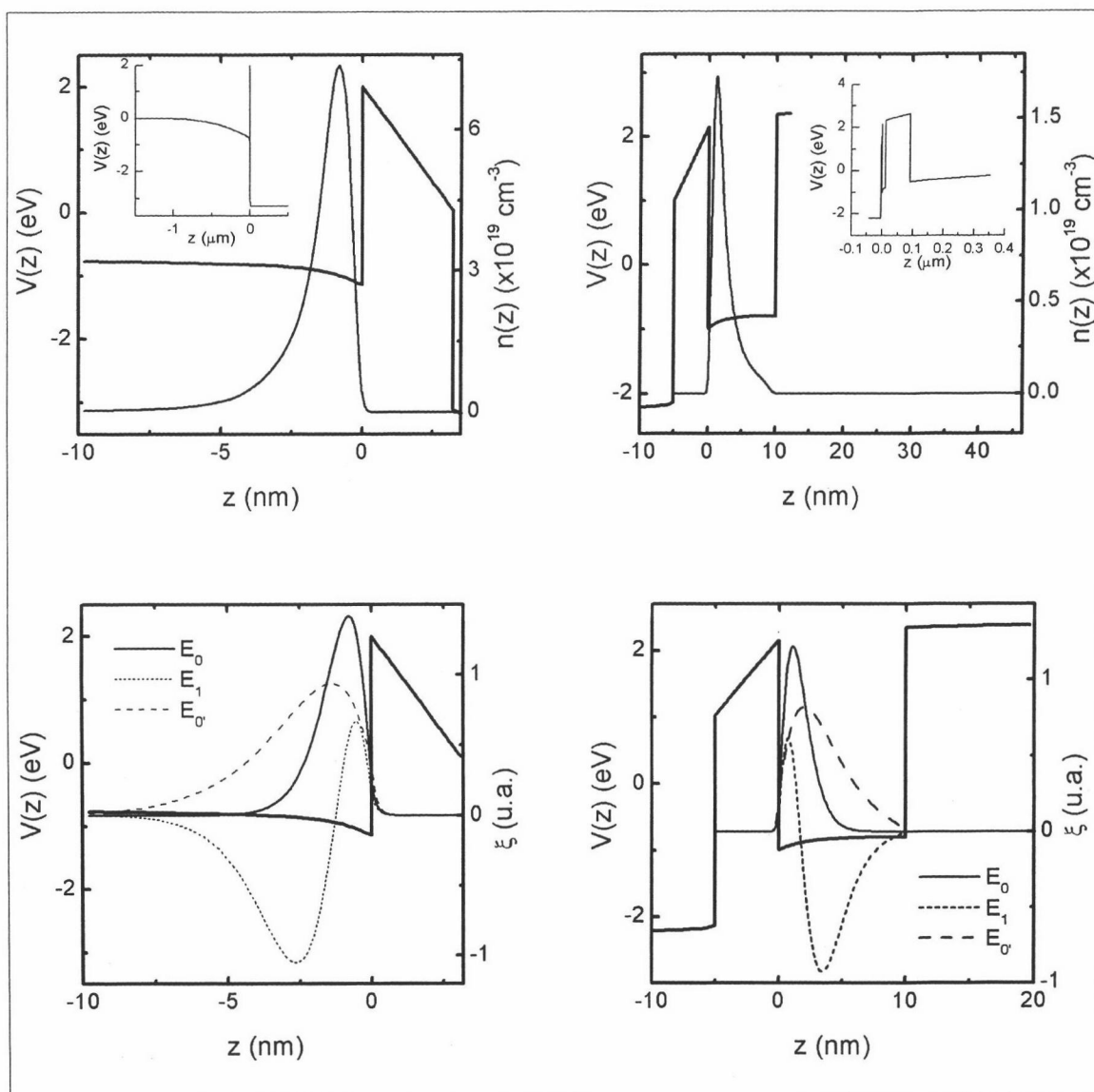
### 1.3. Energía imagen y energía de correlación-intercambio

Como se ha expuesto anteriormente, el pozo de energía potencial en el que están confinados los electrones viene dado por la expresión (1.5). No obstante, habitualmente los términos causados por las cargas imágenes y por la energía de intercambio-correlación no son tenidos en cuenta. En este apartado, detallaremos las expresiones usadas para su cálculo y analizaremos su efecto sobre el pozo de potencial y sobre los niveles de las subbandas.

#### 1.3.1. Energía imagen

En la ecuación de onda monoelectrónica (1.8) el efecto de la repulsión coulombiana entre los electrones está incluido en el potencial  $\phi(z)$  solución de la ecuación de Poisson (1.6). Sin embargo, todavía habría que tener en cuenta el efecto imagen de la carga del propio electrón, debido a la discontinuidad en la constante dieléctrica del silicio y del óxido de silicio.

Supongamos que situamos una carga negativa puntual en el seno de un dieléctrico, pero en la proximidad de un metal, que está unido a éste. En la superficie del metal se generarán cargas positivas inducidas como respuesta a la presencia de la negativa.



**Figura 1.2:** Pozo  $V(z)$ , densidad de electrones  $n(z)$  y funciones de onda en dos estructuras MOS (izquierda) y SOI (derecha) con tensión de puerta  $V_g = 2.5 \text{ V}$ . En el caso SOI el silicio es intrínseco, mientras que el otro es tipo P con  $N_A = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .  $T = 300 \text{ K}$ .

La distribución de estas cargas es, a priori, difícil de determinar. Se suele recurrir entonces al método de las imágenes, por el cual se sustituye la carga inducida por una única carga puntual ficticia (denominada carga imagen), situada en el seno del metal, de forma que el potencial total sobre la superficie sea constante.

Cuando los dos medios son dieléctricos, también se produce efecto imagen si tienen diferente constante dieléctrica. La técnica del método de las imágenes puede generalizarse a este caso sin más que tener en cuenta las condiciones de frontera en la interfaz entre dos dieléctricos [RMC96].

En el sistema aquí considerado (una estructura MIS) existen no dos, sino tres materiales. En la referencia [KH80] se calcula la energía imagen en este caso, resultando en el semiconductor:

$$E_{im}(z) = \frac{-q^2}{16\pi\epsilon_{Si}} \sum_{n=0}^{\infty} (k_1 k_2)^n \left( \frac{-k_1}{|z| + nt_{ox}} + \frac{k_2}{|z| + t_{ox}(n+1)} \right), \quad (1.11)$$

y en el óxido:

$$E_{im}(z) = \frac{-q^2}{16\pi\epsilon_{ox}} \sum_{n=0}^{\infty} (k_1 k_2)^n \left( \frac{k_1}{|z| + nt_{ox}} + \frac{k_2}{(n+1)t_{ox} - |z|} + \frac{2k_1 k_2}{(n+1)t_{ox}} \right), \quad (1.12)$$

donde el origen de coordenadas se ha tomado en la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>,  $t_{ox}$  es el espesor del óxido y  $k_1$  y  $k_2$  son los coeficientes de reflexión:

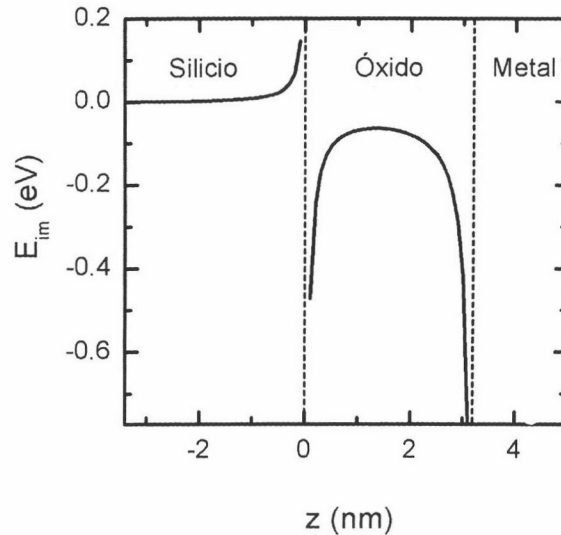
$$k_1 = \frac{\epsilon_{ins} - \epsilon_{Si}}{\epsilon_{ins} + \epsilon_{Si}}, \quad (1.13)$$

$$k_2 = \frac{\epsilon_{ins} - \epsilon_g}{\epsilon_{ins} + \epsilon_g}. \quad (1.14)$$

Las constantes dieléctricas del silicio, del aislante de puerta y del metal de puerta han sido representadas por  $\epsilon_{Si}$ ,  $\epsilon_{ins}$  y  $\epsilon_g$ , respectivamente.

Consideraremos que el material de puerta es un conductor perfecto, con lo cual el coeficiente de reflexión  $k_2$  será igual a -1. En la práctica será suficiente con tener en cuenta los términos  $n = 0$  a  $n = 11$  en (1.11) y (1.12), pudiéndose despreciar el resto de sumandos [KH80].

En la figura 1.3 se muestra la energía imagen en una estructura MOS obtenida mediante las anteriores expresiones. Como puede observarse, su influencia es mayor en las proximidades de las interfaces y contribuye a disminuir la altura de la barrera



**Figura 1.3:** Energía imagen obtenida mediante las expresiones (1.11) y (1.12).

existente entre los dos materiales. Lógicamente, cuanto menor sea el espesor del óxido, mayor será la influencia de las cargas imagen en su interior.

Como tanto el silicio como el metal de puerta tienen mayor constante dieléctrica que el dióxido de silicio, la energía potencial eléctrica de un electrón situado en el óxido disminuye al considerar la energía imagen. No sucede lo mismo con un electrón situado en el silicio, en donde la energía imagen se convierte en un término repulsivo.

Como puede verse en la figura 1.3, las expresiones (1.11) y (1.12) divergen en las interfaces Si-SiO<sub>2</sub> y SiO<sub>2</sub>-metal. Este hecho ha sido analizado en [Ste78]. Lógicamente, la divergencia del término imagen no se observa en la realidad y carece de sentido físico. Su origen está en la discontinuidad en la constante dieléctrica al pasar de un material a otro y, tal y como F. Stern demuestra, se consigue evitar la divergencia considerando una variación continua de la constante dieléctrica  $\epsilon(z)$  en el espacio de unas pocas capas atómicas [Ste78]. Suponiendo diferente forma funcional para la transición  $\epsilon(z)$  se obtienen valores de  $E_{im}(z)$  que difieren apreciablemente tan sólo en las proximidades de la interfaz (menos de un angstrom), en donde con la transición abrupta de  $\epsilon$  se obtienen ya valores muy por encima [KH80].

A. Schenk incluye el término imagen sólo por su efecto en la disminución de la

barrera de potencial en el óxido (como se estudiará posteriormente), de forma que calcula la energía imagen únicamente en el interior del óxido (mediante (1.12)) [SH97]. La divergencia de  $E_{im}(z)$  se salva entonces del siguiente modo: a partir del punto en el que la barrera ha decrecido tanto que iguala a la energía del fondo de la banda de conducción del semiconductor, se deja de calcular  $E_{im}(z)$  según (1.12) y se igualan las energías de la barrera y de la banda de conducción en el semiconductor.

En el presente trabajo se incluirá la energía imagen tanto en el óxido como en el semiconductor. Para evitar la divergencia se usarán las expresiones (1.11) y (1.12), para calcular  $V(z)$ , sólo hasta una distancia de 1 Å a las interfaces. Entre los puntos de corte se interpolará con los valores obtenidos en éstos. Los valores de  $|E_{im}(z)|$  en los puntos de corte todavía no han crecido lo bastante como para que tengamos problemas (como que se cruzaran los valores de  $V(Z)$  a uno y otro lado de la interfaz, formándose un pozo).

### 1.3.2. Energía de correlación-intercambio

El término de energía de intercambio se debe al hecho de considerar la aproximación de Hartree-Fock para el gas de electrones libres del sólido. Éste es un método de partícula independiente (como la aproximación de Hartree), pero en el que la función de onda total de todos los electrones se construye como combinación lineal antisimétrica (por el carácter fermiónico de los electrones) de productos de funciones de onda monoparticulares mediante determinantes de Slater. Cuando, con ayuda del método variacional, se pretende ver cuáles son las funciones de onda monoparticulares que consiguen la mejor función de onda total (en el sentido de que minimizan el valor esperado del hamiltoniano completo) se encuentra que son las soluciones de ecuaciones de Schrödinger monoparticulares como (1.8) en las que se incluye en  $V(z)$  un término, sin análogo clásico, denominado energía de intercambio.

Por otra parte, debido a que la función de onda total del sistema no viene realmente dada por un determinante de Slater, las energías de las subbandas obtenidas con el método de Hartree-Fock no serán exactas. La diferencia se denomina energía de correlación, pues procede del hecho de que no se pueden desacoplar las coordenadas

espaciales como se hace al tomar la función de onda total como suma de productos de funciones de onda monoparticulares, dependientes cada una de ellas de una única coordenada.

La obtención rigurosa de  $E_{ex}(z)$  es bastante compleja y se acude a la teoría del funcional de la densidad (DFT) para su cálculo. En esta teoría también se consigue reducir el problema de muchos cuerpos a una ecuación de Schrödinger monoparticular en la que se incluye un término adicional, la energía de correlación-intercambio [And76]. Además, permite obtener también la energía de correlación, imposible de calcular con las ecuaciones de Hartree-Fock, pues se debe precisamente a que realmente no es posible separar las coordenadas de los electrones y expresar la función de onda total como combinación lineal de productos de funciones de onda monoparticulares.

Según este formalismo, la energía se expresa como un funcional de la densidad de electrones  $n(z)$  (véase [Li94] o [HK64]), de modo que se puede poner, haciendo uso de la llamada aproximación local de la teoría DFT, como:

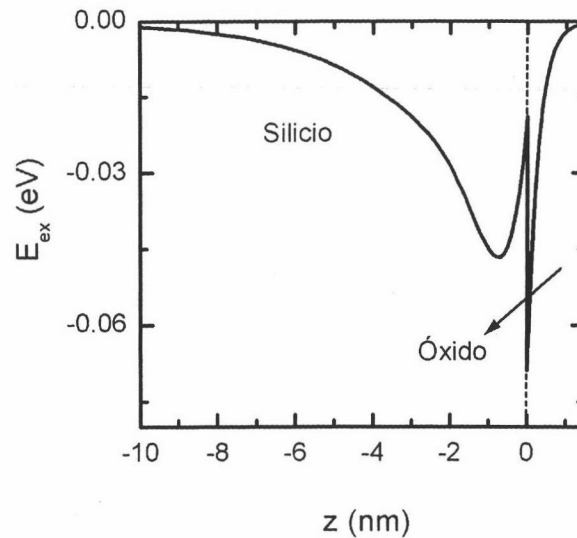
$$E_{ex}(z) = E_{ex}[n(z)], \quad (1.15)$$

donde  $E_{ex}[n(z)]$  es la energía de correlación-intercambio por electrón que poseería un gas de electrones con densidad uniforme  $n(z)$ . Rigurosamente, la teoría DFT sólo es válida para el estado de menor energía total (el único ocupado a 0 K), pero parece justificado extenderla a mayores temperaturas en el contexto de capas de inversión o acumulación [DSV81], incluyéndose implícitamente la dependencia de  $E_{ex}$  con la temperatura a través de  $n(z)$ , dependiente a su vez de la ocupación de los niveles de energía.

En este trabajo emplearemos la siguiente expresión para el cálculo de la energía de correlación-intercambio:

$$E_{ex}(z) = -[1 + 0.7734x \ln(1 + x^{-1})](2/\pi\alpha r_s) Ry^*, \quad (1.16)$$

donde  $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ ,  $x \equiv x(z) = r_s/21$ ,  $r_s \equiv r_s = [4/3\pi a^{*3} n(z)]^{-1/3}$ ,  $a^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2}{me^2}$ ,  $Ry^* = (e^2/8\pi\epsilon_0\epsilon a^*)$ ,  $\epsilon(z)$  es la constante dieléctrica relativa y  $m(z)$  es la masa efectiva,



**Figura 1.4:** Energía de correlación-intercambio obtenida mediante (1.16). Los datos de la simulación son: substrato tipo P con  $N_A = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ; puerta de polisilicio  $N^+$ , con  $N_D = 5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ; espesor del óxido:  $25.6 \text{ \AA}$ ;  $V_g = 3.8V$ .  $T = 300 \text{ K}$ .

que en el silicio se ha tomado igual a [And76]:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{3} \left( \frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l} \right) \quad (1.17)$$

para eliminar la anisotropía en la masa efectiva, cuyos efectos sobre  $E_{ex}$  cabe esperar que sean pequeños [And76].

Como ya se ha comentado, el término de correlación-intercambio es atractivo y tiende a disminuir la energía de los electrones, como puede observarse en la gráfica 1.4. En esta figura también se observa la discontinuidad en  $E_{ex}$  en la interfaz entre el semiconductor y el óxido, como consecuencia del cambio brusco en  $\varepsilon$  y  $m$ .

También puede apreciarse la relación directa entre  $E_{ex}$  y  $n(z)$ : en el óxido  $E_{ex}$  decrece rápidamente y en el semiconductor el máximo de  $|E_{ex}|$  no está en la interfaz, sino en el interior, como sucede con el máximo de  $n(z)$  cuando se considera la cuantización en la dirección perpendicular a la interfaz en láminas de inversión o acumulación.



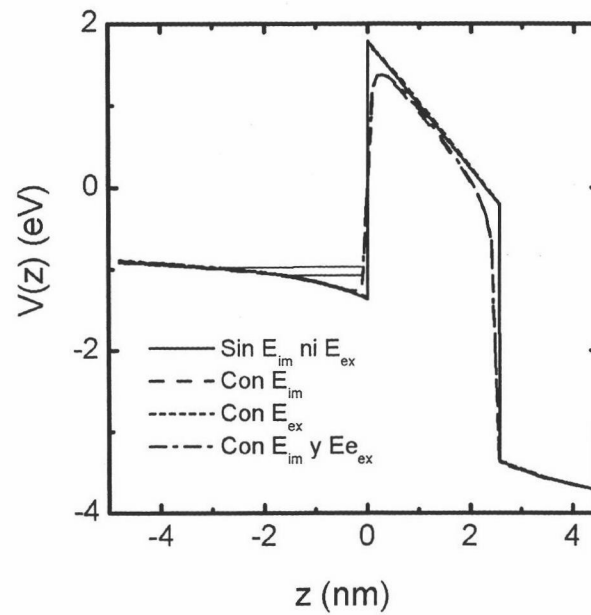
### 1.3.3. Influencia de las energías imagen y de correlación-intercambio

En este apartado analizaremos la influencia de la energía imagen y de correlación-intercambio sobre la concentración de electrones y sobre la posición de los niveles de energía de las subbandas en estructuras MOS.

En la figura 1.5 se ha representado el pozo de potencial  $V(z)$  que confina a los electrones calculado incluyendo o no los términos correspondientes a la energía imagen y a la energía de correlación-intercambio. Puede apreciarse que la inclusión del término imagen disminuye apreciablemente la altura de la barrera y, a la vez, redondea sus esquinas. Además, el mínimo de energía se desplaza hacia el interior del semiconductor y el pozo se hace un poco menos abrupto. Por otra parte, se comprueba que el término de correlación-intercambio apenas influye sobre la forma del pozo. Se han dibujado también las energías correspondientes al fondo de las subbandas 0 y 0'. El efecto sobre éstas de las correcciones aquí consideradas es muy pequeño y en la gráfica 1.5 prácticamente resultan inapreciables (la posición del fondo de las subbandas se modifica menos de un 0.5 %).

Por otro lado, en la gráfica 1.6-a se representa, en función de la tensión de puerta, la posición de los subniveles de energía  $E_0$  y  $E_{0'}$  medidos respecto a la posición del fondo de la banda de conducción en la zona neutra del semiconductor. La figura 1.6-b muestra las mismas energías, pero medidas respecto al mínimo, en cada caso, del pozo  $V(z)$ .

Al incluir el efecto imagen, la posición (respecto de la zona neutra) del nivel  $E_0$  sube ligeramente, mientras que baja al considerar sólo el término de correlación-intercambio. Esto es lo que cabría esperar intuitivamente, pues el término imagen es de carácter repulsivo mientras que el de correlación-intercambio es atractivo. Al considerar ambos términos, los dos efectos tienden a cancelarse de forma que la posición del nivel es bastante próxima a la obtenida sin considerar ninguno de los dos. Por tanto, en lo que respecta a la posición de la subbanda  $E_0$  se cometería más error considerando sólo la corrección de uno de los dos fenómenos que si no se incluyese



**Figura 1.5:** Pozo  $V(z)$  cuando se consideran o no las energías imagen y de correlación-intercambio. Se han representado también los niveles de energía  $E_0$  y  $E_0'$ . Datos de la simulación: sustrato tipo P con  $N_A = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ; puerta de polisilicio  $N^+$ , con  $N_D = 5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ;  $t_{ox} = 25.6 \text{ \AA}$ ;  $V_g = 2.8V$ ).  $T = 300 \text{ K}$ .

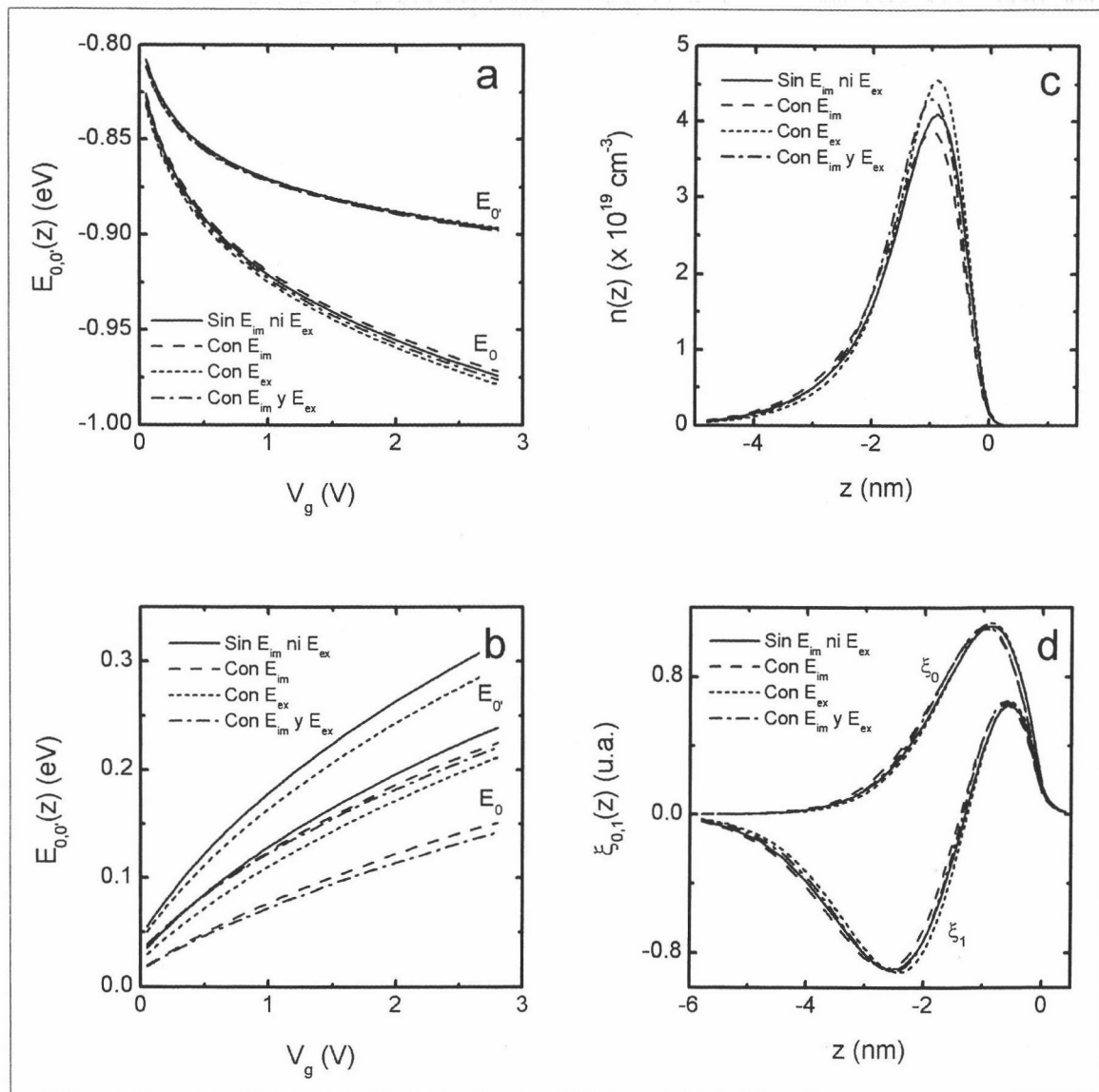
ninguno. Esta conclusión fue ya obtenida por T. Ando *et al* [AFS82, pág. 467] usando un método variacional para la resolución de la ecuación de Schrödinger unidimensional.

En la figura 1.6-b se puede apreciar que, respecto al mínimo del pozo  $V(z)$ , las posiciones de los niveles  $E_0$  y  $E_{0'}$  son más bajas al considerar el término imagen (aunque en términos absolutos estén más altas), lo cual es coherente con la forma del pozo, menos abrupta que cuando no se considera la energía imagen. Aunque parezca que la posición energética de las subbandas depende fuertemente de que se incluyan o no las correcciones de las energías imagen y de correlación-intercambio debe hacerse hincapié en que la posición absoluta de los niveles de energía (más concretamente, su distancia al nivel de Fermi) apenas varía y es éste valor el que influye principalmente sobre la corriente túnel (puesto que es el que determina la ocupación de las subbandas). Como se ha comprobado previamente [JM00], la influencia principal de la energía imagen sobre la corriente túnel no es a través del cambio en la posición energética de las subbandas, sino de la disminución de la altura de la barrera.

Por otro lado, en la gráfica 1.6-c se muestra la densidad de carga  $n(z)$ . Pueden observarse ligeras diferencias entre las curvas obtenidas en los cuatro casos considerados. Como era de esperar, la densidad de carga en el caso de incluir la energía imagen tiene el máximo de menor altura y ligeramente desplazado hacia el interior del semiconductor (pues la energía imagen es repulsiva). Por el contrario, en la curva en cuyo cálculo se ha incluido sólo la energía de correlación-intercambio el máximo es mayor que cuando no se considera.

En esta figura se puede apreciar también la cancelación de los dos efectos estudiados: imagen y correlación-intercambio. En efecto, la inclusión del término imagen tiende a disminuir la concentración máxima de electrones y ensanchar su distribución, mientras que la consideración del término de correlación-intercambio tiene el efecto opuesto.

Pasemos a continuación a describir el trabajo desarrollado sobre los distintos mecanismos de corriente túnel a través del óxido de puerta.



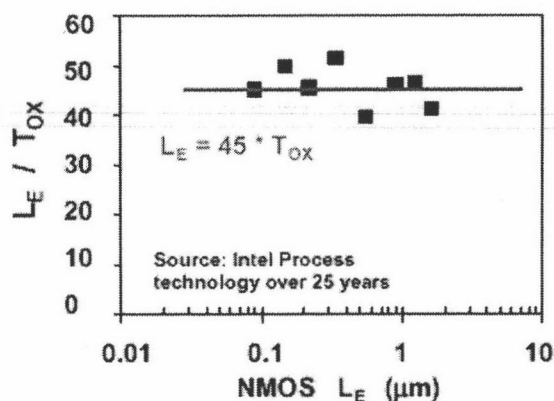
**Figura 1.6:** Efecto de considerar o no las energías imagen y de correlación-intercambio sobre: a)  $E_0$  y  $E_{0'}$  respecto del fondo de la banda de conducción en la zona neutra del semiconductor; b)  $E_0$  y  $E_{0'}$  respecto del mínimo del pozo; c) densidad de carga ( $n(z)$ ); d) funciones de onda correspondientes a los niveles  $E_0$  y  $E_1$ .

## Capítulo 2

# Corriente mediante túnel directo a través del óxido de puerta

### 2.1. Introducción

El diseño y análisis de los dispositivos basados en tecnología MOS actualmente requieren un adecuado estudio y modelización de la corriente túnel a través de la barrera formada por el aislante de puerta. Por un lado, la escritura y borrado de memorias no volátiles EEPROM y FLASH se basa precisamente en el llenado o vaciamiento de la puerta flotante por medio de transiciones túnel efectuadas por electrones. Por tanto, el tiempo de escritura y de retención de los datos depende directamente de la probabilidad que tienen los electrones de efectuar estas transiciones. Por otro lado, la corriente túnel supone una limitación para la disminución de las dimensiones de los transistores MOS. La disminución de las dimensiones de puerta desde 10  $\mu\text{m}$  (1970) hasta 50 nm (actualmente [Boh02]) se ha venido realizando durante los últimos treinta años siguiendo unas reglas de escalado bien establecidas, pero que en nuestros días deben ser revisadas, ya que se están alcanzando dimensiones en las que la entrada en escena de nuevos fenómenos limita su aplicación [F<sup>+</sup>01], [T<sup>+</sup>98], [roa00]. El principal factor limitante es la disminución del espesor del óxido de puerta,  $t_{ox}$ , no por razones tecnológicas (es posible fabricar óxidos tan delgados como 1.5 nm sobre más de 200 obleas [T<sup>+</sup>98]), sino porque la corriente túnel a través del óxido aumenta



**Figura 2.1:** Longitud del canal dividida por el espesor del óxido de puerta vs. longitud del canal.

exponencialmente conforme se disminuye  $t_{ox}$ . Esto puede provocar alteraciones en el funcionamiento convencional del dispositivo [MOY+96] y una disipación de potencia por encima de lo tolerable [LBTW97].

Como se muestra en la figura 2.1, el escalado de los transistores MOS exige la disminución lineal de  $t_{ox}$  conforme el canal se hace más corto. Se prevee que antes del año 2005, el escalado de los dispositivos requiera ya óxidos tan delgados como 1.0-1.5 nm [roa00], [PG01], que está por debajo del espesor mínimo necesario para no tener una corriente de pérdidas inadmisibles (1.7-2.0 nm para circuitos de baja potencia, 2.1-2.7 nm para aquellos de muy baja potencia o 2.5 nm para celdas DRAM [roa00]).

Actualmente se están estudiando soluciones alternativas que permitan disminuir el tamaño de los dispositivos sin aumentar la corriente de puerta, como el uso de dieléctricos con alta constante dieléctrica. Sin embargo, su uso plantea serios problemas relativos a la calidad de las interfaces, por lo que las soluciones a corto plazo todavía requerirán el empleo del dióxido de silicio [roa00]. En cualquier caso, aun con el uso de nuevos materiales o estructuras [F+01] para la minimización de la corriente túnel de puerta, el diseño de los dispositivos se moverá en los límites en los que el espesor efectivo del aislante de puerta (definido como el espesor de la lámina de dióxido de silicio necesaria para tener la misma capacidad) está próximo al mínimo.

En este capítulo vamos a estudiar la corriente de puerta por túnel directo a través

del dióxido de silicio. En primer lugar, haremos una breve revisión de los métodos que se pueden encontrar en la bibliografía y analizaremos las ventajas de emplear el formalismo de Bardeen [Bar61], [Har61], [Wet00]. Posteriormente, expondremos algunos de los problemas y cuestiones abiertas en torno a las transiciones túnel a través del dióxido de silicio. En el siguiente apartado, siguiendo el método de Bardeen, obtendremos las ecuaciones necesarias para el cálculo de la corriente y analizaremos su dependencia con algunos de los parámetros del modelo o del dispositivo. Finalmente, se comparan los resultados obtenidos con medidas experimentales y se extraen algunas conclusiones de esta comparación relativas a los parámetros que deben usarse para el correcto ajuste de los datos experimentales.

## 2.2. Modelos para el cálculo de la corriente túnel

Antes de exponer el modelo que hemos usado en el presente trabajo para el cálculo de la corriente túnel en estructuras MOS, en este apartado realizaremos una breve revisión de los métodos empleados previamente en la bibliografía para el cálculo de las probabilidades de transición túnel.

Para ello, resulta conveniente distinguir entre sistemas bi y tridimensionales (abreviadamente, sistemas 2D ó 3D, respectivamente). En los últimos, los electrones se pueden mover libremente en todas las direcciones, mientras que en un sistema 2D tienen restringido su movimiento en una de las direcciones. En este caso, la energía correspondiente a esta dirección está cuantizada.

Para los estados extendidos 3D la probabilidad de transmisión  $T$  a través de una barrera es un concepto bien definido y es igual a la razón entre el flujo transmitido y el incidente. Además, admite una expresión analítica en el caso de algunas barreras sencillas, como es el caso de barreras cuadradas, dobles barreras resonantes [Fer95] o, incluso, barreras trapezoidales [SH97]. En cualquier caso, el coeficiente de transmisión puede obtenerse mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger con barreras arbitrarias mediante el método Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) [Fer95] o el de la matriz de transferencia propuesto por Ando *et al* [AI87].

En la práctica este último método es muy parecido al que hemos empleado nosotros

para la resolución de la ecuación de Schrödinger en sistemas ligados. Consiste en descomponer el potencial original en  $N$  trozos de potencial constante, en los que las soluciones son conocidas. Para el trozo  $n$  se tiene:

$$\xi_n(z) = A_n e^{-ik_n z} + B_n e^{ik_n z}. \quad (2.1)$$

Aplicando las condiciones de frontera de la función de onda para pasar de un trozo a otro, se puede obtener finalmente una relación entre los coeficientes del primer y del último trozo, que se expresa mediante la correspondiente matriz de transferencia. Ésta contiene toda la información del efecto de la barrera sobre la transmisión.

Sin embargo, la situación es más compleja en el caso de que supongamos que inicialmente el electrón está confinado (sistemas 2D). Ésta es la situación, por ejemplo, de un electrón situado entre dos barreras de potencial (como es el caso de una isla de silicio o *quantum dot* en el seno de un aislante de puerta) o en el canal de inversión de una estructura MIS.

En estos casos conviene introducir el concepto de estado casi ligado o *QBS* (acrónimo de la expresión inglesa *quasi bound state*). Supuesto inicialmente el electrón en uno de estos estados, debe calcularse entonces la vida media del estado o tiempo de decaimiento ( $\tau$ ) [CGP01]. Es decir,  $1/\tau$  es la probabilidad, por unidad de tiempo, de que el electrón atraviese la barrera mediante efecto túnel.

Supongamos, por ejemplo, el sistema mostrado en la figura 2.2, con un pozo de potencial separado a través de una barrera de una zona en la que los electrones no están ligados.

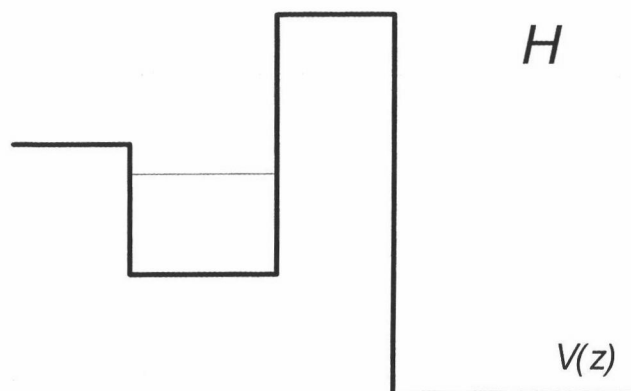
Rigurosamente, el comportamiento del sistema viene determinado por el hamiltoniano  $H = T + V(z)$ , siendo  $V(z)$  la energía potencial. Si suponemos al electrón inicialmente localizado en el pozo de la izquierda, la función de onda correspondiente se podrá expresar en función de las autofunciones de este hamiltoniano:

$$\xi(z, t = 0) = \sum_n c_n \Psi_n(z). \quad (2.2)$$

La evolución temporal de esta función de onda viene determinada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y resulta ser:

$$\xi(z, t > 0) = \sum_n c_n \Psi_n(z) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (2.3)$$





**Figura 2.2:** Potencial  $V(z)$  correspondiente al Hamiltoniano  $H$  del sistema formado por dos pozos de potencial separados por una barrera.

siendo  $E_n$  la energía correspondiente a la autofunción  $\Psi_n$ . En el estudio de la probabilidad de que la partícula pase al otro lado de la barrera interesa conocer en qué proporción sigue conteniendo el estado  $\xi(z, t)$  a la función inicial  $\xi(z, t = 0)$  cuando avanza el tiempo:

$$\langle \xi(z, t = 0) | \xi(z, t) \rangle = \int \xi^*(z, t = 0) \xi(z, t) dz. \quad (2.4)$$

Sin embargo, este tipo de métodos que implican un análisis dependiente del tiempo son inaceptablemente complejos [Cas00] y es preferible acudir a otro tipo de formalismos independientes del tiempo, que presentamos a continuación.

Por ejemplo, en la referencia [CZ98] se propone un nuevo método basado en la ecuación (2.4), denominado *Función de Green proyectada*, que permite obtener el tiempo de vida media del estado sin necesidad de evaluar la anterior expresión dependiente del tiempo.

Por otro lado, muchos de los métodos independientes del tiempo se basan en la búsqueda de autovalores complejos de la ecuación de Schrödinger. Para analizar su significado, supongamos un hamiltoniano en el que hay un pozo de potencial en el que se pueda suponer que el electrón está confinado inicialmente. Deben buscarse entonces soluciones de la ecuación de Schrödinger que representen el hecho de que

el electrón ha escapado del pozo (por ejemplo,  $Ae^{ikz}$  para el hamiltoniano de la figura 2.2). Sin embargo, una condición de contorno de este tipo es compleja y los autovalores correspondientes no tienen que ser necesariamente reales [LL74]. Estas energías complejas pueden expresarse del siguiente modo:

$$E = E_0 - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\tau} i, \quad (2.5)$$

en donde  $E_0$  y  $\tau$  deben ser cantidades reales positivas, como comprobaremos a continuación. La parte real  $E_0$  se corresponde con la energía del estado ligado, mientras que el significado físico de la parte imaginaria puede apreciarse al obtener la expresión de las funciones de onda en estado estacionario dependientes del tiempo:

$$\xi(z, t) = \xi(z) \cdot e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} = \xi(z) \cdot e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} \cdot e^{-\frac{t}{2\tau}}. \quad (2.6)$$

Como puede verse, la probabilidad de encontrar a la partícula dentro de cierta región, disminuye según la exponencial  $\exp(-t/\tau)$ . Por tanto, de la parte imaginaria del autovalor  $E$  se puede extraer el tiempo de vida medio del estado casi ligado y la correspondiente probabilidad de *tunneling* por unidad de tiempo:

$$W = \frac{1}{\tau}. \quad (2.7)$$

Además, se demuestra que el tiempo de vida media está directamente relacionado con la anchura energética del estado ( $\Gamma$ ), en concordancia con el principio de incertidumbre:

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}. \quad (2.8)$$

Con estados ligados, como los correspondientes a un pozo de potencial rodeado de barreras que se extienden hasta el infinito, la energía del estado está bien definida y el tiempo de vida media es infinito. Sin embargo, los estados casi ligados se extienden en energía tanto más cuanto menor sea el tiempo de vida media del estado según la anterior relación.

Para la obtención de la vida media del estado,  $\tau$ , se han propuesto varios métodos. A continuación recopilamos algunos de los más extendidos, con algunas de sus variaciones.

### 2.2.1. Métodos basados en la matriz de transferencia

Todos los métodos agrupados bajo este epígrafe tienen en común el cálculo de la matriz de transferencia entre dos puntos situados en los dos extremos de la barrera considerada. Para calcular la matriz de transferencia, se suele descomponer el potencial en trozos de potencial constante, como hemos comentado anteriormente.

En [AGG93] se calcula la matriz de transferencia, pero empleando vectores de onda complejos. Imponiendo las condiciones de contorno adecuadas, extraen las autoenergías complejas que las cumplen. Sin embargo, habitualmente el tiempo de vida medio de un pseudoestado suele determinarse a partir de los coeficientes de transmisión o reflexión de la barrera [CSGP02], [Cas00], [GGV95].

Supongamos, por ejemplo, una doble barrera resonante. La matriz de transferencia correspondiente a este sistema viene dada por:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Se demuestra entonces que hay una relación entre el coeficiente de transmisión y el tiempo de vida medio del nivel  $E_i$  [CSGP02]:

$$T(E) \propto \frac{1}{|M_{11}|^2} \propto \frac{1}{(E - E_n)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau_n^2}}. \quad (2.10)$$

De este modo, la anchura de la lorentziana correspondiente al coeficiente de transmisión en las cercanías del nivel resonante proporciona el tiempo de vida medio (de acuerdo con la expresión (2.8)) [GGV95], [CSGP02].

Para estados en los que no tenga sentido hablar de transmisión (como el mostrado en la figura 2.2 o los de un canal de inversión en estructuras MOS), se puede calcular el tiempo de vida medio del estado  $E_n$  a partir de la derivada de la fase del coeficiente de reflexión [Pri92], [LVG99], [Cas00]:

$$\tau_n = \hbar \left( \frac{\partial \theta(E)}{\partial E} \right)_{E=E_n}, \quad (2.11)$$

siendo el coeficiente de reflexión:

$$r(E) = e^{i\theta(E)}. \quad (2.12)$$

Por tanto, calculando la matriz de transferencia correspondiente al sistema y el correspondiente coeficiente de reflexión, se puede determinar el tiempo de vida medio realizando numéricamente la anterior derivada [Cas00].

No obstante, en las referencias [GGV95] y [CSGP02] se comprueba que no hace falta calcular esta derivada, sino que el tiempo de vida medio se puede obtener también en este caso directamente a partir del elemento  $M_{11}$  de la matriz de transferencia:

$$\frac{1}{|M_{11}|^2} \propto \frac{1}{(E - E_n)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau_n^2}}.$$

De esta forma, no es necesario el paso adicional del cálculo de la derivada que, además, es numéricamente más inexacto y proporciona resultados más ruidosos [CSGP02].

En algunas situaciones no es necesario el cálculo de la matriz de transferencia en el momento de evaluar la probabilidad de transición, sino que se puede obtener previamente una expresión general. Por ejemplo, Gildenblat *et al* [GGV95], aplicando el método WKB, han desarrollado una expresión general para obtener los elementos de la matriz de transferencia en el caso de una barrera doble asimétrica. El mismo método ha sido aplicado por Shih *et al* [SWJ<sup>+</sup>98] para el estudio de las transiciones túnel desde el canal de inversión de una estructura nMOS.

Además, en ambos casos se obtienen expresiones cuyos términos se pueden identificar con los de la ecuación (2.13), que comentaremos en el siguiente apartado.

### 2.2.2. Métodos basados en la transparencia

Según este método la probabilidad de una transición túnel viene dada por la siguiente expresión:

$$\frac{1}{\tau_n} = f_n T_n, \quad (2.13)$$

donde  $f_n$  es la frecuencia con la que los electrones inciden sobre la barrera y  $T_n$  es la probabilidad de transmisión para estos electrones. Según esta formulación del problema, las transiciones túnel se descomponen en dos pasos (con las correspondientes probabilidades): incidencia sobre la barrera y transmisión a través de ésta.

La frecuencia  $f_n$  viene dada por:

$$f_n = \frac{1}{2 \int_a^b \frac{1}{v_z(z)} dz} = \frac{1}{\int_a^b \sqrt{\frac{2m_z}{E_n - E_c(z)}} dz}. \quad (2.14)$$

En esta expresión,  $v_z(z)$  es la componente de la velocidad perpendicular a la interfaz,  $m_z$  es la masa efectiva en la misma dirección y  $E_c(z)$  es la energía correspondiente al fondo de la banda de conducción. La integral se realiza a lo largo del pozo, entre los puntos de rebote clásicos (en los cuales se cumple  $E_n = E_c(a) = E_c(b)$ ). El significado de la anterior ecuación puede comprenderse fácilmente si consideramos un pozo cuadrado de longitud  $L$ . Los estados estacionarios están formados por dos ondas que viajan en sentido contrario:

$$\xi(z) = Ae^{ik_z z} + Ae^{-ik_z z}. \quad (2.15)$$

La densidad de corriente total es cero, pero la corriente en cada sentido viene dada por:

$$J = \frac{\hbar k_z}{m_z} A^2 = \frac{\hbar k_z}{m_z} \frac{1}{2L} = \frac{v_z}{2L}, \quad (2.16)$$

es decir, la inversa del tiempo que el electrón emplea en recorrer el pozo en un viaje de ida y vuelta. En un pozo genérico, la velocidad depende de la posición y este tiempo viene dado por:

$$2 \int_a^b \frac{1}{v_z(z)} dz.$$

En cuanto al coeficiente de transmisión  $T_i$ , éste suele calcularse suponiendo ondas planas incidentes y aplicando el método WKB [RRY99], [YHHW99], [CSGP02] o analíticamente mediante funciones de Airy (obtenidas aplicando las correspondientes condiciones de contorno cuando la barrera es trapezoidal [RTB96], [SH97]).

Cuando se aplica el método WKB, el coeficiente de transmisión viene dado por [RRY99], [YHHW99]:

$$T_n = T_{WKB} \cdot T_R, \quad (2.17)$$

donde  $T_{WKB}$  es el coeficiente de transmisión habitual cuando se emplea la aproximación WKB:

$$T_{WKB} = e^{-2 \int_{t_{ox}} \kappa(z) dz}, \quad (2.18)$$

y  $T_R$  es una corrección necesaria para tener en cuenta las reflexiones en las interfaces (el método WKB rigurosamente sólo puede ser usado en potenciales que varían ligeramente). R. Clerc [CSGP02] ha comprobado que se obtienen importantes diferencias si no se aplica este factor correctivo.

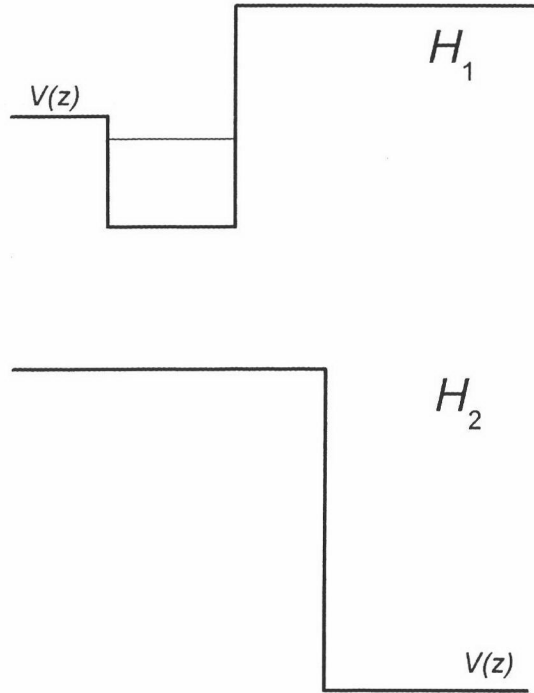
### 2.2.3. Método de Bardeen

Es el que seguiremos en el presente trabajo, por lo que en este apartado realizaremos una descripción más detallada que en los anteriores. Como vamos a ver a continuación, el método de Bardeen permite obtener la probabilidad de transición a través de la barrera directamente a partir de las funciones de onda de los estados inicial y final, sin necesidad de llevar a cabo cálculos adicionales. Esto constituye una de sus principales ventajas.

Este método se basa en los trabajos de J. Bardeen [Bar61] y W. A. Harrison [Har61]. El trabajo original de Bardeen fue desarrollado para el estudio de las transiciones túnel entre dos puntos incluyendo los efectos de las interacciones entre partículas. Pero la teoría de Bardeen no es aplicable a situaciones en las que cambia la estructura de bandas con la posición. Harrison desarrolló un modelo para el estudio de la transición túnel por parte de un electrón sin tener en cuenta la interacción con otras partículas, recogiendo todas las interacciones dentro de un potencial  $V(z)$  invariante con el tiempo.

El método de Bardeen y Harrison es básicamente una aplicación de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, mediante la regla de oro de Fermi. No obstante, tiene la particularidad de que las funciones de onda del estado inicial y del estado final no son autofunciones del mismo hamiltoniano. Sin embargo, como se comprobará seguidamente, la deducción teórica de la expresión que proporciona la probabilidad de transición es formalmente idéntica a la de la regla de oro de Fermi.

Para ello, en lugar de trabajar directamente con el hamiltoniano del sistema completo (figura 2.2), éste se descompone en dos hamiltonianos [CSGP02]. El primero,  $H_1$ , cuya energía potencial se muestra en la figura 2.3, corresponde, por ejemplo, al estado inicial, que es un autoestado ligado de  $H_1$ . El segundo ( $H_2$ ) corresponde al



**Figura 2.3:** Potencial  $V(z)$  correspondientes a los Hamiltonianos  $H_1$  y  $H_2$  en los que hemos descompuesto el sistema correspondiente al hamiltoniano  $H$  de la figura 2.2.

estado final en el pozo de la derecha y es un autoestado de  $H_2$ . Es decir:

$$H_1 \Psi_{1,n} = E_{1,n} \Psi_{1,n}, \quad (2.19a)$$

$$H_2 \Psi_{2,n} = E_{2,n} \Psi_{2,n}, \quad (2.19b)$$

donde el subíndice 1 ó 2 refiere al hamiltoniano  $H_1$  o  $H_2$ , respectivamente y  $n$  indexa a los posibles estados.

Inicialmente, suponemos que el estado del sistema viene representado por la función de onda  $\Psi_{1,n}$ . A partir del instante  $t = 0$ , dejamos evolucionar al sistema y el electrón puede pasar al otro lado de la barrera. Para tiempos posteriores, la función de onda correspondiente al hamiltoniano  $H$  la expresaremos como una combinación lineal del estado inicial y de los posibles estados finales, con unos coeficientes dependientes del tiempo:

$$\Psi_n(t) = a_n(t) e^{-\frac{iE_{1,n}t}{\hbar}} \Psi_{1,n} + \sum_m b_m(t) e^{-\frac{iE_{2,m}t}{\hbar}} \Psi_{2,m}. \quad (2.20)$$

La sumatoria sería una integral en el caso de un continuo de niveles de energía en el lado de la derecha. Obsérvese que hemos expresado la función de onda del sistema completo no como combinación lineal de autofunciones de  $H$ , sino como una combinación lineal de autofunciones de dos hamiltonianos distintos,  $H_1$  y  $H_2$ .

En cierta forma, los coeficientes  $b_m(t)$  están indeterminados porque el estado inicial  $\Psi_{1,n}$  ya *tiene algo* de los estados finales (de hecho, puede expresarse como una combinación lineal de todas las autofunciones de  $H_2$ ) y, por tanto, los cocientes  $b_m(t)$  no pueden ser directamente interpretados como una medida de la tasa de transición desde el estado inicial hacia el estado  $\Psi_{2,m}$  [Wet00].

Sin embargo, afortunadamente el solapamiento de los estados  $\Psi_{2,m}$  con el estado inicial  $\Psi_{1,n}$  es muy pequeño en los casos de interés. En efecto, los estados de  $H_2$  que se solapan apreciablemente con  $\Psi_{1,n}$  son los que tienen energías cercanas o por encima de la barrera de potencial. Pero estos estados no son accesibles desde el estado inicial porque tienen una energía muy diferente. Por otro lado, los estados de  $H_2$  con energía próxima a la del estado inicial se solapan despreciablemente con éste si la energía es mucho menor que la altura de la barrera, puesto que las funciones de onda de ambos estados disminuyen exponencialmente en el interior de la barrera [Wet00].

Por tanto, el cuadrado de los coeficientes  $b_m(t)$  puede ser directamente interpretado como la probabilidad de que el electrón haya pasado desde el estado inicial representado por  $\Psi_{1,n}$  al estado  $\Psi_{2,m}$ .

Para obtener las probabilidades de transición, se introduce la expresión (2.20) en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y se sigue un proceso equivalente al de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, con las condiciones iniciales:

$$a_n(t = 0) = 1, \quad (2.21a)$$

$$b_m(t = 0) = 0, \quad \forall m. \quad (2.21b)$$

El resultado final es análogo a la conocida regla de oro de Fermi:

$$W_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{12}|^2 \rho(E) \delta(E_i - E_m). \quad (2.22)$$

Donde  $W_{n \rightarrow m}$  es la probabilidad, por unidad de tiempo, de que el electrón pase del estado  $n$  en un lado de la barrera al estado  $m$  en el otro lado.  $\rho(E)$  es la densidad de



estados finales y  $H'_{12}$  es el elemento de matriz que controla la transición y que viene dado por:

$$H'_{12} = \int d^3 \vec{r} \Psi_{2,m}^*(\vec{r}) H' \Psi_{1,n}(\vec{r}). \quad (2.23)$$

Finalmente,  $H'$  es la diferencia entre el hamiltoniano completo y el hamiltoniano correspondiente al estado inicial:

$$H = H_1 + H'. \quad (2.24)$$

#### 2.2.4. Comparación de los tres métodos

Los tres métodos revisados (especialmente los dos primeros) y sus diversas variantes son los que habitualmente se usan, a juzgar con la frecuencia con la que aparecen en la bibliografía. No obstante, no son los únicos y hay algunos otros, de uso menos extendido, pero de gran interés en algunas situaciones concretas. Por ejemplo, el método de los vectores de onda perturbados ([AGG97]) puede emplearse si se quieren usar matrices de transferencia pero hay pseudoestados energéticamente muy próximos, por lo que no resulta fácil distinguir la anchura de la lorentziana correspondiente a cada resonancia.

J.A. López-Villanueva [LVG99] y R. Clerc [CGP02] han comprobado, con barreras sencillas, que se obtienen resultados muy parecidos con el método de Bardeen y con un formalismo basado en la matriz de transferencia. También se ha verificado que el método basado en la transparencia proporciona resultados parecidos si se emplea la expresión corregida expuesta anteriormente en el apartado 2.2.2 [CGP02].

Desde el punto de vista de su implementación para el cálculo de la corriente túnel en simuladores de dispositivos, probablemente la ventaja principal del método de Bardeen respecto a otros formalismos sea el hecho de que no necesita ningún cálculo o procesamiento de datos posterior a la resolución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y Poisson. Esto es porque las probabilidades de transición se calculan directamente a partir de las funciones de onda obtenidas. Otras ventajas del método de Bardeen (algunas de las cuales se podrán comprobar a lo largo del presente trabajo) se enumeran a continuación:

- Es un método fácil de realizar numéricamente, al contrario que otros formalismos.
- Es fácil de generalizar para el cálculo de las transiciones túnel asistidas por trampas.
- Pueden realizarse aproximaciones analíticas del método de Bardeen que permiten obtener resultados cómodos sin necesidad de recurrir a métodos basados en la transparencia [CSGP02].

### 2.3. Parámetros y efectos relativos a las transiciones túnel a través de óxidos de puerta

A pesar de ser un fenómeno ampliamente estudiado, todavía hay algunas cuestiones en discusión sobre los procesos túnel en heteroestructuras y, más concretamente, a través del dióxido de silicio en dispositivos MOS. La mayoría de los modelos usan para el cálculo de la corriente túnel modelos en el contexto de la aproximación de la función de onda envolvente y de la masa efectiva, estrictamente sólo válidos en materiales cristalinos extensos. Además, asumen algún tipo de estructura de bandas para el dióxido de silicio, que en realidad es un material no cristalino. Sin embargo, hasta hace poco, nunca habían sido comparados sus resultados con métodos más robustos. Un reciente artículo escrito por M. Städele [STH01] ha arrojado algo de luz sobre estas cuestiones, al abordar el problema con un modelo microscópico basado en el método *tight-binding* (TB) o de las ligaduras fuertes aplicado a la estructura Si-SiO<sub>2</sub>-Si.

Nosotros creemos que se seguirán usando los modelos basados en la función de onda envolvente y en la masa efectiva por su mayor facilidad de uso en simuladores de dispositivos y por la fácil interpretación de sus parámetros de ajuste. Sí es cierto, sin embargo, que deben ser empleados teniendo en cuenta los resultados de métodos más rigurosos, como el presentado en la referencia anteriormente citada.

A continuación revisamos los problemas a los que nos referimos, así como algunas

de las conclusiones presentadas por M. Städele [STH01].

### 2.3.1. Masa efectiva en el dióxido de silicio

Estrictamente hablando, el concepto de estructura de bandas se define solamente para óxidos periódicos e infinitos. Pero en multitud de trabajos se ha empleado el concepto de masa efectiva en el óxido con bastante éxito y M. Städele [STH01] prueba que puede mantenerse para explicar procesos túnel a través de óxidos tan delgados como 1.0 nm.

Normalmente se modela la relación de dispersión en el interior de la banda prohibida del óxido mediante una única rama con la misma curvatura que la banda de conducción, continuación de ésta en la zona de vectores de onda  $k_z$  imaginarios, y terminando en la cima de la banda de valencia, con la misma curvatura. Sin embargo, esta aproximación no es correcta en ciertas situaciones porque en la banda de valencia la masa efectiva es mucho mayor e incluso llevaría a contradicciones en el caso de considerar los procesos túnel desde y hacia la banda de valencia desde el punto de vista de los electrones o de los huecos [Wet00].

No obstante, con el modelo TB se observa que en el rango de energías en las que se producen las transiciones túnel de los electrones, el proceso está dominado por una única banda [STH01]. Suponiendo la aproximación de la masa efectiva, M. Städele ha calculado el valor que ésta debe tomar para reproducir la relación de dispersión  $k_z(\varepsilon)$  hallada con el método TB (siendo  $\varepsilon$  la distancia desde el fondo de la banda de conducción del óxido). Han encontrado que la masa efectiva es menor que la que se suele emplear para ajustar datos experimentales correspondientes al régimen de FN (0.5-0.6  $m_0$ ). El valor que se da para la zona de energía 3 eV por debajo de la banda de conducción del óxido (aproximadamente 0.3 $m_0$ ) es muy parecido al que se emplea en el ajuste de la corriente directa en óxidos muy delgados (<3.5 nm), [BWS96], [SH97], [KMMH00], [JMGP+01]. Además, proporcionan la siguiente expresión analítica para calcular la masa efectiva en función de la energía  $\varepsilon$  [STH01]:

$$\frac{m_t(\varepsilon)}{m_t(0)} = 1 + \sum_{j=1}^3 a_j \varepsilon^j \quad (2.25)$$

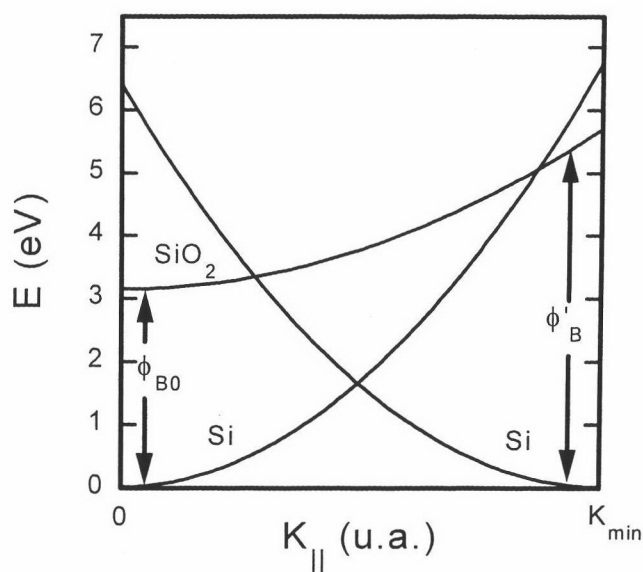
con  $a_1 = -0.178 \text{ eV}^{-1}$ ,  $a_2 = 0.025 \text{ eV}^{-2}$  y  $a_3 = -0.0023 \text{ eV}^{-3}$ .

Esta expresión podría en parte explicar la disparidad de valores para la masa efectiva usados en la bibliografía, dentro del rango de valores  $[0.29m_0, 0.70m_0]$  [LBY99], [KMMH00], [YHHW99], [SH97], [BWS96], [DVM<sup>+</sup>95], [JMGP<sup>+</sup>01]. Normalmente, con espesores mayores que 4.0 nm se suele usar en la bibliografía una masa efectiva de  $0.6 - 0.42 m_0$  [Mas88], [Heb97], mientras que con espesores alrededor de 3.0 nm y menores la masa efectiva está en torno a  $0.3m_0$  [DVM<sup>+</sup>95], [JMGP<sup>+</sup>01]. La razón de esto es la siguiente: con óxidos más gruesos sólo hay una corriente apreciable en régimen de FN, que se corresponde con energías próximas al fondo de la banda de conducción del óxido, por lo que la masa efectiva estará en torno a  $m_t(0)$ . Sin embargo, con óxidos más delgados, sí hay una corriente apreciable antes del régimen de FN (y de hecho no se suele llegar a éste). Por tanto, la masa efectiva se corresponderá con la de las energías próximas a 3.15 eV por debajo de la banda de conducción del óxido.

No obstante, al ser la masa efectiva en el óxido frecuentemente un parámetro de ajuste, muchas veces es la encargada de absorber las diferencias entre las aproximaciones de los distintos modelos.

### 2.3.2. Conservación del momento paralelo y altura de la barrera

Entre el fondo de la banda de conducción del silicio y la del dióxido de silicio hay 3.15 eV de diferencia. Este valor es el que habitualmente se suele emplear para la altura de la barrera de una interfaz Si-SiO<sub>2</sub>, y que simbolizaremos con  $\phi_{B0}$ . Sin embargo, ésta no es la diferencia real entre la energía de un electrón que, con igual momento cristalino paralelo,  $\vec{K}_{||}$ , estuviese en el semiconductor o en aislante. Si la orientación cristalina del semiconductor respecto a la interfaz es  $\langle 100 \rangle$ , como se ha supuesto a lo largo del presente trabajo, los valles perpendiculares a la interfaz (no



**Figura 2.4:** Esquema del diagrama de bandas del silicio y del dióxido de silicio. Se muestra la diferente altura de la barrera "vista" por los electrones situados en los valles paralelos ( $\phi'_B$ ) y perpendiculares ( $\phi_{B0}$ ), cuyo centro está situado en  $k_{min} \simeq 0.8 \frac{2\pi}{a_{Si}}$ . Se han supuesto relaciones de dispersión parabólicas.

prima) tienen momento paralelo nulo  $k_{||} = 0$  en el centro del valle. En este caso, (ver figura 2.4) la altura de la barrera será (tomando  $E_z = 0$ ):

$$\phi_B = \phi_{B0} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{ox}} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_t} = \phi_{B0} - E_{||Si} \left( 1 - \frac{m_t}{m_{ox}} \right), \quad (2.26)$$

siendo  $m_t = 0.19m_0$  la masa efectiva transversal en el silicio. Como  $m_{ox} > m_t$ , tenemos que la barrera será  $\phi_{B0}$  en el fondo del valle pero decrecerá a medida que crece  $k_{||}$ .

Sin embargo, en el caso de los valles prima, el mínimo del valle tiene momento paralelo  $\vec{K}_{min}$  distinto de cero, estando situado al límite de la zona de Brillouin. En este caso, como se observa en la gráfica, la barrera  $\phi_B$  será mayor que  $\phi_{B0}$ . Como la distancia del mínimo del valle  $|\vec{K}_{min}|$  al origen del espacio de momentos es mucho mayor que la distancia del momento cristalino respecto al mínimo del valle ( $|\vec{k}_{||}|$ ),

del orden de 50 veces, tendremos que  $|\vec{k}_{\parallel} + \vec{K}_{\text{mín}}| \simeq |\vec{K}_{\text{mín}}|$  y, por tanto:

$$\phi_B = \phi_{B0} + \frac{\hbar^2 K_{\text{mín}}^2}{2m_{ox}} \quad (2.27)$$

Se ha supuesto una dispersión parabólica, con  $m_{ox} = 0.5m_0$ , para trazar las gráficas. Lógicamente, con energías tan alejadas del mínimo no se cumple, pero lo único que se ha pretendido con esta figura ha sido ilustrar el porqué de que la altura de la barrera sea diferente. De hecho, se ha demostrado que la banda de conducción en el dióxido de silicio tiene una fuerte no parabolicidad, pudiéndose considerar parabólica sólo para energías muy próximas al fondo de la banda [LCS99].

El valor de discontinuidad de la banda de conducción al pasar del silicio al óxido ( $\phi_B$ ) es, por todo ello, un parámetro difícil de determinar y que habitualmente se emplea para ajustar las curvas de corriente túnel experimentales con las obtenidas mediante simulación [SH97].

Según esto, y como se ilustra en la figura 2.4, la conservación del momento paralelo implica que los electrones situados en los valles paralelos ven una barrera más alta que los situados en los valles perpendiculares. Esto conlleva que la corriente túnel debería depender de la orientación del substrato [WH83]. No obstante, experimentalmente no se ha observado esta dependencia, por lo que se ha admitido que realmente existe una ruptura de la conservación del momento paralelo. Hasta ahora se había señalado como posible causa la rugosidad de la interfaz o la dispersión por fonones en el óxido [SH97].

Sin embargo, M. Städele [STH01] demuestra que no hace falta recurrir a estos mecanismos puesto que obtienen el acoplamiento entre estados con diferente momento paralelo, lo que explica la ruptura de su conservación. No obstante, por debajo de un espesor crítico, situado entre 1.0 y 3.0 nm, se obtiene que el momento paralelo se conserva y no hay acoplamiento entre estados de diferentes valles, por lo que los electrones en los valles paralelos verían una altura de la barrera mayor.

Ante esta situación, por sencillez de cálculo, hemos decidido suponer la conservación del momento paralelo, pero sin aplicar diferente altura de la barrera según el momento paralelo. En todo caso, se ha empleado diferente valor para las transiciones

desde distintos tipos de valle.

### 2.3.3. Energía imagen

Mientras que el uso de la energía imagen en otros campos de la física de semiconductores (como en los contactos Schottky) no se discute [Sze81], ha habido bastante controversia acerca de la inclusión de la expresión clásica de la energía imagen para el cálculo de la corriente túnel en estructuras MOS. De acuerdo con algunos autores ([WH76], [HW78], [HW79]), la energía imagen clásica (como la dada por (1.11) y (1.12)) sobreestima la energía imagen real en procesos túnel y se obtienen mejores resultados omitiéndola en los cálculos o bien empleando una expresión cuántica [WH76], [HW78], [HW79]:

$$E_{im}(z) = \begin{cases} \int_{z' > 0} |\xi(-z')|^2 E_{im}(z, -z') dz' & \text{si } z < 0 \\ \int_{z' < 0} |\xi(-z')|^2 E_{im}(z, -z') dz' & \text{si } z > 0 \end{cases}, \quad (2.28)$$

donde  $E_{im}(z, -z')$  es la energía potencial clásica debida a la imagen de una carga situada en  $-z'$  y a otra carga testigo situada en la posición  $z$ .

Sin embargo, esta expresión es más costosa de realizar numéricamente. En realidad, el uso de la expresión clásica (adiabática) o cuántica tiene que ver con la relación entre el tiempo de tránsito de un electrón a través de la barrera y el tiempo de reagrupamiento de las cargas. Actualmente y después de cierta controversia se está de acuerdo en que la expresión adiabática resulta más adecuada [PS83], [Fis94]. N. Binning *et al* [BGR<sup>+</sup>84] obtienen que es necesario tener en cuenta la energía imagen clásica para describir la dependencia de la corriente túnel a través del vacío con la anchura de la barrera, así como su valor absoluto. Por su parte, A. Schenk y G. Heiser incluyen la energía imagen clásica para evitar una masa efectiva en el óxido dependiente de la anchura de la barrera estudiando la corriente túnel en régimen de Fowler-Nordheim.

### 2.3.4. Nivel de Fermi

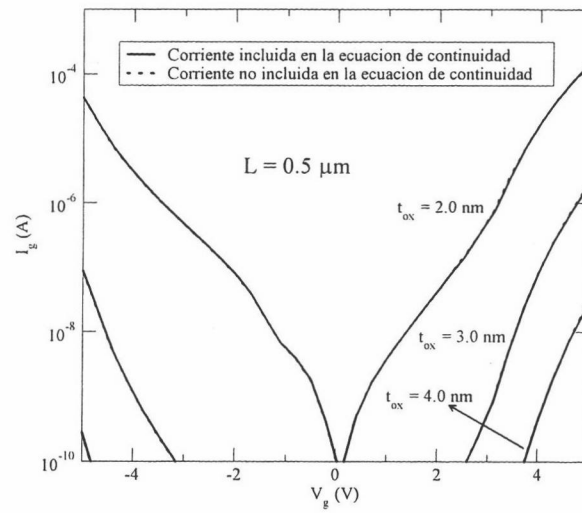
Usualmente, en el cálculo de la corriente túnel a través de heteroestructuras se suele asumir el equilibrio térmico de los portadores en los electrodos. Esto es, el número de electrones perdidos en el cátodo por transiciones túnel a través del óxido de puerta es muy pequeño comparado con el número total de electrones. Por tanto, el nivel de Fermi no se ve afectado y es igual al que se obtiene en el caso de que no existiera corriente de pérdidas. Esta aproximación permite obtener la corriente túnel como un proceso posterior e independiente de la resolución de la ecuación de Poisson).

En el caso de que no se tomase esta aproximación, deberíamos calcular de forma autoconsistente el nivel de Fermi y la corriente túnel a través del óxido de puerta, pues el primero depende de la segunda y viceversa. A. Wettstein ha realizado simulaciones numéricas de este tipo [Wet00]. Para tensiones de puerta negativas, no hay diferencia entre las curvas calculadas de ambas formas, pues el contacto metálico suministra suficientes electrones y éstos no tienen ningún problema para ser recolectados en el sustrato. Sin embargo, obtienen importantes diferencias para tensiones de puerta positivas (con óxidos de espesor igual a 2.0 nm), pues el número de electrones disponibles para efectuar la transición estaría limitado por la generación en el sustrato.

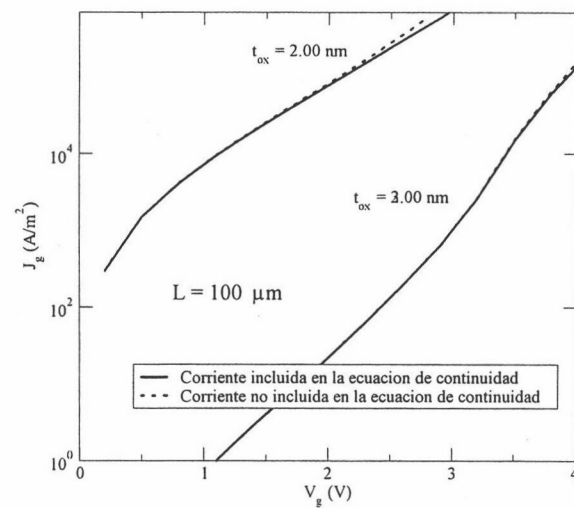
No obstante, el mismo autor explica que esta discrepancia no es tal y que desaparecería si se incluyesen los portadores aportados por los contactos de drenador y fuente mediante mecanismos de difusión y deriva. De hecho, R. Clerc afirma que sólo para óxidos muy delgados ( $\leq 2$  nm) y canales muy largos (sitúa el límite entre 1  $\mu\text{m}$  y 100  $\mu\text{m}$ ) es necesario tener en cuenta la dinámica de los portadores en el sustrato [CSGP02].

Nosotros hemos querido aclarar este punto mediante un simulador bidimensional que resuelva la ecuación de transporte con el modelo de difusión y deriva. Para ello, hemos usado el programa MINIMOS-NT [Ins98] para realizar la simulación de varios transistores MOS. Como puede observarse en las figuras 2.5 y 2.6, sólo hay una pequeña diferencia entre incluir o no la corriente mediante túnel en la ecuación de





**Figura 2.5:** Resultados obtenidos incluyendo o no la corriente por efecto túnel en la ecuación de continuidad. Longitud del canal igual a  $0.5 \mu\text{m}$ .



**Figura 2.6:** Resultados obtenidos incluyendo o no la corriente por efecto túnel en la ecuación de continuidad. Longitud del canal igual a  $100.0 \mu\text{m}$ .

continuidad en el caso con un canal muy largo ( $L = 100 \mu\text{m}$ ), óxido muy delgado ( $t_{ox} = 2.0 \text{ nm}$ ) y tensión de puerta positiva por encima de  $2.5 \text{ V}$ , aproximadamente.

A la vista de los anteriores resultados, hemos decidido realizar el cálculo de la corriente túnel tras la resolución de la ecuación de Poisson de forma no autoconsistente. En primer lugar, porque la diferencia observada es muy pequeña (Fig. 2.6) y, en cualquier caso, la longitud del canal de los dispositivos con óxidos más finos que usaremos para comparar nuestro modelo con resultados experimentales es igual a  $4.65 \mu\text{m}$  [YHHW99], muy por debajo de los  $100 \mu\text{m}$  del dispositivo de la Fig. 2.6. En segundo lugar, porque el cálculo autoconsistente es mucho más inexacto si no se realiza una simulación bidimensional incluyendo la aportación de portadores por parte de los contactos de drenador y fuente. Pero en este caso la simulación sería mucho más lenta, tanto por ser una simulación autoconsistente como por ser bidimensional.

## 2.4. Túnel directo a través del óxido de puerta

### 2.4.1. Introducción

En este apartado buscaremos una expresión para el cálculo de la corriente túnel a través del óxido mediante el procedimiento de Bardeen y Harrison (veáse [Bar61], [Har61] ó [Hes88, Ap.A]), anteriormente presentado. Para ello, primero se determina la probabilidad, por unidad de tiempo de que un solo electrón pase desde un lado de la barrera al otro. Posteriormente, se calcula la corriente túnel total haciendo uso de la expresión obtenida y se muestran varias simulaciones para comprobar el efecto de diversos parámetros de la estructura o del modelo. Finalmente, se analizan los resultados y se comparan con medidas experimentales.

### 2.4.2. Modelo teórico

#### 2.4.2.1. Cálculo de la probabilidad de transición por túnel directo

En este apartado calcularemos la probabilidad por unidad de tiempo,  $\omega(E)$ , de que un electrón con energía  $E$  efectúe una transición túnel de un lado de la barrera

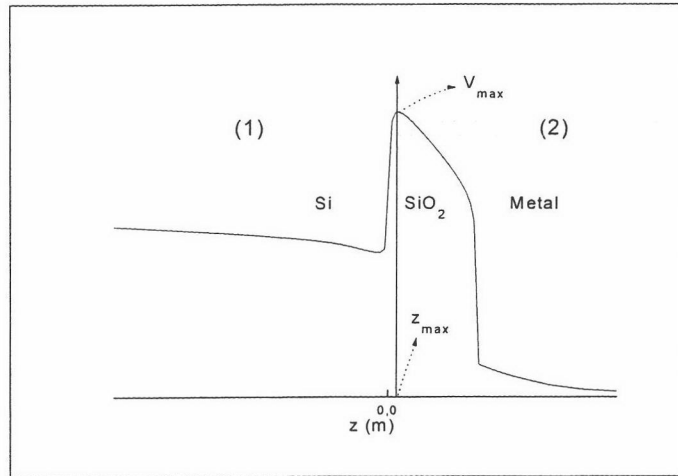


Figura 2.7: Pozo de potencial  $V(z)$  correspondiente al hamiltoniano completo  $H$ .

al otro. Seguiremos el método de Bardeen, comentado anteriormente, en el contexto de las aproximaciones de la función de onda envolvente y de la masa efectiva.

La formulación de Bardeen es equivalente a la aplicación de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a través de la regla de oro de Fermi. Por tanto, debe expresarse el hamiltoniano total como suma de uno del cual conozcamos sus autofunciones más una perturbación.

El hamiltoniano completo que describe al sistema (figura 2.7) es:

$$H = T + V(z), \quad (2.29)$$

donde  $V(z)$  viene dado, en general, por la siguiente expresión [AFS82]:

$$V(z) = E_{c0}(z) - e\phi(z) + E_{im}(z) + E_{ex}(z). \quad (2.30)$$

$E_{c0}(z)$  da cuenta de la discontinuidad en la banda de conducción,  $\phi(z)$  es el potencial electrostático,  $E_{im}(z)$  es la energía imagen y  $E_{ex}(z)$  el término de correlación-intercambio, en el caso de que se consideren éstas dos últimas contribuciones.

Para poner el hamiltoniano en la forma adecuada para aplicar la teoría de perturbaciones, descomponemos el sistema en las dos situaciones correspondientes a los

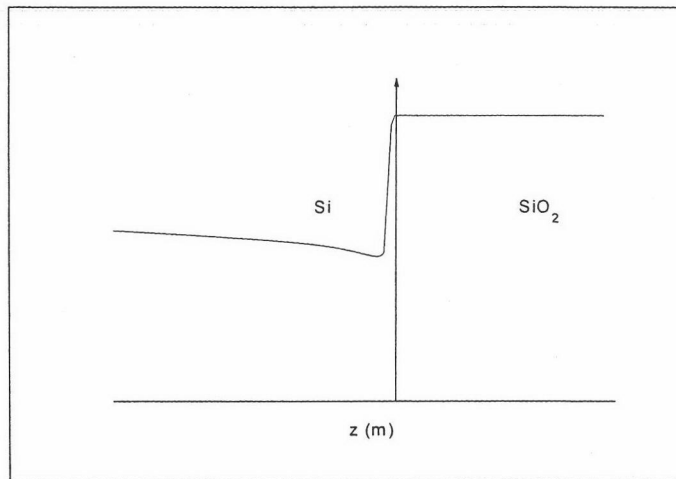


Figura 2.8: Pozo de potencial correspondiente al hamiltoniano  $H_1$ .

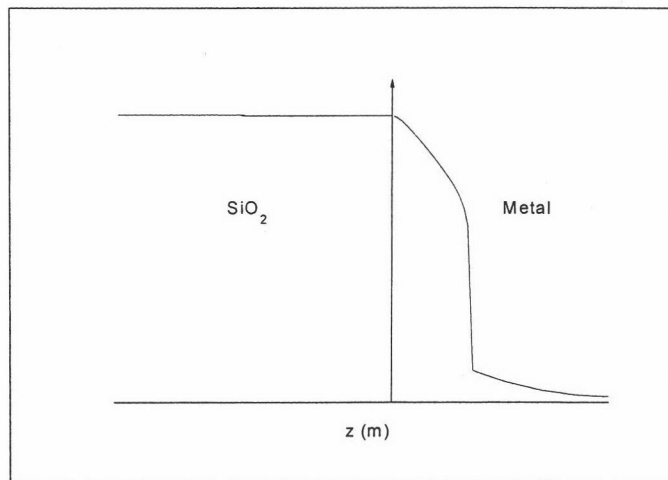


Figura 2.9: Pozo de potencial correspondiente al hamiltoniano  $H_2$ .

estados inicial y final (figuras 2.8 y 2.9):

$$H_1 = \begin{cases} T + V(z) = H & \text{si } z < z_{\text{máx}} \\ T + V_{\text{máx}} & \text{si } z > z_{\text{máx}} \end{cases}, \quad (2.31a)$$

$$H_2 = \begin{cases} T + V_{\text{máx}} & \text{si } z < z_{\text{máx}} \\ T + V(z) = H & \text{si } z > z_{\text{máx}} \end{cases}, \quad (2.31b)$$

donde  $z_{\text{max}}$  es la posición en la que el pozo alcanza su máximo,  $V_{\text{max}}$ .

En lo sucesivo, denominaremos  $\Psi_1$  a las autofunciones del hamiltoniano  $H_1$  y  $\Psi_2$  a las de  $H_2$ . A la vista de la anterior definición podemos poner  $H$  como:

$$H = H_1 + H', \quad (2.32)$$

donde:

$$H' = \begin{cases} 0 & \text{si } z < z_{\text{máx}} \\ H_2 - H_1 & \text{si } z > z_{\text{máx}} \end{cases}. \quad (2.33)$$

Ya estamos en condiciones de aplicar la regla de oro de Fermi:

$$\omega_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{12}|^2, \quad (2.34)$$

donde:

$$\begin{aligned} H'_{12} &= \int d^3\vec{r} \Psi_2^*(\vec{r}) H' \Psi_1(\vec{r}) = \\ &= \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2\vec{R} \Psi_2^*(\vec{r}) (H_2 - H_1) \Psi_1(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Las funciones  $\Psi_1(\vec{r})$  y  $\Psi_2(\vec{r})$  son los autovectores de  $H_1$  y  $H_2$ , respectivamente y vienen dadas por:

$$\Psi_1(\vec{r}, \vec{K}_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \xi_1(z) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}}, \quad (2.36)$$

$$\Psi_2(\vec{r}, \vec{K}'_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{A}} \xi_2(z) e^{i\vec{K}'_{\parallel} \cdot \vec{R}}. \quad (2.37)$$

Si  $\Psi_2$  y  $\Psi_1$  son conocidas, como en el caso aquí tratado, se podría usar directamente la anterior ecuación (2.35). Sin embargo, vamos a realizar algunas manipulaciones

más para expresar  $\omega(E)$  de una forma más útil y general, donde no aparezcan los hamiltonianos  $H_1$  ni  $H_2$ , sino sólo las funciones de onda envolventes evaluadas en  $z_{\text{máx}}$ .

Como paso previo, calcularemos la siguiente integral, en la que se ha expresado el operador energía cinética según la aproximación de la masa efectiva, pero con una masa efectiva en la dirección  $z$  dependiente de la posición:

$$\int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* T \Psi_1 = \frac{-\hbar^2}{2} \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* \left( \frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi_1 - \frac{\hbar^2}{2} \int_A d^2 \vec{R} \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \Psi_2^* \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(z)} \frac{\partial \Psi_1}{\partial z}. \quad (2.38)$$

Resolviendo por partes, dos veces, la última integral y aplicando las condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} \Psi_1(z \rightarrow \infty) &= 0, \\ \frac{\partial \Psi_1}{\partial z}(z \rightarrow \infty) &= 0, \end{aligned} \quad (2.39)$$

se obtiene:

$$\int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \Psi_2^* \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(z)} \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} = \frac{2i}{\hbar} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}) + \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \Psi_1 \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(z)} \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial z}, \quad (2.40)$$

donde:

$$J_{12}^{\Psi}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{2im_z(z_{\text{máx}})} \left[ \Psi_1 \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial z} - \Psi_2^* \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{\text{máx}}}. \quad (2.41)$$

A continuación usaremos las anteriores expresiones para manipular la siguiente integral, de forma que consigamos que el operador  $H_2$  actúe sobre  $\Psi_2^*$  en lugar de sobre  $\Psi_1$ . Para ello, desarrollamos la siguiente integral:

$$\begin{aligned} & \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* H_2 \Psi_1 = \\ &= \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_1 \left\{ \frac{-\hbar^2}{2} \left[ -\frac{k_x^2}{m_x} - \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) \right\} \Psi_2^* + \\ & \quad + \int_A d^2 \vec{R} \left[ -i\hbar J_{12}^{\Psi}(\vec{R}) \right]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Para obtener esta ecuación se ha aplicado la expresión (2.40) y  $\vec{k}_{||} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$ . A continuación en el integrando se suma y se resta la misma cantidad:

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left\{ \frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} \Psi_2^* + \frac{\hbar^2}{2} \left\{ -\frac{k_x^2}{m_x} - \frac{-k_y^2}{m_y} \right\} \Psi_2^*$$

y teniendo en cuenta que:

$$\int_A d^2 \vec{R} e^{i(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) \cdot \vec{R}} = \delta_{\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}},$$

se obtiene la siguiente igualdad:

$$\int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* H_2 \Psi_1 = \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_1 H_2 \Psi_2^* - i\hbar \int_A d^2 \vec{R} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}). \quad (2.43)$$

Ya podemos sustituir en la expresión (2.35) para obtener:

$$\begin{aligned} H'_{12} &= \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_1 H_2 \Psi_2^* - \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* H_1 \Psi_1 \\ &\quad - i\hbar \int_A d^2 \vec{R} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Finalmente, teniendo en cuenta que  $\Psi_1$  y  $\Psi_2$  son, respectivamente, autofunciones de los hamiltonianos  $H_1$  y  $H_2$  con autovalores  $E_1$  y  $E_2$ , se concluye que:

$$H'_{12} = (E_2 - E_1) \int_{z_{\text{máx}}}^{\infty} dz \int_A d^2 \vec{R} \Psi_2^* \Psi_1 - i\hbar \int_A d^2 \vec{R} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}). \quad (2.45)$$

Como  $\Psi_1$  es una autofunción de  $H_1$  con el mismo autovalor  $E_1$  que  $\Psi_2$  es autofunción de  $H_2$ ,  $E_2$ , se tiene que:

$$H'_{12} = -i\hbar \int_A d^2 \vec{R} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}). \quad (2.46)$$

El siguiente paso para obtener la probabilidad de que un electrón atraviese la barrera por efecto túnel es determinar los valores de  $J_{12}^{\Psi}(\vec{R})$  y de la anterior integral (2.46).

Sustituyendo las funciones de onda  $\Psi_1$  y  $\Psi_2$ , (2.36) y (2.37), en (2.41) para después poder calcular  $H'_{12}$  se obtiene:

$$\begin{aligned} J_{12}^{\Psi}(\vec{R}) &= \frac{\hbar}{2im_{ox}} \frac{1}{A} e^{i(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) \cdot \vec{R}} \left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2^*}{\partial z} - \xi_2^* \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{\text{máx}}} = \\ &= \frac{1}{A} e^{i(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) \cdot \vec{R}} \cdot J_{12}^{\xi}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

donde se ha definido:

$$J_{12}^{\xi} = \frac{\hbar}{2im_{ox}} \left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2^*}{\partial z} - \xi_2^* \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{\text{máx}}}. \quad (2.48)$$

Finalmente, se sustituye en (2.46) y obtenemos:

$$H'_{12} = \frac{-i\hbar J_{12}^{\xi}}{A} \int_A d^2 \vec{R} e^{i(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) \cdot \vec{R}}. \quad (2.49)$$

Y, por tanto:

$$H'_{12} = -i\hbar J_{12}^{\xi} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}. \quad (2.50)$$

Sustituyendo en (2.34) resulta finalmente:

$$\omega_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{12}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{2m_{ox}(z_{máx})} \right)^2 \left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2^*}{\partial z} - \xi_2^* \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{máx}}^2 \delta_{\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}}. \quad (2.51)$$

Como puede verse, la formulación que estamos siguiendo implica la conservación del momento paralelo  $\vec{k}_{||}$ , pues el hamiltoniano  $H'$  considerado aquí no incluye ningún termino que conecte estados de  $H_1$  y  $H_2$  con diferente momento paralelo.

Por otro lado, las funciones de onda unidimensionales vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \xi_1(z > z_{máx}) &= \xi_1(z_{máx}) \cdot e^{-\kappa_1(z-z_{máx})}, \\ \xi_2(z < z_{máx}) &= \xi_2(z_{máx}) \cdot e^{\kappa_2(z-z_{máx})}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

con:

$$\kappa \equiv \kappa_1 = \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m_{ox}}{\hbar^2} (V_{máx} - E)}. \quad (2.53)$$

Por lo que:

$$\left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2^*}{\partial z} - \xi_2^* \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{máx}}^2 = 4\kappa^2 |\xi_1(z_{máx}) \xi_2(z_{máx})|^2. \quad (2.54)$$

En esta igualdad se pone de manifiesto que la probabilidad de que el electrón atraviese la barrera por efecto túnel es mayor cuanto mayor sea la penetración de las funciones de onda en la barrera. Nótese que la probabilidad de transición en un sentido es igual a la probabilidad de transición en el sentido opuesto.

#### 2.4.2.2. Cálculo de la corriente túnel directa

La corriente neta debida a las transiciones túnel a través del aislante de puerta es la diferencia entre las corrientes en uno y otro sentido. En el caso de que en el



semiconductor los portadores tengan su energía transversal cuantizada (gas 2D), la corriente puede expresarse como:

$$J = J_{1 \rightarrow 2} - J_{2 \rightarrow 1} = e \sum_{\mu} \int_{E_{||}} dE_{||} \omega(E_{z\mu}) \rho_1(E) \rho_2(E) (f_1(E) - f_2(E)). \quad (2.55)$$

Como puede observarse, la energía se ha separado en dos componentes, transversal y paralela:  $E = E_{z\mu} + E_{||}$ . La sumatoria se realiza sobre todas las subbandas (indexadas por  $\mu$ ). Los subíndices especifican el lado de la barrera de la magnitud a la que acompañan,  $f(E)$  es la función de ocupación de los estados y  $\omega(E)$  es la probabilidad de que un electron efectúe la transición túnel y pase de un lado de la barrera al otro. Finalmente,  $\rho$  representa la densidad de estados. Asumiendo que el lado 1 es el del semiconductor,  $\rho_1$  es la densidad bidimensional de estados con energía  $E_{||}$ :

$$\rho_1(E) = \rho_1^{2D}(E_{||}) = g_v \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi \hbar^2}, \quad (2.56)$$

donde  $g_v$  es la degeneración de los valles correspondientes a la subbanda. Puesto que la energía paralela se conserva, la densidad de estados en la puerta es unidimensional:

$$\rho_2(E) = \rho_2^{1D}(E_{z\mu}) = \frac{L_z m_z}{\pi \hbar^2 \kappa_z}. \quad (2.57)$$

$L_z$  es una longitud a lo largo del eje transversal ( $z$ ) y se cancelará con el factor de normalización de las funciones de onda, como se verá más adelante. No se ha incluido la degeneración del espín porque se admite que se conserva durante la transición.

Con una polarización tal que no exista cuantización de los portadores, la corriente asociada a cada tipo de valle es:

$$J_{\nu} = J_{1 \rightarrow 2} - J_{2 \rightarrow 1} = e \int_{E_z} dE_z \omega(E_z) \rho_1^{1D}(E_{z1}) \rho_2^{1D}(E_{z2}) \int_{E_{||}} dE_{||} \rho_1^{2D}(E_{||}) (f_1(E) - f_2(E)). \quad (2.58)$$

Donde las densidades de estados se han desglosado según:

$$\rho_i(E_z, E_{||}) = \rho_i^{1D}(E_z) \cdot \rho_i^{2D}(E_{||}). \quad (2.59)$$

Ya estamos en condiciones de obtener la corriente por túnel directo utilizando la expresión anteriormente calculada que nos proporciona el valor de  $\omega(E)$  (2.51). Obsérvese que según el modelo empleado para el cálculo de la probabilidad de transición

(expuesto en el apartado 2.4.2.1), la obtención de esta cantidad no depende de que ninguno de los estados sea bi o tridimensional (ligado o no). Sustituyendo (2.51) en (2.55) y usando la estadística de Fermi-Dirac para las funciones de ocupación:

$$f_1 = \frac{1}{1 + e^{(E_{||} + E_z - E_{F_1})/KT}}, \quad (2.60)$$

$$f_2 = \frac{1}{1 + e^{(E_{||} + E_z - E_{F_2})/KT}} = \frac{1}{1 + e^{(E_{||} + E_z - E_{F_1} + qV_g)/KT}}, \quad (2.61)$$

obtenemos finalmente la corriente por túnel directo [JMGP<sup>+</sup>02] (caso 2D):

$$J = \frac{eKT}{4\pi\hbar} \sum_{E_z\mu} \frac{g_v \sqrt{m_x m_y} m_z}{m_{ox}(z_{max})^2 \kappa_z} \left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial z} - \xi_2 \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{m\acute{a}x}}^2 \ln \left( \frac{e^{(-E_z + E_F)/KT} + 1}{e^{(-E_z + E_F - qV_g)/KT} + 1} \right). \quad (2.62)$$

La longitud  $L_z$  que aparece en la expresión de la densidad de estados (2.57) se elimina con la normalización de la función de onda  $\xi_2$ . En efecto,  $\xi_2$  será esencialmente, si despreciamos el pequeño trozo que se introduce en el óxido, de la forma  $A \cdot \text{sen}(\kappa_z z + \phi)$ . Si le imponemos la condición de normalización en la distancia  $L_z$ :

$$\int_0^{L_z} A^2 \cdot \text{sen}^2(\kappa_z z + \phi) dz = 1, \quad (2.63)$$

hacemos  $\text{sen}^2(\kappa_z z + \phi) = \frac{1 - \cos[2(\kappa_z z + \phi)]}{2}$  y despreciamos la integral en el coseno (que como mucho será el área de uno de los lóbulos del coseno), encontramos que la constante de normalización  $A$  debe valer  $\sqrt{2/L_z}$ .

En el caso en el que la energía transversal de los electrones no está cuantizada (3D), la corriente viene dada por:

$$J_\nu = \frac{eg_v KT}{8\pi^2 \hbar} \frac{\sqrt{m_x m_y} m_z}{m_{ox}(z_{max})^2} \times \int_{E_z} \left[ \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial z} - \xi_2 \frac{\partial \xi_1}{\partial z} \right]_{z=z_{m\acute{a}x}}^2 \frac{1}{\sqrt{E_{z1} E_{z2}}} \ln \left( \frac{e^{(-E_z + E_{F1})/KT} + 1}{e^{(-E_z + E_{F1} - qV_g)/KT} + 1} \right) dE_z. \quad (2.64)$$

Como puede verse, para el cálculo de la corriente por túnel directo usando el método de Bardeen se necesita conocer las funciones de onda de los estados inicial y final. En la bibliografía pueden encontrarse diversos procedimientos para su cálculo [SH97], [Wet00], [CS01], [CSGP02]. En el presente trabajo, se han obtenido numéricamente mediante la resolución autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger.

### 2.4.3. Simulaciones y resultados

Antes de comparar los resultados del modelo con datos experimentales, vamos a estudiar en este subapartado la dependencia de las curvas de corriente túnel con algunos de los parámetros del modelo o del dispositivo.

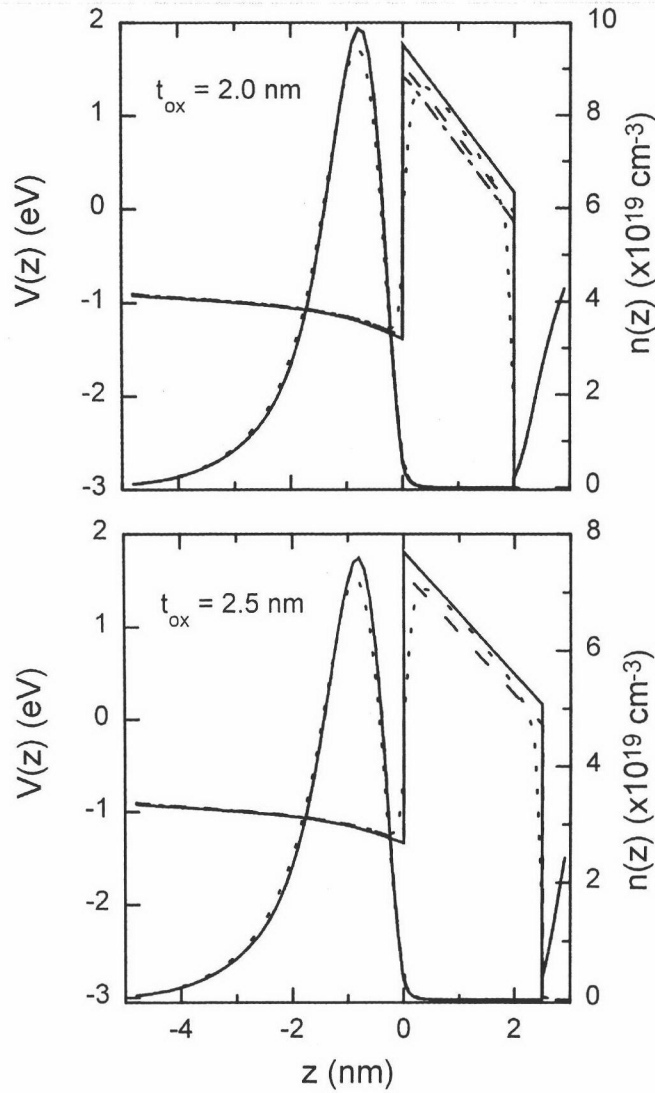
#### 2.4.3.1. Energía imagen y altura de la barrera

Como se ha mostrado en el capítulo 1, la energía imagen disminuye y redondea la barrera (figuras 1.3 y 2.10). Se plantea entonces la cuestión de si es posible reproducir el efecto de la energía imagen sobre las curvas de corriente túnel con un simple cambio en el parámetro  $\phi_B$  (altura de la barrera), cuyo valor es habitualmente usado como parámetro de ajuste en problemas de corriente túnel.

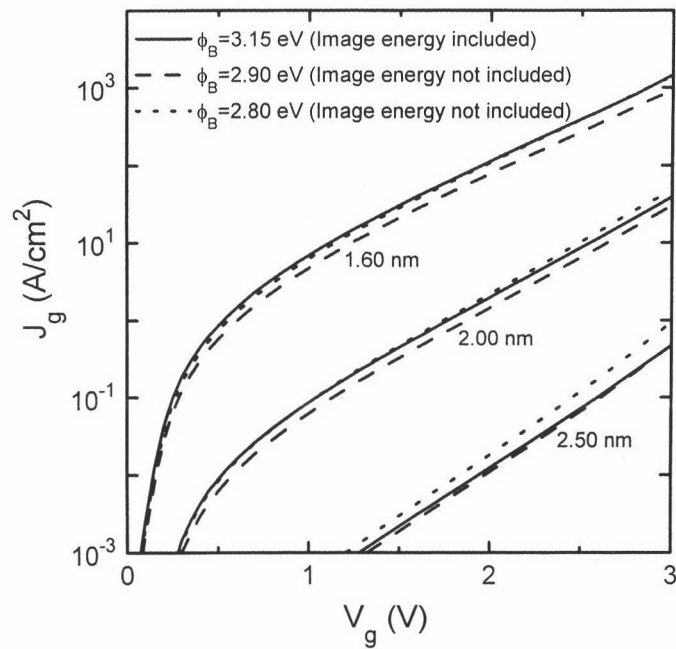
Para averiguar esto, hemos llevado a cabo las simulaciones mostradas en la Fig. 2.11, realizadas con tres espesores diferentes de la barrera. En todos los casos, las curvas calculadas incluyendo la energía imagen son casi exactamente reproducidas por otras simulaciones que no la han tenido en cuenta, pero en las cuales la altura de la barrera,  $\phi_B$ , se ha disminuido. Por tanto, en principio podría evitarse la inclusión de la energía imagen, especialmente teniendo en cuenta que a menudo se usa  $\phi_B$  como parámetro de ajuste.

Sin embargo, como se observa en la figura 2.11, el valor en el que hemos tenido que disminuir la altura de la barrera no es el mismo en todos los casos, sino que depende del espesor del óxido ( $t_{ox}$ ). Por tanto, la energía imagen podría explicar una aparente reducción de la altura de la barrera cuando el óxido se hace más delgado. Esta dependencia de  $\phi_B$  con  $t_{ox}$  ha sido descrita en las referencias [HY85] y [SHF84], y aparecerá también en el siguiente apartado (2.4.4), cuando comparemos con resultados experimentales.

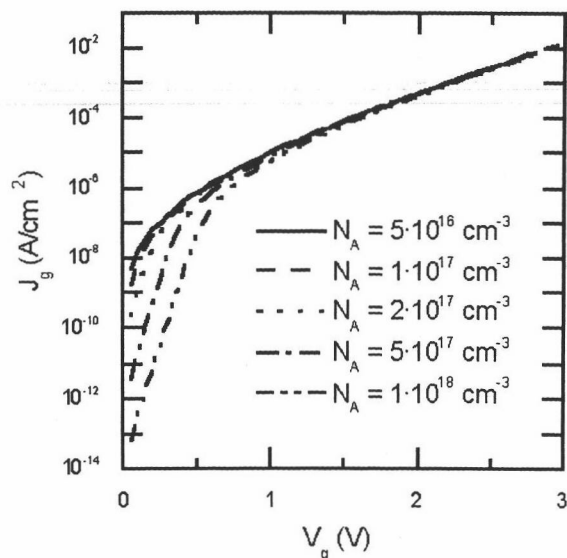
Esta dependencia de la influencia de la energía imagen sobre la altura de la barrera con el espesor del óxido de puerta se muestra también en la Fig. 2.10. La energía imagen disminuye el pozo  $V(z)$  cerca de las interfaces, pero no lejos de ellas (centro de la barrera). Por tanto, cuanto más delgado sea el óxido, mayor será la importancia de la disminución de la barrera. Es por esto por lo que si el espesor del óxido decrece,



**Figura 2.10:** Influencia de la energía imagen y de la altura de la barrera sobre el pozo  $V(z)$  y sobre la densidad de electrones,  $n(z)$ . Los parámetros del dispositivo son los mismos que los de la Fig. 2.11. La tensión de puerta es  $V_g(z) = 2.0$  V. Línea continua:  $\phi_B = 3.15$  eV, sin incluir la energía imagen ( $E_{im}$ ). Línea discontinua:  $\phi_B = 2.9$  eV, sin  $E_{im}$ . Línea de rayas y puntos:  $\phi_B = 2.8$  eV, sin  $E_{im}$ . Línea punteada:  $\phi_B = 3.15$  eV, con  $E_{im}$ .



**Figura 2.11:** Influencia de la energía imagen y de la altura de la barrera sobre las curvas de corriente túnel obtenidas mediante simulación ( $N_{sub} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (P);  $N_{poly} = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  (N);  $m_{ox}(0) = 0.6m_0$ ).

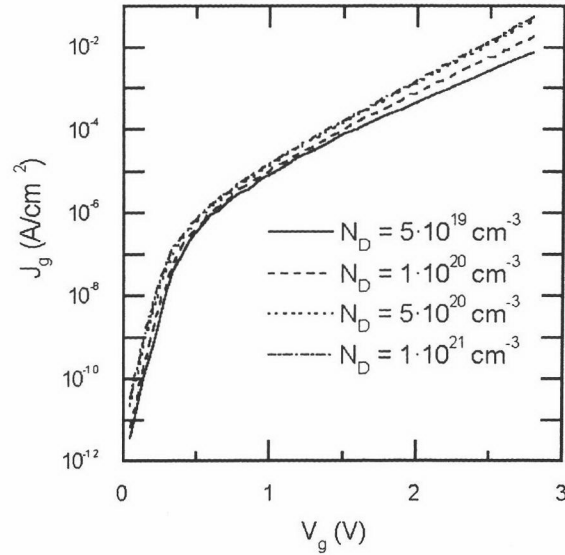


**Figura 2.12:** Influencia del dopado del sustrato ( $t_{ox} = 2.56\text{nm}$ ;  $N_D = 5 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$ ).

$\phi_B$  debe disminuirse en una cantidad mayor. La figura (2.11) muestra que disminuir la altura de la barrera en los casos con  $t_{ox} = 2.00\text{ nm}$  y  $t_{ox} = 1.60\text{ nm}$  en la misma cantidad que en el caso con  $t_{ox} = 2.50\text{ nm}$  (y no incluir la energía imagen) provoca que la curva obtenida esté por debajo de la simulación en la que se incluye la energía imagen [JMGP<sup>+</sup>01].

#### 2.4.3.2. Influencia del dopado del sustrato y del polisilicio de puerta

En la figura 2.12 se han representado las curvas obtenidas cuando en una misma estructura cambiamos el dopado del sustrato. Como puede verse, la influencia de este parámetro es mínima, excepto a bajas tensiones de puerta. La corriente túnel crece conforme decrece el dopado del sustrato. Esto se debe a que cuando el dopado es menor, la formación de la capa de inversión requiere menos voltaje de puerta, es decir, la tensión umbral es menor y, para un mismo voltaje, la densidad de electrones en inversión es mayor. Por el contrario, si el dopado es mayor, se necesita mayor voltaje para alcanzar la misma población en inversión. Esta tendencia es más acusada con bajos voltajes de puerta, para los cuales se aprecia que la diferencia entre la corriente

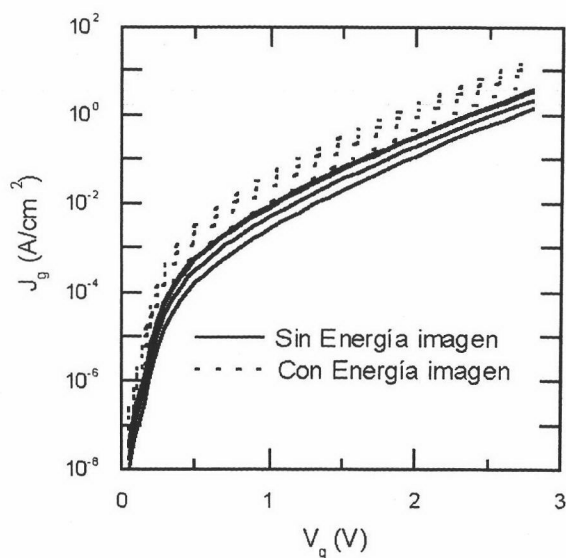


**Figura 2.13:** Influencia del dopado del polisilicio de puerta ( $N^+$ ) ( $t_{ox} = 2.56 \text{ nm}$ ;  $N_A = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ).

túnel con uno u otro dopado puede ser de varios órdenes de magnitud. Sin embargo, al crecer la tensión de puerta la dependencia con el dopado del substrato prácticamente desaparece. Esto se debe a que cuanto mayor sea la concentración de impurezas en el substrato, menor será la concentración de electrones en inversión necesaria para curvar las bandas hasta cierto valor (o, mejor, para conseguir cierto campo promedio). Esto es válido mientras la densidad de carga en inversión y en depleción es comparable. Cuando el voltaje de puerta es tal que la primera es muy superior a la segunda, la influencia del dopado de puerta desaparece, como puede observarse en la figura 2.12.

Por otra parte, en la gráfica 2.13 se muestra la influencia del dopado de puerta. Como puede comprobarse, cuanto menor es el dopado, menor es también la corriente túnel. Además aumenta la separación entre las curvas al aumentar la tensión de puerta. Sin embargo, por encima de aproximadamente  $N_D = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , el dopado del polisilicio de puerta no influye sobre la corriente a través del óxido.

Cuando el dopado del polisilicio de puerta es mayor se obtiene una mayor corriente debido a que la depleción en el polisilicio es menor (cae menos tensión de la aplicada



**Figura 2.14:** Influencia del grosor del óxido sobre la corriente túnel. Los espesores correspondientes a las curvas son: 2.00 nm, 2.01 nm, 2.05 nm y 2.10 nm. ( $N_A = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ;  $N_D = 1 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ )

a la puerta) que cuando el dopado es menor. Por tanto, mayor voltaje cae en el óxido y en el sustrato, por lo que la población de electrones en inversión será mayor para una misma tensión de puerta. La desaparición de la influencia con el dopado a partir de cierto valor de la concentración se debe a que con dopados tan altos se puede despreciar la depleción en el polisilicio en cualquier caso.

### 2.4.3.3. Influencia del espesor del óxido de puerta

En la figura 2.14 se ha representado la corriente túnel en dispositivos en los que se ha variado ligeramente el espesor del óxido. La máxima diferencia es de  $1 \text{Å}$ , más que suficiente para desplazar considerablemente las curvas, de forma que la curva correspondiente al óxido más grueso y en la que se ha incluido la energía imagen en el cálculo llega casi a coincidir con la correspondiente al óxido más fino sin incluir el término imagen.

Con esto queremos señalar que se debe actuar con cautela al ajustar curvas de



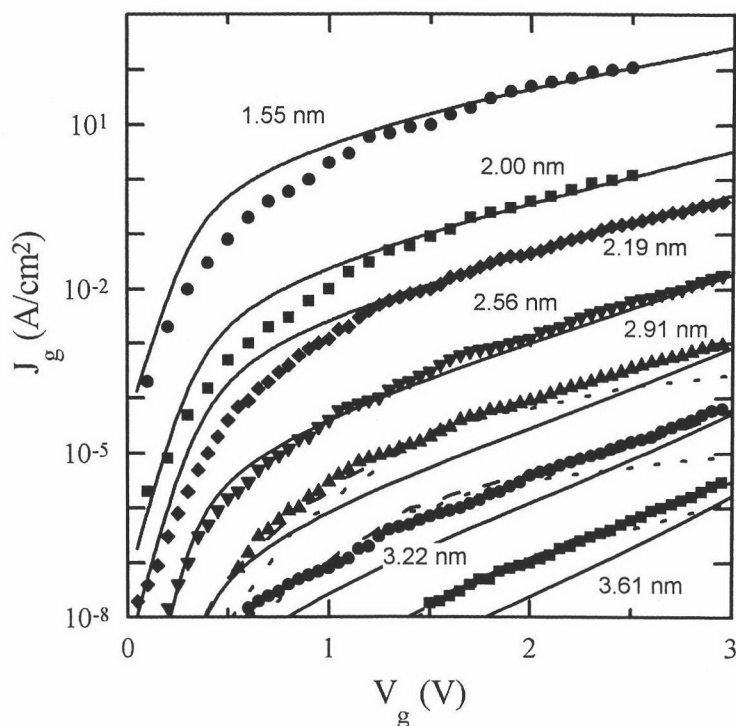
corriente túnel e interpretar el efecto de algún parámetro del modelo, pues una indeterminación en la medida del espesor del óxido de sólo 1 Å es capaz de inutilizar, por ejemplo, el efecto de añadir el término imagen al cálculo de la corriente. Normalmente, las medidas de espesores de óxidos se suelen realizar mediante dos métodos (ajuste de curvas C-V y elipsometría), que a menudo difieren entre sí ([OF99], [LBY99, Fig. 8] y [RTB96]) y que tienen una incertidumbre del orden de 1.5 Å [RRY99].

Finalmente, señalaremos que una pequeña variación en el espesor del óxido no cambia apreciablemente la pendiente de las curvas obtenidas, por lo que si bien podríamos achacar el desplazamiento de nivel de las curvas experimentales y obtenidas mediante simulación a un error en la medida de  $t_{ox}$ , no podemos hacer lo mismo con la diferencia de pendiente.

#### 2.4.4. Comparación con resultados experimentales

En la figura 2.15 mostramos datos experimentales procedentes de las referencias [LBY99] y [YHHW99], junto con los resultados de nuestro modelo. Hemos usado la expresión (2.25), recientemente propuesta por M. Städele [STH01], para obtener la masa efectiva dependiente de la energía de los electrones en el óxido. Para la masa efectiva en el fondo de la banda de conducción hemos tomado el valor  $0.6 \cdot m_0$  (que es el valor usualmente asumido en la relación de dispersión de tipo Franz [Wei82]). Para ajustar los datos, se ha usado un valor de la altura de la barrera igual a 3.5 eV. La energía imagen se ha incluido en las simulaciones. No se han usado parámetros de ajuste dependientes del espesor del óxido (es decir, todas las curvas han sido ajustadas empleando los mismos valores de  $m_{ox}(0)$  y  $\phi_B$ ) [JMGP<sup>+</sup>02].

Como puede observarse, los resultados proporcionados por las simulaciones (teniendo en cuenta sólo la corriente por túnel directo) reproducen correctamente los datos experimentales correspondientes a los óxidos más finos que 2.91 nm, excepto con bajas polarizaciones. Sin embargo, en el caso de las muestras con óxidos más gruesos, la corriente debida únicamente al túnel directo queda por debajo de la curva experimental. La diferencia se atribuye a la corriente por túnel elástico asistido por trampas nativas [WSSF97], [GSSK99]. Para reproducir este fenómeno, hemos inclui-



**Figura 2.15:** Densidad de corriente túnel a través de óxidos de puerta con espesores en el rango 1.55 nm-3.61 nm. Símbolos: datos experimentales procedentes de [LBY99] y [YHHW99] (los dos óxidos más delgados). Línea continua: densidad de corriente por túnel directo. Línea punteada: densidad de corriente por túnel elástico asistido por trampas. Línea discontinua: densidad de corriente total. Se ha incluido la energía imagen. La altura de la barrera,  $\phi_B$ , es 3.5 eV y  $m_{ox}(0) = 0.6m_0$ .

do su contribución mediante el modelo que se presentará en la sección 3.3. En la tabla 2.1 se recogen los parámetros de las distribuciones de trampas supuestas para explicar el exceso de corriente.

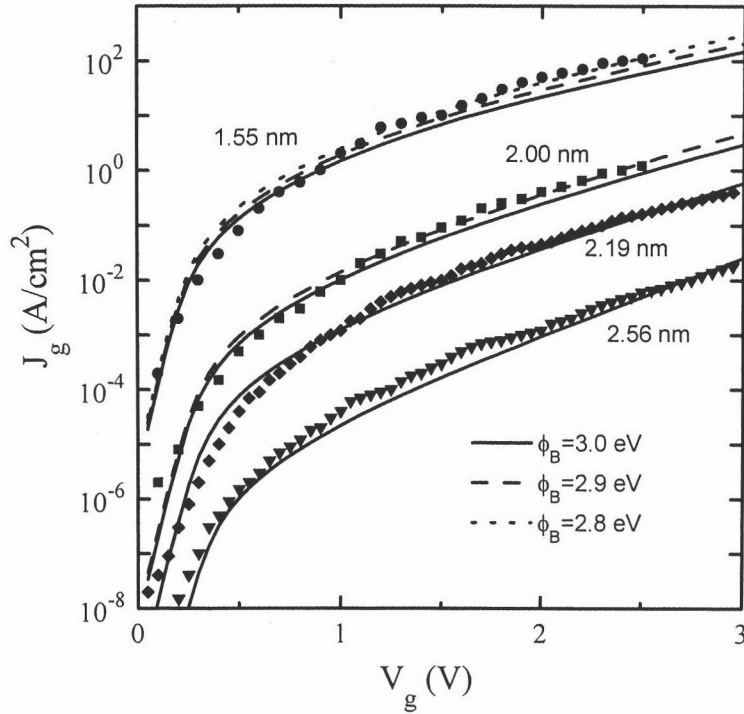
$N_0$  es el máximo de la distribución energética de las trampas.  $E_{min}$  y  $E_{max}$  son las posiciones de las trampas menos y más profundas, respectivamente, respecto del fondo de la banda de conducción del óxido.

	$t_{ox} = 2.91 \text{ nm}$	$t_{ox} = 3.22 \text{ nm}$	$t_{ox} = 3.61 \text{ nm}$
$N_0 \text{ (cm}^{-3}\text{eV}^{-1}\text{)}$	$2.6 \times 10^{12}$	$6.5 \times 10^{11}$	$1.9 \times 10^{11}$
$E_{min} \text{ (eV)}$	2.0	2.2	1.9
$E_{max} \text{ (eV)}$	3.0	3.2	2.9

**Cuadro 2.1:** Parámetros de la distribución de trampas usados para ajustar los datos experimentales mostrados en la Fig. 2.15.  $N_0$  es el máximo de la distribución energética de las trampas.  $E_{min}$  y  $E_{max}$  son las posiciones de las trampas menos y más profundas, respectivamente, respecto del fondo de la banda de conducción del óxido.

Estos datos experimentales también pueden ser reproducidos sin incluir la energía imagen en el cálculo del pozo de potencial  $V(z)$  (ecuación (2.30)), aunque entonces se observa una débil dependencia de la altura de la barrera con el espesor del óxido. En este caso, se ha usado el valor de 3.2 eV para la altura de la barrera,  $\phi_B$ , pero se obtienen ligeramente mejores resultados si usamos los valores  $\phi_B = 3.1$  eV para el óxido de espesor  $t_{ox} = 2.19$  nm y  $\phi_B = 3.0$  eV para la muestra con  $t_{ox} = 1.55$  nm. En estas simulaciones, los valores que describen la distribución de las trampas son los mismos que cuando se incluye el término imagen (los mostrados en la tabla 2.1), pero la distribución está desplazada 0.3 eV hacia el fondo de la banda de conducción del óxido.

La discrepancia observada con bajas polarizaciones en el caso de los muestras con óxidos más delgados que 2.5 nm se puede eliminar si tenemos en cuenta sólo la contribución de los electrones pertenecientes a los valles perpendiculares, como puede observarse en la figura 2.16. Podemos justificar el hecho de no incluir la corriente de los valles paralelos si tenemos en cuenta uno de los resultados aportados en la referencia [STH01]: el momento paralelo de los electrones se conserva durante la transición túnel



**Figura 2.16:** Contribución a la densidad de corriente por túnel directo de los electrones procedentes únicamente de los valles perpendiculares. La energía imagen no ha sido incluida y  $m_{ox}(0) = 0.6m_0$ . Símbolos: los mismos datos experimentales que los mostrados en la figura 2.15.

si el óxido es más delgado que un cierto valor crítico, situado entre 1 y 3 nm. En el caso en el que se conserva el momento paralelo, los electrones pertenecientes a los valles paralelos ven una barrera más alta [STH01], [WH83] (como se ilustra en la Fig. 2.4) y, por tanto, su contribución puede despreciarse.

Por otro lado, al igual que sucedía en el caso en el que se tenía en cuenta la contribución de todos los valles, hay que asumir una altura de la barrera dependiente del espesor del óxido si la energía imagen no se incluye, como se ilustra en la Fig. 2.16.

La razón de esta dependencia con el espesor del óxido puede deberse a la acción conjunta de los siguientes fenómenos:

1. Cuanto más delgado es el óxido, mayor es la influencia de la energía imagen sobre la forma de la barrera. Como consecuencia, la altura de la barrera debería disminuirse cuando el óxido se hace más delgado si la energía imagen no se tiene en cuenta en las simulaciones.
2. Como se ha comentado anteriormente, la altura de la barrera es dependiente del espesor del óxido para aquellos que son más delgados que un cierto valor crítico. Por encima del valor crítico, el momento paralelo no se conserva y desde todos los valles se ve la misma barrera [STH01]. Por debajo del valor crítico, el momento paralelo se conserva y los electrones pertenecientes a los valles perpendiculares ven una barrera notablemente inferior. Entre estos dos casos extremos, se tiene una barrera efectiva dependiente del espesor.
3. La región de transición no estequiométrica situada en las interfaces podría inducir un cambio, dependiente del espesor del aislante, en la altura de la barrera, como han sugerido algunos autores [KMMH00], [HY85].

Para evitar tener que usar una altura de la barrera dependiente del espesor del óxido, hemos incluido la energía imagen en el cálculo de las subbandas y de las probabilidades de transición por túnel directo. Hemos encontrado que es posible ajustar datos experimentales pertenecientes a muestras con óxidos de espesores en el rango 1.55-2.56 nm usando la misma altura de la barrera ( $\phi_B = 3.25$  eV) sin parámetros

de ajuste si la energía imagen se tiene en cuenta. Estas curvas no se han reproducido para evitar repetición.

## 2.5. Resumen y conclusiones

Tras una breve introducción, hemos comenzado este capítulo con una recapitulación de los métodos habitualmente empleados para el cálculo de la corriente túnel en heteroestructuras, haciendo especial hincapié en el que se ha seguido en el presente trabajo: el método de Bardeen. Seguidamente, hemos realizado una revisión de los problemas, aún bajo discusión muchos de ellos, relativos a las transiciones túnel a través del óxido de puerta en dispositivos MOS.

Posteriormente, hemos aplicado el método de Bardeen para obtener las expresiones necesarias para el cálculo de la corriente túnel tanto desde un canal de inversión (sistema 2D) como desde un sistema 3D.

Mediante el ajuste de curvas experimentales pertenecientes a muestras con óxidos menores que 3.5 nm, hemos podido comprobar que el uso de la expresión recientemente propuesta por M. Städele para la masa efectiva en el óxido en función de la energía evita el empleo de una masa efectiva dependiente del espesor del óxido. También hemos comprobado que, para los óxidos más delgados estudiados y con bajas polarizaciones, se obtienen mejores resultados incluyendo tan sólo la contribución de los valles doblemente degenerados o perpendiculares (el substrato de las muestras tiene orientación  $\langle 100 \rangle$ ). Esta suposición se apoya en que por debajo de un cierto espesor crítico, situado entre 1.0 y 3.0 nm, el momento paralelo de los electrones se conserva y por tanto los electrones situados en los valles paralelos ven una barrera más alta.

Por otro lado, hemos comprobado que la inclusión de la energía imagen en el cálculo del potencial  $V(z)$  permite usar un único valor de la altura de la barrera, independiente del espesor del óxido. Esto no implica, a nuestro parecer, que la dependencia de la altura de la barrera observada por varios autores (usada habitualmente como parámetro de ajuste) con el espesor del óxido sea totalmente causada por la energía imagen, sino que podría ser una mezcla de varios efectos.

Los valores usados para la altura de la barrera ( $\phi_B$ ) han sido los siguientes (los mismos para todas las muestras, no es un parámetro de ajuste dependiente del espesor):

i)  $\phi_B = 3.25$  eV si sólo se incluye la corriente de los valles doblemente degenerados y se tiene en cuenta la energía imagen. ii)  $\phi_B = 3.5$  eV si incluimos la corriente desde ambos tipos de valle y la energía imagen. iii) Sin incluir la energía imagen, los datos experimentales pueden ser aproximadamente reproducidos usando  $\phi_B \simeq 3.0$  eV si sólo se tiene en cuenta la corriente de los valles perpendiculares y  $\phi_B \simeq 3.20$  eV si contribuyen todos los valles. Sin embargo, como se ha comentado anteriormente, se observa una débil dependencia de  $\phi_B$  con el espesor del óxido si la energía imagen no se incluye.

## Capítulo 3

# Corriente túnel asistida por trampas

### 3.1. Introducción

Hay situaciones en las que la corriente de pérdida a través de óxidos de puerta es mayor de lo que correspondería a transiciones efectuadas únicamente mediante túnel directo. En el apartado anterior ya hemos visto uno de estos casos: capacidades MOS con óxidos de puerta con espesor por encima de, aproximadamente, 2.6 nm, y polarizados con baja tensión de puerta (por debajo de 2.5 - 3.0 V). Otro caso es el de dispositivos con óxidos más gruesos (por encima de 5.0 nm) tras ser atravesados por corriente en régimen de Fowler-Nordheim (FN). Esto sucede, por ejemplo, tras los procesos de escritura y borrado de las memorias EEPROM (*electrically erasable programmable read only memory* o memorias de sólo lectura programables eléctricamente), que se realizan precisamente mediante la inyección de electrones en régimen FN.

Este exceso de corriente se atribuye a transiciones túnel asistidas por trampas situadas en el interior del óxido [DS89], [ASH<sup>+</sup>93], [SH97], [GSSK99]. Por tanto, cualquier simulador de dispositivos actualmente requiere un adecuado modelo para la inclusión de la corriente asistida por trampas. Ésta puede llevarse a cabo de dos maneras: elásticamente (el electrón conserva su energía durante el proceso) o inelás-



ticamente (el electrón pierde parte de su energía, cediéndola a la red en forma de fonones).

Los dos tipos de transiciones que originan la corriente a través del óxido de puerta los trataremos como procesos en dos pasos. En un primer paso, un electrón procedente del cátodo es atrapado por la trampa. En el segundo, es liberado hacia el ánodo. Por consiguiente, la expresión de la densidad de corriente será la misma para los dos fenómenos y sólo diferirá el cálculo de las probabilidades de transición. En un caso (túnel elástico) las transiciones se producen sólo como consecuencia misma de la presencia de un estrecho pozo de potencial dentro del óxido (correspondiente a la trampa). En el otro (túnel inelástico), las transiciones son favorecidas por la emisión de fonones y, por tanto, será el potencial de acoplamiento electrón-fonón la perturbación causante de las transiciones.

Vamos a comenzar el estudio y modelado de estos fenómenos con el cálculo de la densidad de corriente en estado estacionario, es decir, cuando ésta no cambia con el tiempo. En esta situación la función de ocupación de las trampas no varía con el tiempo y el número de electrones capturados por las trampas es igual que el número de electrones liberados. La expresión de la densidad de corriente la dejaremos en función de las constantes de tiempo de captura y emisión, que serán calculadas posteriormente con los modelos desarrollados para cada uno de los dos posibles procesos.

Dedicaremos el apartado 3.3 al cálculo de las probabilidades de transición de los procesos elásticos. Expondremos el modelo desarrollado, los resultados obtenidos y la dependencia del modelo con sus parámetros. También se mostrará una comparación con otros modelos [Fer95], [HS95] y con datos experimentales procedentes de la bibliografía.

El siguiente apartado 3.4 está dedicado a las transiciones mediante túnel inelástico con emisión de fonones. De nuevo, expondremos el modelo usado para el cálculo de las probabilidades de transición y la influencia de los parámetros del modelo sobre los resultados, así como diversos ajustes de datos experimentales.

Los resultados de corriente por túnel asistido obtenidos en estos apartados son, en su mayoría, relativos a la corriente en régimen estacionario. El motivo es que la

mayoría de los resultados experimentales disponibles en la bibliografía han sido obtenidos bajo esta condición. Además, su cálculo resulta más sencillo, en general, que los fenómenos que involucran algún tipo de evolución temporal (como cambio del potencial en la estructura, de la función de ocupación de las trampas debido a fenómenos transitorios de llenado o vaciamiento de éstas, ...) que requieren simulaciones transitorias en las que se vayan actualizando estas magnitudes en cada paso de tiempo. Por estas dos razones es por lo que para la validación de los modelos presentados hemos usado resultados de corriente estacionaria.

Sin embargo, los modelos desarrollados pueden ser aplicados para el cálculo de la corriente transitoria y para la simulación de otros dispositivos distintos de capacidades MOS. En el último apartado de este capítulo mostraremos algunos ejemplos y la manera de aplicar los modelos anteriores para la simulación de fenómenos transitorios. En esta parte se ha desarrollado también una aproximación analítica de los modelos presentados anteriormente, con el objetivo de incluirlos fácilmente en simuladores de dispositivos como MINIMOS-NT [Ins98].

### 3.2. Cálculo de la densidad de corriente por túnel asistido por trampas

Como hemos dicho, en el presente trabajo hemos tratado a las transiciones de un lado a otro de la barrera mediante túnel asistido por trampas como un proceso en dos pasos. En primer lugar, los electrones procedentes del cátodo son atrapados, siendo liberados hacia el ánodo en un segundo paso. La figura 3.1 ilustra este fenómeno.

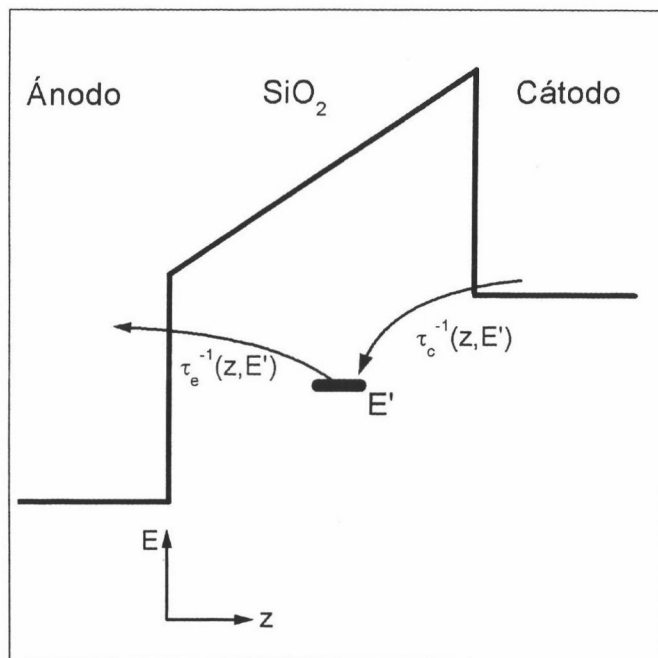


Figura 3.1: Diagrama de las transiciones túnel asistidas por trampas en dos pasos.

El tiempo que transcurre, por término medio, entre dos procesos de captura se denomina tiempo de captura ( $\tau_c(z, E')$ ) y depende tanto de la posición espacial  $z$  como de la posición energética  $E'$  de las trampas. Su inversa, por tanto, es el número de procesos de captura que tienen lugar por unidad de tiempo y por trampa. Del mismo modo, la inversa de la constante de tiempo de emisión ( $\tau_e^{-1}(z, E')$ ) representa el número de electrones emitidos por unidad de tiempo por parte de una trampa ocupada. Al final de este apartado indicaremos cómo se calculan estas constantes de tiempo.

Si despreciamos la corriente opuesta al campo eléctrico en el óxido de puerta, el cambio por unidad de tiempo de la concentración de electrones atrapados en el óxido ( $n_T(z, E')$ ) en las trampas situadas en la posición  $z$  y con energía  $E'$ , viene dado por [HS95]:

$$\frac{dn_T(z, E')}{dt} = N_T(z, E') \frac{df_T(z, E')}{dt} = R_c(z, E') - R_e(z, E') = \quad (3.1)$$

$$= N_T(z, E')(1 - f_T(z, E'))\tau_c^{-1}(z, E') - N_T(z, E')f_T(z, E')\tau_e^{-1}(z, E'), \quad (3.2)$$

donde, como anteriormente,  $E'$  es la posición energética de las trampas (esto es,  $E' = V(z) - E_T$ , donde  $E_T$  es la profundidad de las trampas o la distancia entre el fondo de la banda de conducción en el óxido y el nivel energético de las trampas),  $N_T(z, E')$  es la concentración volúmica de trampas con energía  $E'$  en la posición  $z$  (es también una densidad por unidad de energía si consideramos que la distribución es continua en energía),  $f_T(z, E')$  es su factor de ocupación y  $\tau_c(z, E')$  y  $\tau_e(z, E')$  son las constantes de tiempo de los procesos de captura y emisión, respectivamente.  $R_c$  y  $R_e$  son, respectivamente, las tasas de captura y emisión para las trampas consideradas.

En estado estacionario se cumple la siguiente igualdad:

$$\frac{dn_T(z, E')}{dt} = 0, \quad (3.3)$$

y, por tanto, las tasas de emisión y captura son iguales:

$$R_c(z, E') = R_e(z, E') \equiv R(z, E'), \quad (3.4)$$

donde  $R(z, E')$  es el número de transiciones, por unidad de tiempo, asistidas por las trampas con energía  $E'$  en la posición  $z$ . Eliminando la función de ocupación de las trampas ( $f_T$ ) obtenemos, a partir de la ecuación 3.1 igualada a cero, la siguiente expresión:

$$R(z, E') = \frac{N_T(z, E')}{\tau_c(z, E') + \tau_e(z, E')}, \quad (3.5)$$

La densidad de corriente total (asistida por trampas) viene dada entonces por la siguiente integral:

$$J_T = q \int_0^{t_{ox}} dz \int_{E_0} \frac{N_T(z, E')}{\tau_c(z, E') + \tau_e(z, E')} dE', \quad (3.6)$$

donde  $q$  es la carga del electrón y  $E_0$  es la energía del fondo de la subbanda.

A continuación expondremos las expresiones empleadas para el cálculo de las constantes de tiempo de captura y emisión.

La inversa del tiempo de captura es, como se ha dicho anteriormente, el número de electrones con cualquier energía capturados por unidad de tiempo por una trampa. Conocidas las probabilidades de captura por unidad de tiempo de un electrón con determinada energía  $E$  (que serán calculadas más adelante en este mismo capítulo), este número vendrá dado por la suma (integral) de la probabilidad de captura de todos los electrones. Es decir, en el caso de que los estados iniciales no sean ligados (gas de electrones 3D), el tiempo de captura viene dado por la siguiente expresión general:

$$\tau_c^{-1}(z, E') = \int_{E_{cc}}^{\infty} dE \int_{E_{cc}}^E f_c(E) N_{c2D}(E_{||}) N_{c1D}(E_z) W_c(z, E', E) dE_z. \quad (3.7)$$

Donde  $N_{c2D}(E)$  es la densidad bidimensional de estados,  $N_{c1D}(E_z)$  es la densidad unidimensional de estados,  $E_{cc}$  es el fondo de la banda de conducción y  $f_c(E)$  es la función de Fermi-Dirac. El subíndice  $c$  indica que todas estas magnitudes se refieren al cátodo. Finalmente,  $W_c(z, E', E)$  es la probabilidad, por unidad de tiempo, de que un electrón en el cátodo, con energía  $E$ , sea capturado por una trampa con energía  $E'$  situada en la posición  $z$ .

En general, la probabilidad de captura  $W_c(z, E', E)$  depende no sólo de la energía  $E$  del estado inicial, sino también de la energía transversal  $E_z$ , pues es la que determina la penetración de las funciones de onda electrónicas en la barrera. Por eso, hemos descompuesto la energía del estado inicial en dos componentes, paralela y longitudinal ( $E = E_z + E_{||}$ ).

Si el estado inicial es ligado (gas 2D), como sucede con los electrones situados en el canal de inversión de un dispositivo MOS, la probabilidad de captura viene dada por:

$$\tau_c^{-1}(z, E') = \sum_{\mu} \tau_{c\mu}^{-1}(z, E') = \sum_{\mu} \int_{E_{\mu}}^{\infty} N_{c2D}(E) f_c(E) W_c(z, E', E) dE. \quad (3.8)$$

La sumatoria se realiza sobre todas las subbandas consideradas ( $\tau_{c\mu}$  es el tiempo de captura para los electrones procedentes de la subbanda  $\mu$ ). Como puede verse, en este

caso la energía transversal  $E_z$  está cuantizada y no hay que realizar una integral, sino una sumatoria.

De forma análoga, la constante de tiempo de emisión viene dada por la siguiente expresión:

$$\tau_e^{-1}(z, E') = \int_{E_{ca}}^{\infty} dE \int_{E_{ca}}^E N_{a2D}(E_{||}) N_{a1D}(E_z) (1 - f_a(E)) W_e(z, E', E) dE_z. \quad (3.9)$$

Los símbolos tienen significado análogo a los que aparecen en la expresión 3.7, pero las magnitudes están ahora referidas al ánodo, por lo que se ha sustituido el subíndice  $c$  por  $a$ .

Las probabilidades, por unidad de tiempo, de captura y emisión,  $W_c(z, E', E)$  y  $W_e(z, E', E)$  serán calculadas en el apartado correspondiente a cada tipo concreto de transición. En el siguiente comenzaremos por las transiciones elásticas y en el apartado 3.4 mostraremos el cálculo de las probabilidades de captura y emisión en el caso de transiciones inelásticas.

## 3.3. Transiciones elásticas asistidas por trampas

### 3.3.1. Introducción

Como ya hemos comentado anteriormente, hay situaciones en las que la corriente producida por las transiciones mediante túnel directo no basta para explicar la corriente a través de óxidos de puerta. En concreto, en capacidades MOS con óxidos por encima de 2.6 nm (aproximadamente) y bajas tensiones de puerta (por debajo de 3V) la diferencia entre la corriente por túnel directo y la medida experimentalmente se ha atribuido a las transiciones asistidas por las trampas nativas del óxido [SH97], [GSSK99]. Se ha demostrado el carácter elástico de estas transiciones mediante la medida del número de pares electrones-hueco generados por los electrones inyectados en el ánodo (*quantum yield experiments*) [GAB<sup>+</sup>99].

Además, mediante simulaciones basadas en modelos microscópicos, M. Städele [SFTH00] y otros han sugerido que, dependiendo de la concentración y de la posición energética de las trampas, la densidad de corriente a través de óxidos menores de 2.0 nm podría verse incrementada en varios órdenes de magnitud.

En cuanto al origen de las trampas, se han propuesto varias alternativas pero hoy en día todavía no se conoce con seguridad. M. Städele ha realizado un estudio teórico de la corriente elástica asistida por trampas suponiendo que está causada por vacantes de oxígeno [SFTH00], aunque admite que las trampas pueden ser debidas a otro tipo de defectos en el dióxido, como enlaces insatisfechos o erróneos [BS99a] o agujeros (*spots*) [ONR88].

En la bibliografía se pueden encontrar varios modelos para el cálculo de la corriente elástica asistida por trampas. Suzuki y Schroder desarrollaron un modelo en dos pasos, en el que las probabilidades de emisión y captura se obtienen mediante el método WKB [SS86], descomponiendo la barrera en los dos trozos que quedan a los lados de la trampa. A.Ghetti usa este modelo y también uno más simple, en el que emplean una sección eficaz de captura constante y fijada por los autores para todas las trampas [GSSK99].

Otros autores realizan el cálculo de las probabilidades de transición por túnel re-

sonante mediante modelos de un solo paso, haciendo uso del método de la matriz de transferencia, suponiendo estados electrónicos no ligados en el cátodo [GMC88], [HS95]. En este caso, suponen que la trampa es un estrecho pozo de potencial cuadrado. Para eliminar la dependencia con los parámetros del pozo (profundidad y anchura, que son desconocidos) convierten el pozo en una función delta [Sch98]. T. Weil [WV87] ha demostrado la equivalencia de considerar que el proceso ocurre en uno o en dos pasos en diodos con doble barrera resonante en ausencia de mecanismos de dispersión en la barrera.

Finalmente, M. Städele estudia el fenómeno desde un punto de vista completamente microscópico, calculando los coeficientes de transmisión mediante un modelo de ligaduras fuertes [SFTH02].

Nosotros hemos adaptado el método de Bardeen para el cálculo de la corriente asistida por túnel elástico. Esto nos permitirá su aplicación en cualquier situación (gas 2D ó 3D), con barreras arbitrarias y con cualquier dependencia de la masa efectiva con la energía. Esto constituye una de las aportaciones del presente trabajo, pues es la primera vez que el método de Bardeen se ha empleado con este fin.

Dentro de esta sección, dedicada a la corriente mediante túnel asistido por trampas de forma elástica, comenzaremos con el cálculo de la probabilidad de transición. Una vez calculada y sustituida en las ecuaciones (3.7)-(3.9), podemos calcular la densidad de corriente de puerta. Seguidamente, mostraremos una comparación del modelo con otro de un solo paso, basado en la matriz de transferencia, y con resultados experimentales. Finalizaremos el apartado con las conclusiones del estudio.

### 3.3.2. Constantes de tiempo de captura y emisión

En este apartado calcularemos la probabilidad, por unidad de tiempo, de atrapamiento o liberación de un electrón por una trampa ( $W_{c,e}(z, E', E)$ ) siguiendo el método de Bardeen, de forma análoga a como se ha hecho en el caso de túnel directo. Como hemos dicho anteriormente, el proceso completo de la transición túnel de un lado a otro de la barrera lo descompondremos en dos pasos: atrapamiento del electrón y liberación hacia el ánodo. Aquí nos centraremos en la captura de un electrón



desde el cátodo. La probabilidad de emisión hacia el ánodo se calcula de forma análoga. Para estudiar el proceso de captura vamos a suponer que el óxido se extiende indefinidamente por el lado opuesto al cátodo, como se representa en la figura 3.2.

Para calcular las probabilidades de transición aplicando el método de Bardeen necesitamos conocer las funciones de onda del estado inicial y final, además del hamiltoniano de perturbación que provoca la transición de uno a otro estado.

El hamiltoniano  $H$  que gobierna el comportamiento del sistema bajo estudio viene dado por:

$$H(\vec{r}) = T(z) + V(\vec{r}) \quad (3.10)$$

donde  $\vec{r}$  es el vector de posición y  $T$  es el operador de energía cinética:

$$T(z) = \frac{-\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m_x(z)} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{m_y(z)} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (3.11)$$

y  $V$  es la energía potencial a la que están sometidos los electrones, que viene dada por:

$$V(\vec{r}) = E_{c0}(z) - e\phi(z) + V_{Trampa}(\vec{r}). \quad (3.12)$$

en donde  $E_{c0}(z)$  tiene en cuenta la discontinuidad en la banda de conducción,  $\phi(z)$  es el potencial electrostático y  $V_{Trampa}(\vec{r})$  es la energía potencial asociada a la trampa. Nosotros supondremos que es un pozo cuadrado, como explicaremos más adelante. En la figura 3.2 se muestra la representación de la energía  $V(\vec{r})$  correspondiente al hamiltoniano  $H$ .

En lugar de estudiar y obtener las autofunciones correspondientes a este hamiltoniano supondremos que el electrón se encuentra inicialmente en el pozo de potencial del substrato y que el hamiltoniano que corresponde al sistema es el mostrado en la figura 3.3, que es el mismo que el del sistema completo,  $H$ , pero sin incluir la contribución de la trampa. Las líneas horizontales dibujadas en el cátodo en las figuras 3.2 y 3.3 representa la energía de los estados estacionarios de este hamiltoniano.

Como se explicó en el capítulo anterior, para aplicar el método de Bardeen expresaremos el hamiltoniano completo,  $H$ , como la suma del hamiltoniano  $H_1$  y un hamiltoniano de perturbación,  $H'$ , que es el responsable de las transiciones desde los

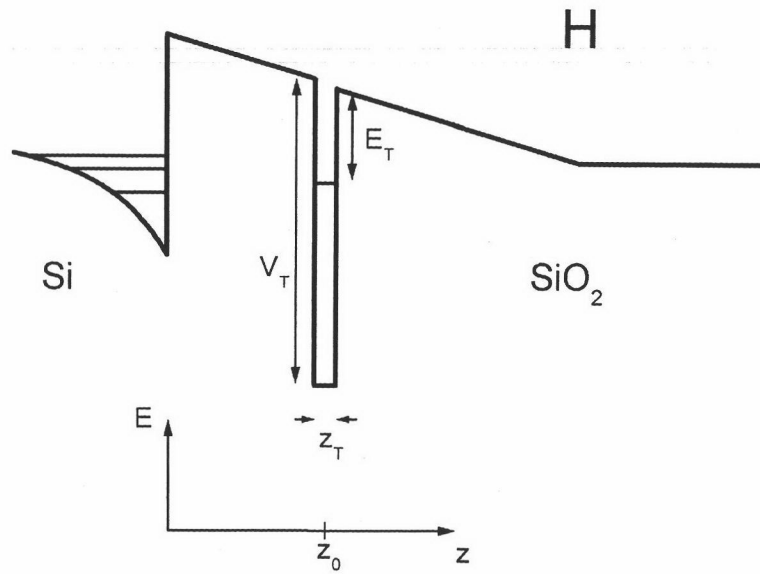


Figura 3.2: Energía potencial  $V(\vec{r})$  correspondiente al Hamiltoniano completo  $H$  del sistema.

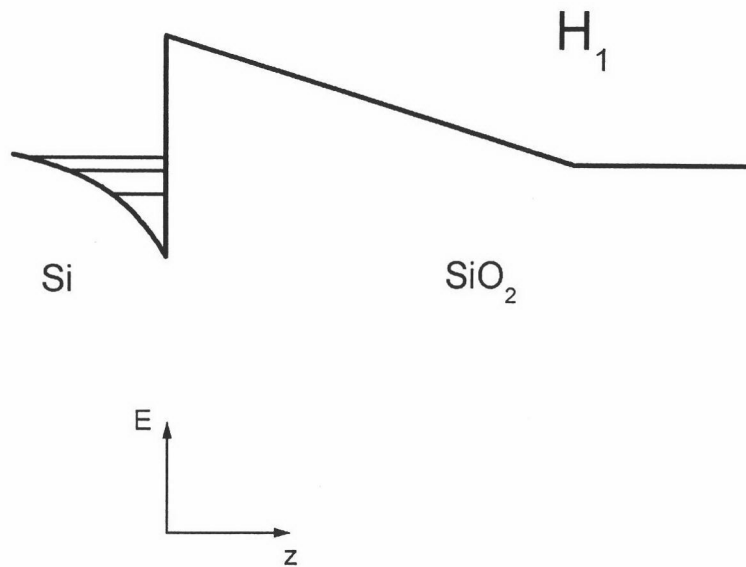


Figura 3.3: Pozo de potencial  $V(z)$  correspondiente al hamiltoniano  $H_1$  sin perturbar.

estados en el cátodo y que viene dado por:

$$H' = H - H_1 = V_{Trampa}(\vec{r}). \quad (3.13)$$

Por otro lado, para modelar las trampas supondremos que crean un pozo de potencial cuadrado y muy estrecho [HS95]. Puesto que no se conocen los detalles del pozo de potencial realmente creado por la trampa, conviene eliminar del modelo los parámetros que lo definen, como anchura y altura, dejando como único parámetro de ajuste la profundidad del nivel. Para ello, M. Herrman realiza un cálculo analítico del coeficiente de transmisión (para barreras trapezoidales) en función de estos parámetros y al final aproxima el pozo de potencial por un potencial delta, calculando el límite de las expresiones obtenidas cuando la altura del pozo tiende a infinito y la anchura a cero. De este modo, se elimina la dependencia de las expresiones con la geometría del pozo [Sch98].

Sin embargo, este método requiere una expresión analítica del coeficiente de transmisión, por lo que sólo puede ser aplicado con una determinada geometría de la barrera y con ondas incidentes planas. Por ello, en lugar de este procedimiento, supondremos que la trampa es de tipo hidrogenoide y que su radio ( $a_T$ ) y la energía del estado fundamental (respecto de la banda de conducción del óxido),  $E_T$ , están relacionadas por la siguiente expresión:

$$a_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_{ox}^* E_T}}, \quad (3.14)$$

donde  $E_T$  es la energía del estado (respecto del fondo de la banda de conducción del óxido) y  $m_{ox}^*$  es la masa efectiva del electrón en el óxido (y con la energía correspondiente al fondo de la banda de conducción). Por sencillez de cálculo, en lugar de una trampa esférica con radio  $a_T$  y volumen  $V_T$ , supondremos una trampa cúbica de lado  $z_T$  tal que el volumen de la trampa sea el mismo:

$$x_T = y_T = z_T = \frac{\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \hbar}{\sqrt{2m_{ox}^* E_T}}. \quad (3.15)$$

Supondremos que la función de onda tiene un valor constante dentro del volumen que

---

hemos definido para la trampa y se anula en el resto de puntos:

$$\Psi_f(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V_T}} & \text{si } \begin{cases} |x - x_0| < \frac{x_T}{2} \\ |y - y_0| < \frac{y_T}{2} \\ |z - z_0| < \frac{z_T}{2} \end{cases} \\ 0 & \text{en el resto de puntos} \end{cases}, \quad (3.16)$$

donde las coordenadas  $(x_0, y_0, z_0)$  definen la posición del centro de la trampa.

En resumen, de acuerdo con este modelo para las trampas y con las definiciones realizadas anteriormente, el hamiltoniano  $H$  viene dado por:

$$H(\vec{r}) = T(z) + V(\vec{r}), \quad (3.17)$$

con:

$$V(\vec{r}) = E_{c0}(z) - e\phi(z) + V_{Trampa}(\vec{r}) \quad (3.18)$$

y:

$$V_{Trampa}(\vec{r}) = \begin{cases} -V_T & \text{si } \begin{cases} |x - x_0| < \frac{x_T}{2} \\ |y - y_0| < \frac{y_T}{2} \\ |z - z_0| < \frac{z_T}{2} \end{cases} \\ 0 & \text{en el resto de puntos} \end{cases}, \quad (3.19)$$

Finalmente, la función de onda del estado correspondiente al electrón no atrapado se ha calculado resolviendo la ecuación de Schrödinger numéricamente y tiene la siguiente forma:

$$\Psi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i(k_x x + k_y y)} \xi_L(z). \quad (3.20)$$

$A$  es el área del dispositivo y la función de onda  $\xi_L(z)$  está normalizada sobre una longitud  $L_z$  (si el estado inicial es no ligado).

Ya tenemos todos los elementos para aplicar la regla de oro de Fermi, de acuerdo con la cual la probabilidad, por unidad de tiempo, de transición entre el estado inicial libre ( $|i\rangle$ ) y el estado en la trampa situada en  $z$  ( $|f\rangle$ ) viene dada por:

$$W_c(z, E_{Tz}, E) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(E - E_{Tz}), \quad (3.21)$$

donde  $E_{Tz}$  es el nivel energético de la trampa en la posición  $z$ :

$$E_{Tz} = V(z) - E_T. \quad (3.22)$$

El elemento de matriz  $\langle f | H' | i \rangle$  se calcula según la expresión:

$$\langle f | H' | i \rangle = \int \Psi_f^*(\vec{r}) H'(\vec{r}) \Psi_i(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.23)$$

A continuación sustituimos (3.16) y (3.20) en (3.23) y realizamos la siguiente aproximación:

$$\int_{x_0-x_T/2}^{x_0+x_T/2} e^{ik_x x} dx = \frac{2}{k_x} e^{ik_x x_0} \sin\left(\frac{k_x x_T}{2}\right) \simeq x_T e^{ik_x x_0}, \quad (3.24)$$

que está basada en el hecho de que  $k_x x_T \ll 1$ , con los valores usuales de temperatura y de  $E_T$ . Eliminando la fase, obtenemos:

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{-\sqrt{z_T} V_T}{\sqrt{A}} \int_{z_0-\frac{z_T}{2}}^{z_0+\frac{z_T}{2}} \xi(z') dz'. \quad (3.25)$$

Y, finalmente, introduciendo esta expresión en (3.21), llegamos a la siguiente expresión:

$$W_{c,e}(z, E', E) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{\sqrt{z_T} V_T}{\sqrt{A}} \int_{z-\frac{z_T}{2}}^{z+\frac{z_T}{2}} \xi(z') dz' \right|^2 \delta(E - E_{Tz}). \quad (3.26)$$

El área  $A$  se cancelará con el término correspondiente de la densidad de estados.

Usualmente, en la bibliografía, cuando se trata de ajustar resultados experimentales de corriente a través del óxido producida por trampas, se suele suponer una cierta distribución para los niveles energéticos de los estados atrapados ( $E_T$ ). Además, como se ha comentado anteriormente, se desconoce la geometría del pozo de potencial asociado a las trampas, por lo que conviene que no aparezcan como parámetros del modelo. Por tanto, expresaremos la anterior ecuación en función de  $E_T$  y no de la profundidad del pozo,  $V_T$ .

Para obtener la dependencia de  $E_T$  con  $V_T$  aplicaremos las expresiones correspondientes a un pozo cuadrado (tridimensional) de paredes infinitas. Los niveles de energía vienen dados, respecto al fondo del pozo, por:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2z_t^2 m_{ox}^*} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad (3.27)$$

donde  $n_x$ ,  $n_y$ , y  $n_z$  son números cuánticos naturales y mayores que cero.

El pozo creado por la trampa no tiene una altura infinita, sino igual a  $V_T$ . Respecto de la banda de conducción del óxido, la profundidad de los niveles energéticos viene

dada por  $E_T = V_T - E_n$ . Sustituyendo  $z_t$  por su valor (3.15) obtenemos la profundidad del nivel fundamental:

$$E_T = 0.124 \cdot V_T \quad (3.28)$$

Se puede comprobar fácilmente que hay un único nivel energético ligado en los pozos correspondientes a las trampas (con el rango de valores usado: 1.5 a 3 eV).

### 3.3.3. Resultados y simulaciones

#### 3.3.3.1. Comparación con el método de la matriz de transferencia

Antes de presentar los resultados obtenidos con el modelo anteriormente presentado, en este apartado vamos a compararlo con el de la matriz de transferencia con el fin de comprobar la bondad de las aproximaciones realizadas. Para ello, estudiaremos un caso simple en el cual ambos métodos proporcionan soluciones analíticas. Se trata de una doble barrera simétrica. La energía potencial correspondiente se muestra en la figura 3.4. Por comodidad, hemos asumido un sistema unidimensional y una masa efectiva ( $m_e$ ) constante en toda la estructura.

El método de la matriz de transferencia es de un sólo paso, es decir, proporciona la probabilidad de que un electrón incidente pase de un lado a otro de la barrera a través de la matriz de transferencia, que engloba todos los detalles del sistema. Esta probabilidad (el coeficiente de transmisión  $T$ ) presenta picos de valor igual a uno en las energías correspondientes a los niveles resonantes del pozo [Fer95]. Con objeto de comparar posteriormente con el método de Bardeen, se debe calcular el número de transiciones por unidad de tiempo, es decir, la corriente que atraviesa la barrera, que es igual a la incidente multiplicada por el coeficiente de transmisión:

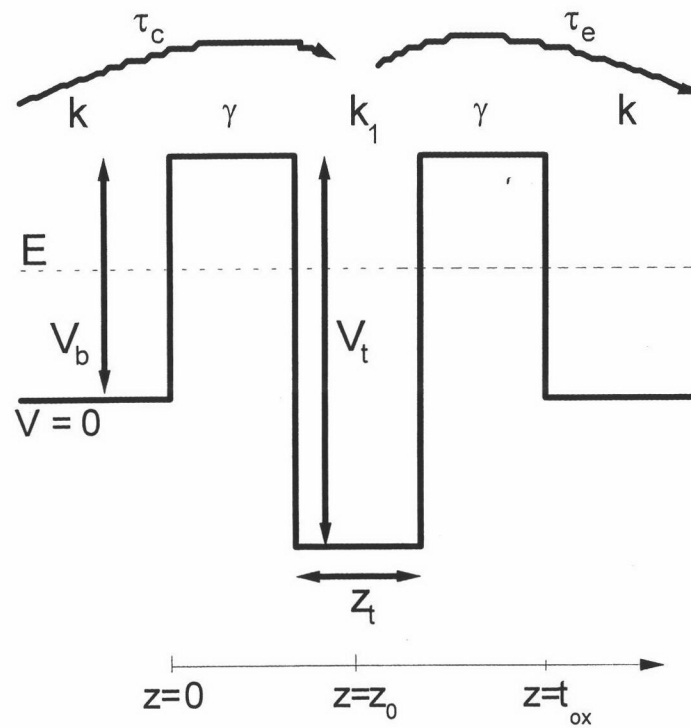
$$J(E) = \frac{A^2 \hbar k(E)}{m_e} T(E). \quad (3.29)$$

La constante  $A$  es el coeficiente de normalización de la onda plana incidente:

$$\xi(z) = Ae^{ikz}. \quad (3.30)$$

Finalmente, la corriente total se obtiene integrando en la energía:

$$J_T = \int J(E) \rho(E) dE = \frac{A^2 \hbar}{m_e} \int k(E) T(E) \rho(E) dE. \quad (3.31)$$



**Figura 3.4:** Energía potencial correspondiente a una doble barrera simétrica. Se muestran también algunos de los símbolos empleados en el texto.

Por otro parte, para aplicar el método de Bardeen en este caso, consideraremos un proceso en dos pasos, la captura del electrón por el pozo y la posterior liberación hacia el otro lado de la barrera. El tiempo total empleado es:

$$\tau_T(E) = \tau_c(E) + \tau_e(E), \quad (3.32)$$

donde  $\tau_c$  y  $\tau_e$  son las constantes de captura y emisión, respectivamente. Por tanto, la probabilidad de que un electrón pase de un lado de la barrera al otro viene dada por:

$$W(E) = \frac{1}{\tau_T(E)} = \frac{1}{\tau_c(E) + \tau_e(E)} = \frac{W_c(E)W_e(E)}{W_c(E) + W_e(E)}. \quad (3.33)$$

Donde  $W_c$  y  $W_e$  son las inversas de las correspondientes constantes de tiempo. Para facilitar los cálculos, hemos supuesto que la doble barrera es simétrica y, por tanto,  $W_c = W_e$ . Esta probabilidad viene dada por:

$$W_c = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{V_t}{\sqrt{z_t}} \int_{z_0 - \frac{z_t}{2}}^{z_0 + \frac{z_t}{2}} \xi(z) dz \right|^2 \delta(E - E_T). \quad (3.34)$$

Donde, como se esquematiza en la figura 3.4,  $z_0$  es la posición del centro del pozo ( $t_{ox}/2$ , siendo  $t_{ox}$  la anchura total de la barrera),  $V_t$  la profundidad del pozo,  $z_t$  su anchura,  $\xi(z)$  la función de onda correspondiente al electrón libre y  $E_T$  la posición energética del primer nivel resonante, que se ha estimado como:

$$E_T = V_b - V_t + \frac{\pi^2 \hbar^2}{z_t^2 2m_e}. \quad (3.35)$$

Es decir, se ha supuesto que la distancia entre el primer nivel y el fondo del pozo es la misma que si el pozo fuese de paredes infinitas. Finalmente, debe observarse que la expresión (3.34) no es exactamente igual que (3.26), pues el problema aquí tratado es unidimensional, mientras que en el apartado anterior considerábamos la extensión finita de las trampas en el plano transversal  $XY$ .

La función de onda del estado inicial es la correspondiente a un escalón de potencial que pasa de  $V = 0$  a  $V = V_b$  en  $z = 0$  y viene dada por:

$$\xi(z) = \begin{cases} Ae^{ikz+\phi} - Ae^{-ikz+\phi} = 2A \operatorname{isen}(kz + \phi) & \text{si } z < 0 \\ Ce^{-\gamma z} & \text{si } z > 0 \end{cases}, \quad (3.36)$$



donde  $k$  y  $\gamma$  son los vectores de onda a la izquierda de la barrera y en la barrera, respectivamente. El coeficiente  $C$  está relacionado con  $A$  mediante las condiciones de contorno y resulta ser:

$$C = 2A \operatorname{isen} \left( \arctan \left( -\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{V_b - E}} \right) \right). \quad (3.37)$$

Dada esta función de onda, la integral de (3.34) puede calcularse analíticamente como:

$$\int_{z_0 - \frac{z_T}{2}}^{z_0 + \frac{z_T}{2}} \xi(z) dz = \frac{2C}{\gamma} e^{-\gamma z_0} \operatorname{senh} \left( \frac{\gamma z_T}{2} \right). \quad (3.38)$$

Teniendo en cuenta las anteriores ecuaciones, se puede obtener finalmente el número de transiciones por segundo:

$$J_T = \int W(E) \rho(E) dE = \frac{W_c(E_T)}{2} \rho(E_T) = \quad (3.39)$$

$$= \frac{4\pi C^2 V_t^2}{\hbar z_t \gamma^2} e^{-2\gamma z_0} \operatorname{senh}^2 \left( \frac{\gamma z_T}{2} \right) \rho(E_T). \quad (3.40)$$

Como el objetivo de este apartado es comparar los dos métodos, hemos supuesto una densidad de estados  $\rho(E)$  arbitraria.

En la tabla 3.1 se recogen los resultados obtenidos en cinco casos. Las cuatro primeras columnas definen la geometría de la barrera. La columna encabezada por  $E_{PI}$  indica la posición energética del estado estacionario del pozo, calculada con la suposición de paredes infinitas (según la expresión (3.35)), mientras que  $E_{MMT}$  indica la energía para la cual se produce resonancia (el coeficiente de transmisión es 1) según el método de la matriz de transferencia. El número de transiciones por unidad de tiempo calculadas por éste método está en la columna nombrada como  $J_{MMT}$ . Con el método de Bardeen se han calculado dos densidades de corriente:  $J_{B,E_{PI}}$  y  $J_{B,E_{MMT}}$ . La primera supone que el estado correspondiente a la trampa tiene energía  $E_{PI}$ , mientras que la segunda se ha calculado suponiendo que la energía del estado del pozo es la que se ha obtenido con el método de la matriz de transferencia ( $E_{MMT}$ ).

Como puede observarse, en los cuatro primeros casos (para los cuales la anchura del pozo es comparable a la de las barreras) los valores proporcionados por ambos métodos son del mismo orden si comparamos  $J_{B,E_{PI}}$  y  $J_{MMT}$ , y casi iguales si comparamos  $J_{B,E_{MMT}}$  y  $J_{MMT}$ . Sin embargo, hay bastante discrepancia en el último caso

$V_b$ (eV)	$V_t$ (eV)	$t_{ox}$ (nm)	$z_t$ (nm)	$E_{PI}$ (eV)	$E_{MMT}$ (eV)	$J_{B,E_{PI}}$ (u.a.)	$J_{B,,E_{MMT}}$ (u.a.)	$J_{MMT}$ (u.a.)
5.0	5.1	3	1.00	0.273	0.263	$1.0 \times 10^{-5}$	$9.7 \times 10^{-6}$	$7.2 \times 10^{-6}$
3.0	3.1	3	1.00	0.273	0.240	$2.4 \times 10^{-3}$	$1.9 \times 10^{-3}$	$1.8 \times 10^{-3}$
1.0	1.1	3	1.00	0.273	0.179	<b>12.5</b>	<b>4.2</b>	<b>5.6</b>
3.0	3.1	2	1.00	0.273	0.240	<b>11.9</b>	<b>9.8</b>	<b>9.2</b>
3.0	6.0	3	0.34	0.230	0.876	$6.1 \times 10^{-5}$	$4.9 \times 10^{-3}$	$1.6 \times 10^{-3}$

**Cuadro 3.1:** Densidades de corriente obtenidas mediante el método de Bardeen ( $J_{B,E_{PI}}$  y  $J_{B,,E_{MMT}}$ ) y el método de la matriz de transferencia ( $J_{MMT}$ ) en cinco casos distintos.  $J_{B,E_{PI}}$  se ha calculado suponiendo que la energía del estado del pozo es  $E_{PI}$ , calculada suponiendo que el pozo tiene paredes infinitas. Para el cálculo de  $J_{B,,E_{MMT}}$  se ha supuesto que la energía del estado ligado es la correspondiente a la primera resonancia de  $T(E)$ , calculada mediante el método de la matriz de transferencia.

entre los valores de  $J_{B,E_{PI}}$  y  $J_{MMT}$ . Esto se debe a que en este caso la estimación del nivel energético del pozo calculada suponiendo un pozo infinito proporciona un valor bastante alejado del obtenido con la matriz de transferencia. En efecto, la discrepancia casi desaparece si empleamos el método de Bardeen con la energía proporcionada por el método de la matriz de transferencia ( $J_{B,E_{MMT}}$ ).

Es decir, el método de Bardeen y el de la matriz de transferencia proporcionan resultados muy parecidos y las discrepancias más graves no son atribuibles al método de Bardeen en sí, sino a las aproximaciones realizadas para el cálculo del nivel energético del pozo.

El pozo correspondiente a las trampas que consideramos en el presente trabajo es muy profundo y estrecho, como el correspondiente a la última fila de la tabla 3.1. En este caso, la estimación del nivel de la trampa suponiendo un pozo infinito no proporciona el mismo resultado que el método de la matriz de transferencia. Sin embargo, como se ha visto, lo realmente importante es la posición energética del estado atrapado. El modelo presentado en el anterior apartado usa como único parámetro la energía del nivel del pozo respecto del fondo de la banda de conducción del óxido ( $E_T$ ) y a partir de él se calcula tanto la profundidad del pozo como su anchura. La

corriente obtenida con el mismo pozo aplicando el método de la matriz de transferencia es uno o dos órdenes de magnitud superior (porque la energía del nivel resonante es mayor que la estimación realizada). Sin embargo, se ha comprobado que si ensanchamos un poco el pozo para hacer coincidir la posición energética de las trampas con la estimada con el método anterior, la probabilidad obtenida es del mismo orden de magnitud (hay que señalar que en este caso los pozos son distintos).

Finalmente, debe destacarse que para obtener la corriente mediante el método de la matriz de transferencia debe calcularse el coeficiente de transmisión con una resolución de  $10^9$ - $10^{10}$  puntos por eV, puesto que los picos de resonancia son muy estrechos (especialmente cuanto más altas o estrechas son las barreras). Ello conlleva realizar un doble proceso, por el cual se obtiene primero  $T(E)$  con poca resolución. Posteriormente se realiza un cálculo refinado en torno a las energías de resonancia [Cas00].

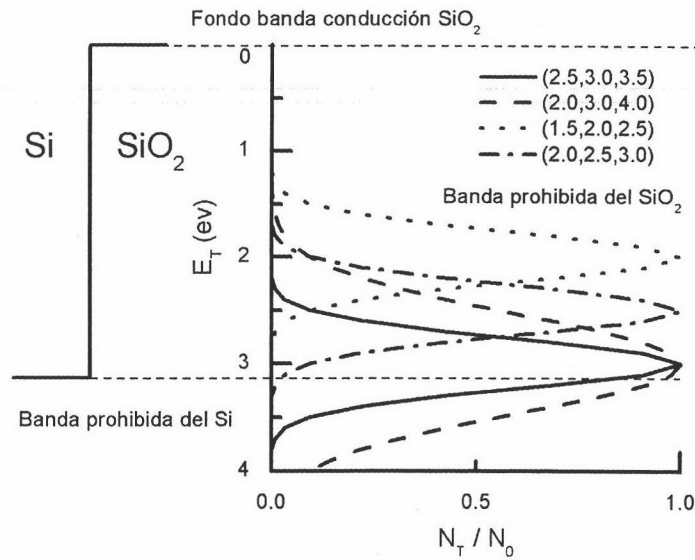
Esto supone una clara desventaja respecto del método de Bardeen, que es numéricamente mucho más eficiente.

### 3.3.3.2. Distribución energética de las trampas

En este apartado analizaremos la influencia de la distribución en energía de las trampas que asisten las transiciones túnel elásticas. Nuestro modelo puede incluir una distribución discreta o continua en energía. En el caso de las simulaciones en las que hemos asumido una distribución continua de trampas, se ha tomado una dependencia gaussiana (aunque podía haberse tomado cualquier otro tipo de función):

$$N_T(E_T, z) = \begin{cases} N_0 e^{-((E_T - E_m)/\Delta E)^2} & \text{si } E_T \in [E_{min}, E_{max}] \\ 0 & \text{si } E_T \notin [E_{min}, E_{max}] \end{cases} \quad (3.41)$$

donde la energía  $E_{max}$  es la correspondiente al nivel de las trampas más profundas de la distribución, mientras que  $E_{min}$  es la posición energética de las menos profundas. La media de la distribución es  $E_m = 0.5(E_{max} + E_{min})$  y su anchura está controlada por el parámetro  $\Delta E$ . Normalmente, se ha tomado  $\Delta E = 0.65(E_{max} - E_m)$  para conseguir una distribución en la que la concentración de las trampas de los extremos sea, aproximadamente, una décima parte de la concentración de las trampas con

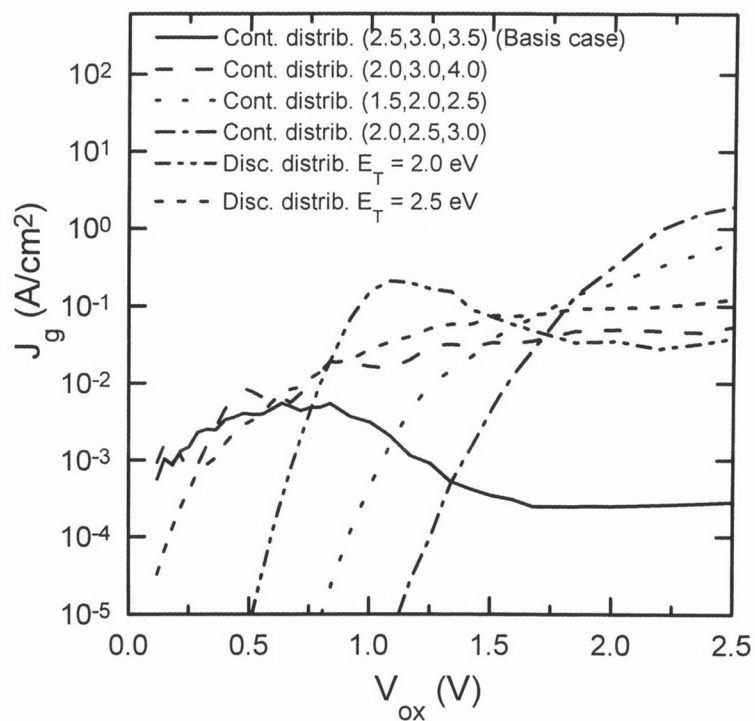


**Figura 3.5:** Distribuciones gaussianas de trampas, cuyos parámetros se han expresado mediante la terna  $(E_{min}, E_m, E_{max})$ .

energía  $E_m$ . En la figura 3.5 se representan algunos ejemplos de distribuciones de trampas obtenidas con esta función.

La figura 3.6 muestra los resultados obtenidos al simular las distribuciones en energía presentadas en la figura 3.5 y dos casos más, en los que se ha supuesto una distribución discreta con un único nivel. En todas estas simulaciones se ha supuesto una distribución de trampas uniforme en el espacio (no dependiente de  $z$ ), no se ha incluido la energía imagen y se han tomado los siguientes valores para el espesor del óxido, la altura de la barrera y el máximo de la distribución de trampas, respectivamente:  $t_{ox} = 2.8$  nm,  $\phi_B = 3.15$  eV y  $N_0 = 6.5 \times 10^{14}$  cm<sup>-3</sup> (las unidades son cm<sup>-3</sup>eV<sup>-1</sup> en el caso de que se trate de una distribución continua en energía).

En los casos con un único nivel de energía (distribución discreta), podemos observar un máximo relativo que se corresponde con el alineamiento de las trampas baricéntricas (en las que las probabilidades de captura y emisión se igualan) con las subbandas más pobladas. Este pico desaparece si la distribución es continua. Como se muestra en la Fig. 3.6, si el centro de la distribución está en torno al valor de la



**Figura 3.6:** Influencia de la distribución en energía de las trampas sobre la corriente túnel asistida. Si la distribución es continua, sus parámetros se han indicado así:  $(E_{min}, E_m, E_{max})$ .

altura de la barrera  $\phi_B$  (como el caso base de la figura), la corriente por túnel asistido es notable a bajas polarizaciones. Sin embargo, decrece rápidamente cuando aumenta la polarización porque las trampas quedan por debajo de las subbandas, a menos que la distribución sea más ancha. Si la distribución es menos profunda, las curvas se desplazan hacia la derecha, hacia tensiones de puerta más altas.

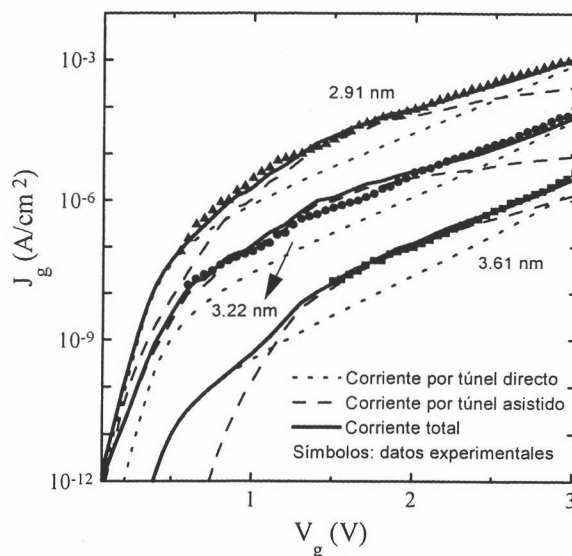
Inversamente, el perfil de la corriente causada por el túnel asistido por trampas podría darnos importante información sobre las trampas presentes en el óxido. Un ejemplo de esto se mostrará más adelante, cuando se ajusten datos experimentales empleando los resultados de nuestras simulaciones. Esto sólo es posible usando determinados valores para la profundidad y concentración de las trampas.

### 3.3.3.3. Comparación con resultados experimentales

Cuando se presentó la figura 2.15 en el apartado 2.4.4, se observó que con bajas tensiones de puerta no es posible reproducir las curvas experimentales teniendo en cuenta únicamente la contribución de la corriente mediante túnel directo. Esto se debe a que debemos tener en cuenta también el túnel elástico asistido por las trampas nativas presentes en la barrera. Para ajustar estos puntos hemos incluido su contribución con el modelo presentado anteriormente.

La distribución de trampas en el espacio se ha tomado como uniforme, mientras que en energía se ha asumido un perfil gaussiano, siguiendo la expresión (3.41). Para el buen ajuste de los datos, hemos tenido que usar los valores que se muestran en la tabla 3.2. Como puede verse, la profundidad de las trampas es muy parecida en los tres casos analizados (con diferente espesores de óxido), pero la concentración máxima puede variar hasta un orden de magnitud.

La posición energética de los estados atrapados usada para ajustar estos datos experimentales coincide con la de las trampas creadas por vacantes de oxígeno, que se alinean un poco por encima de la banda de conducción del silicio. Este tipo de trampas han sido propuestas como responsables de la corriente de pérdidas a través del óxido de puerta [YOMK97]. Su posición no se conoce exactamente (y puede, además, estar estadísticamente distribuida, debido a diferencias locales) pero en la bibliografía se



**Figura 3.7:** Ajuste de datos experimentales procedentes de [LBY99]. Línea punteada: densidad de corriente por túnel directo. Línea a trazos: densidad de corriente por túnel elástico asistido por trampas. Línea continua: densidad de corriente total.

pueden encontrar valores entre 2.5 eV y 3.0 eV por debajo de la banda de conducción [YOMK97], [SFTH00], lo cual coincide con los resultados aquí obtenidos.

Por otro lado, como se comentó en el apartado 2.4.4, si no se incluye la energía imagen debemos usar un valor de la altura de la barrera 0.3 eV más bajo (3.2 eV en lugar de 3.5 eV). En este caso, los valores que describen la distribución de las trampas son los mismos que cuando se incluye el término imagen (los mostrados en la tabla 3.2), salvo que la distribución está desplazada 0.3 eV hacia el fondo de la banda de conducción del óxido. De este modo, los electrones en el cátodo *ven* la misma distribución de trampas y no cambia la densidad de corriente (la mayor altura de la barrera está compensada por la adición del término imagen, como ya comprobamos en el caso de la corriente por túnel directo).

En conclusión, el ajuste a bajas tensiones de puerta de las muestras con óxidos más gruesos que, aproximadamente, 2.6 nm exige la inclusión de la corriente por túnel elástico asistido por trampas. Hemos asumido un perfil gaussiano en energía

	$t_{ox} = 2.91 \text{ nm}$	$t_{ox} = 3.22 \text{ nm}$	$t_{ox} = 3.61 \text{ nm}$
$N_0 \text{ (cm}^{-3}\text{eV}^{-1}\text{)}$	$2.6 \times 10^{12}$	$6.5 \times 10^{11}$	$1.9 \times 10^{11}$
$E_{min} \text{ (eV)}$	2.0	2.2	1.9
$E_m \text{ (eV)}$	2.5	2.7	2.4
$E_{max} \text{ (eV)}$	3.0	3.2	2.9

**Cuadro 3.2:** Parámetros de la distribución de trampas usados para ajustar los datos experimentales mostrados en la Fig. 2.15

y constante en el espacio para la distribución de las trampas y hemos obtenido los parámetros de las distribuciones de trampas (profundidad de la distribución y concentración) necesarios para reproducir los resultados experimentales. Las distribuciones obtenidas no dependen del valor de  $\phi_B$  usado, pues solamente son desplazadas de forma que queden invariantes respecto de la banda de conducción en el cátodo. Finalmente, la posición energética de los niveles se corresponde con los que tienen su origen en las vacantes de oxígeno.



## 3.4. Transiciones inelásticas asistidas por trampas

### 3.4.1. Introducción

En este apartado estudiaremos la corriente a través del óxido de puerta en dispositivos MOS como consecuencia de transiciones mediante túnel inelástico asistido por trampas situadas en el óxido de puerta.

La necesidad del estudio de éste fenómeno puede justificarse por su influencia en los tiempos de retención de memorias EEPROM y FLASH, pues puede disminuirlos. En efecto, desde principios de la década de 1990 se comprobó que estas memorias experimentaban una corriente de pérdida [ASH<sup>+</sup>93]. Hoy en día se está de acuerdo en que tiene su origen en las trampas creadas en el óxido durante la escritura y borrado de las memorias. Estos procesos son llevados a cabo mediante la inyección de electrones en régimen de Fowler-Nordheim (FN), que degrada el óxido generando trampas en su interior que favorecen la corriente con bajos campos eléctricos [LV91], [RR97]. Por ello, este exceso de corriente se denomina SILC, acrónimo de *Stress Induced Leakage Current*. Tras cierta confusión [RGL98], actualmente se ha demostrado el carácter inelástico de las transiciones, tanto por el retraso en la entrada en régimen de FN observado en las curvas de corriente SILC [RR97] como por medidas de la tasa de ionización por impacto de los electrones en el silicio, tras haber efectuado la transición [TYT99b], [GAB<sup>+</sup>00].

En la bibliografía han aparecido varios modelos para estudiar este fenómeno, habida cuenta de su importancia. Sin embargo, la mayoría de los estudios usan la misma sección eficaz de captura para todas las trampas (independientemente de su posición y de la polarización) como un parámetro de ajuste [RGL98], [TYT99a], [ISRL00a] o no calculan la energía perdida por los electrones, sino que la toman como un parámetro fijo que coincide con las medidas de energía perdida media [TYT99a]. Otros autores han estudiado el fenómeno considerando la emisión de un único fonón en cada transición, con diferente longitud de onda, según la posición de las trampas [SAE<sup>+</sup>97].

El modelo utilizado en el presente trabajo está basado en la teoría de captura y emisión no radiativa de electrones por parte de trampas mediante procesos multi-

fonón [Rid82]. Se han usado tan sólo como parámetros libres aquellos relacionados directamente con las características de las trampas, como son su posición energética relativa a la banda de conducción del óxido ( $E_T$ ), su concentración, tanto espacial como energéticamente ( $N_T(z, E')$ ) y el factor de Huang-Rhys, que es una medida del cambio en la configuración de los átomos en torno a la trampa cuando un electrón es atrapado o liberado. Al ser un modelo basado en primeros principios y usar como parámetros de ajuste las propiedades de las trampas, no necesitamos usar las secciones eficaces de captura ni las tasas de emisión como parámetros de ajuste, sino que son calculadas para cada trampa, según su posición (energética y espacial) y para cada polarización. Esto permite, por ejemplo, obtener su dependencia con la temperatura como un resultado del modelo.

Antes de la exposición del modelo empleado en el presente trabajo, comenzaremos el estudio de la corriente inelástica asistida por trampas con una breve revisión histórica, pues desde su descubrimiento a principio de la década de 1980, el exceso de corriente de puerta producido tras la inyección de portadores calientes en óxidos de puerta ha sido objeto de numerosos estudios y controversias. La revisión de estos trabajos creemos que resulta muy interesante, pues muestra cómo se ha ido, poco a poco, desvelando el origen de esta corriente desde su descubrimiento, momento en el cual sólo se contaba con una descripción fenomenológica del mismo. Además, en este apartado se expone también la situación actual, en la que todavía hay algunos puntos sobre los que no existe acuerdo.

Seguidamente, obtendremos las ecuaciones necesarias para el cálculo de las constantes de tiempo de captura y emisión y, posteriormente, buscaremos otras simplificadas para su inclusión en simuladores. Una vez calculadas las constantes de tiempo, compararemos los resultados del modelo con medidas experimentales de corriente SILC en estado estacionario. Posteriormente, analizaremos la dependencia del modelo con algunos de sus parámetros y obtendremos, como un resultado, la dependencia con la temperatura.

Aunque este formalismo puede ser usado para calcular las probabilidades de captura y emisión por trampas en diversas situaciones, nosotros lo hemos empleado en el

presente apartado únicamente para el estudio de la corriente en régimen estacionario. En el apartado 3.5 se mostrarán otros ejemplos de aplicación.

#### 3.4.2. Revisión histórica de la corriente SILC

A pesar de que desde su descubrimiento se han aclarado muchas cosas en torno al origen de la corriente SILC, todavía quedan algunas cuestiones bajo discusión [ISL<sup>+</sup>01], como la posición energética y espacial de las trampas y su naturaleza (positiva o neutra cuando están desocupadas). No obstante, tras cierta controversia [RGL98], hoy en día se está de acuerdo en el carácter inelástico de las transiciones: al ser atrapados los electrones pierden entre 1.5 y 2.2 eV de energía, cedida a la red en forma de fonones [RR97], [TYT99b], [BS99a]. En cuanto a la posición energética de las trampas creadas, se han propuesto valores entre 2.3 y 3.0 eV por debajo de la banda de conducción del óxido [VBG98], [RR97], [TYT99a].

Maserjian y Zamani fueron los primeros en observar un incremento de la corriente a través del óxido de puerta producida, con bajas tensiones de puerta, tras someter el óxido a estrés eléctrico (corriente SILC) [MZ82]. El proceso de estrés consistía en hacer pasar a través del óxido, sometido a un alto campo eléctrico, una corriente de electrones en régimen de Fowler-Nordheim, en el cual los electrones alcanzan la banda de conducción del óxido antes de llegar al ánodo. Estos autores atribuyeron el fenómeno a la presencia de cargas positivas creadas durante el proceso de estrés por los electrones calientes inyectados y a la consiguiente disminución de la barrera.

En 1989, DiMaria y Stasiak [DS89] probaron directamente la correlación existente entre la inyección de electrones calientes en el óxido y la generación de trampas en el óxido. Además, demostraron que para la creación de trampas es necesario al menos un campo eléctrico en el óxido de 1.5 MV/cm en óxidos gruesos (más que 10 nm) o que los electrones adquieran al menos 2.3 eV de energía en óxidos delgados (menores que 10 nm), en donde el transporte se realiza balísticamente o con pocos procesos de dispersión. También probaron que las trampas creadas en estas condiciones podían ser positivas (distribuidas principalmente en las interfaces) o neutras (localizadas cerca del electrodo desde el cual se inyectaron los electrones calientes).

DiMaria y Stasiak atribuyeron la corriente SILC a transiciones túnel asistidas por las trampas neutras creadas durante el proceso de estrés. Además, atribuyeron su creación a la liberación de alguna forma de hidrógeno en las cercanías del ánodo y a su posterior difusión hacia el cátodo, donde están principalmente situadas las trampas creadas.

En 1995, DiMaria y Cartier [DC95] confirmaron que las trampas neutras situadas en el interior del óxido eran las responsables de la corriente SILC, descartando otras de las explicaciones que habían sido propuestas anteriormente, como la disminución de la barrera por cargas positivas atrapadas en el óxido, la creación de defectos o agujeros en el óxido, las trampas situadas en las interfaces, trampas creadas por huecos atrapados en el óxido o la creación de estados por huecos generados en el óxido por impacto, luego atrapados y posteriormente aniquilados por electrones. Este último mecanismo queda descartado al menos para óxidos con espesores menores que 20 nm [VBG98].

Además, reforzaron la hipótesis de que las trampas que contribuyen a la corriente SILC están relacionadas con la liberación de hidrógeno por los electrones calientes, demostrando la fácil difusión del hidrógeno atómico en el dióxido de silicio y su eficacia para producir estados en el óxido. Para ello, realizaron un experimento en el que colocaron un plasma de hidrógeno en la superficie del óxido de puerta (antes de construir la puerta) para que se difundiese en su interior. Posteriormente, midieron la corriente de puerta con bajas tensiones de polarización, obteniendo curvas muy parecidas a las medidas tras someter el dispositivo a estrés eléctrico.

En cuanto a la composición y estructura de las trampas, una vez sugerida la implicación del hidrógeno, se han propuesto varias alternativas. Se ha demostrado que, tras la corriente de estrés, en el óxido se crean centros  $P_b$ , centros  $E'$  y cargas positivas [VBG98]. Los centros  $P_b$  constituyen el principal tipo de defecto presente en la interfaz Si-SiO<sub>2</sub> y consisten en átomos de silicio con enlaces erróneos (ligados a tres átomos de silicio o dos de silicio y uno de oxígeno, en lugar de a cuatro de oxígeno) y un enlace insatisfecho. Estos centros suelen ser neutralizados por hidrógeno. Según la explicación propuesta, los electrones calientes liberan especies de hidrógeno ( $H$ ,

$H^+$ ,  $OH$ , etc), que se difunden hacia el cátodo, donde activan los centros  $P_b$  según la siguiente reacción:



donde  $P_bH$  representa un centro  $P_b$  neutralizado por hidrógeno,  $[H]$  cualquier especie de hidrógeno y  $[H^*]$  una combinación de  $[H]$  con el hidrógeno atómico liberado por el centro  $P_b$  [VBG98]. En el interior del óxido se crean fundamentalmente centros  $E'$ , que consisten en una vacante de oxígeno y dos átomos de silicio con un enlace suelto. La posición energética de estos centros les puede hacer también candidatos a ser responsables de la corriente SILC. Finalmente, las cargas positivas creadas durante la inyección de electrones calientes las relacionan con la creación de defectos que actúan como impurezas donadoras [VBG98]. Estas trampas están situadas dentro de una distancia de 3 nm de la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>.

Por otro lado, mediante un modelo atómico, Blöchl y Stathis estudian muchos de los defectos presentes en el dióxido de silicio [BS99a]. Encuentran que sólo un defecto, el puente de hidrógeno cumple con los requisitos para ser el responsable de la corriente SILC. Este defecto consiste en la sustitución de un átomo de oxígeno por otro de hidrógeno y se forma por la captura de un átomo de hidrógeno intersticial por una vacante de oxígeno [BS99b]. Tiene tres estados posibles de carga: positivo, neutro y negativo.

Las siguientes características son las que han llevado a estos autores a atribuir la corriente SILC al puente de hidrógeno. Por un lado, es un defecto relacionado con el hidrógeno, cuya implicación parece suficientemente demostrada. Además, la situación energética de los estados es adecuada para asistir las transiciones túnel a través de la barrera. También concuerda con otros resultados experimentales, como el hecho de ser una trampa neutra [DC95] y de tener una energía de relajación de 1.7 eV [TYT99b].

Este defecto, a parte de transiciones desde un estado neutro a otro con carga negativa (al atrapar un electrón), también puede efectuar transiciones desde un estado con carga positiva a un estado neutro, pero con una energía de relajación mayor (2.2 eV). Esta transición podría contribuir también a la corriente SILC [BS99a].

A pesar de lo expuesto arriba, no todos los autores están de acuerdo con este esquema. M. Kimura [KO96] estudió las trampas creadas por inyección de electrones en óxidos crecidos mediante oxidación húmeda y seca y las correspondientes corrientes SILC, encontrando que no había correlación entre ambos resultados. De esto deduce que los modelos con reacciones químicas relacionadas con el agua (asociadas con  $H_2O$ ,  $OH$  y  $H$ ) no explican correctamente la corriente SILC. En lugar de estas trampas, proponen como origen de esta corriente a enlaces tensionados o con ángulos desviados creados durante la corriente de estrés.

Por otro lado, A. Yokozawa [YOMK97] ha propuesto un modelo en el que se recupera la relación de los huecos con las trampas que contribuyen a la corriente SILC. Según este autor la creación de trampas se ve favorecida por la inyección de huecos y es proporcional al número de huecos atrapados. Las vacantes de oxígeno son, según esta referencia, las responsables de la corriente SILC pero una vez que han atrapado un hueco, porque la distorsión de la red es entonces mucho mayor. Apoya esta explicación el hecho de que el nivel energético de las trampas de electrones generadas de este modo esté próximo a los 3 eV.

Para completar esta revisión de los conocimientos existentes sobre la corriente SILC, señalaremos que recientemente se ha cuestionado que sólo los electrones estén involucrados en este fenómeno y se ha medido una corriente SILC de huecos en dispositivos p-MOS. Ielmini *et al* sugieren que esta corriente está relacionada con las mismas trampas que contribuyen a la corriente de electrones [ISL<sup>+</sup>01], pero con un mecanismo diferente, que consiste en el atrapamiento de un hueco del ánodo y su posterior aniquilación por un electrón de la banda de valencia del cátodo. El modelo que han desarrollado incluye ambas transiciones (túnel asistido por trampas y recombinación en las trampas). El que se dé una u otra depende de que el electrón atrapado tenga accesible desde la trampa la banda de conducción del ánodo o no. En el estudio que realizan D. Ielmini [ISL<sup>+</sup>01] se concluye que el mecanismo de recombinación es el predominante en capacidades p-MOS y en dispositivos n-MOS con óxidos muy finos (3 nm) y tensiones de puerta negativas y bajas (entre -2 y 0 V, aproximadamente). Para reproducir los resultados experimentales, necesitan trampas

alineadas energéticamente con la banda prohibida de los electrodos (más de 3 eV por debajo de la banda de conducción del óxido de silicio) y con carga positiva (neutras cuando han atrapado a un electrón).

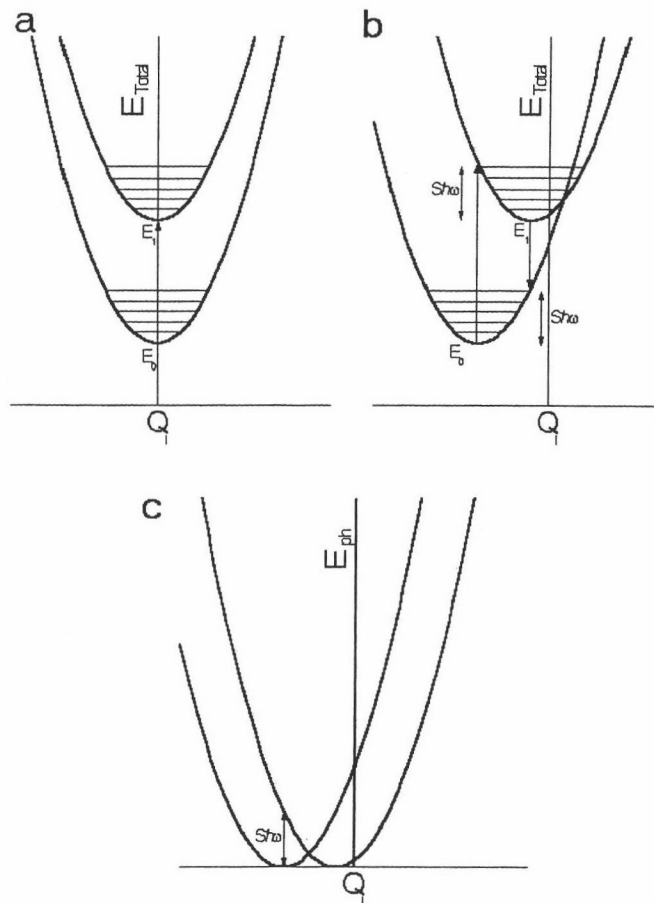
También se recurre a trampas positivas para explicar los resultados proporcionados por otros autores, como T. Wang [WZLH98] o E. Rosebaum [RR97]. Como puede verse, no hay uniformidad en cuanto a las características y origen de las trampas responsables de la corriente SILC.

### 3.4.3. Constantes de tiempo de captura y emisión

Como se expuso en el apartado 3, la expresión empleada para calcular la densidad de corriente por túnel asistido por trampas es la misma para ambos tipos de procesos (elásticos e inelásticos). Sólo el cálculo de las probabilidades de transición difiere. Sin embargo, debido a que en el túnel inelástico pueden participar electrones con diferente energía (no sólo los electrones que tienen la misma energía que el nivel de la trampa) las expresiones que se obtienen para las constantes de tiempo (3.7)-(3.9), una vez que se han sustituido las probabilidades de transición  $W_c(z, E', E)$  y  $W_e(z, E', E)$ , son considerablemente más complejas. Por eso, calculadas las probabilidades de transición terminaremos este apartado con el cálculo de las constantes de tiempo e indicando las aproximaciones necesarias para obtener unas expresiones simplificadas y adecuadas para su uso en programas de simulación.

Como hemos indicado anteriormente, el modelo desarrollado utiliza como únicos parámetros de ajuste la posición energética de las trampas, su concentración y el factor de Huang-Rhys ( $S$ ) o, equivalentemente, la mitad del desplazamiento de Stokes ( $S\hbar\omega$ ). Este parámetro es una medida de la distorsión que sufre la red cuando un electrón pasa de un estado electrónico a otro (por ejemplo, de libre a atrapado).

En la figura 3.8 se esquematiza este fenómeno y el significado del factor de Huang-Rhys. Para ello, se muestran los diagramas de configuración correspondientes a dos sistemas distintos. Estos diagramas son una representación de la energía total (vibracional más electrónica) respecto de una variable normalizada que se corresponde con la configuración de los átomos o iones de la red ( $Q_i$ ). Los segmentos horizonta-



**Figura 3.8:** Diagramas de configuración (energía en función de una coordenada de configuración). En a) y b) se representa la energía total (electrónica más vibracional). En c) se ha abstraído la componente electrónica. En a) se representa la situación en la que no hay modificación en la red al cambiar de estado el electrón ( $S\hbar\omega = 0$ ). En b) y c)  $S\hbar\omega \neq 0$ .

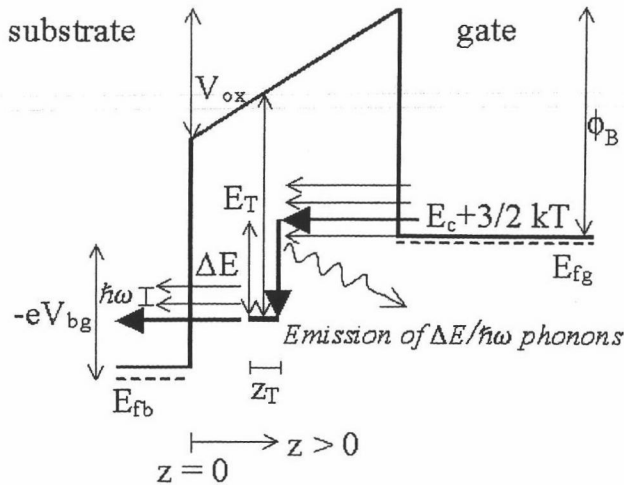


les, limitados por parábolas, representan el hecho de que la energía vibracional está cuantizada.

En la figura 3.8 se han supuesto dos estados electrónicos (por ejemplo, correspondientes al electrón libre o atrapado) con energías  $E_1$  y  $E_0$ . En el caso (a) de la figura cuando el electrón es atrapado, los iones de la red no se recolocan sino que permanecen en la misma posición. En este sistema, si el electrón en el estado fundamental es excitado (con luz de longitud de onda correspondiente a la diferencia entre los niveles) puede efectuar la transición hacia el estado  $E_1$ . En la transición contraria, se emite un fotón de energía  $E_1 - E_0$  y el espectro de absorción y de emisión serían idénticos. En este caso,  $S\hbar\omega = 0$ .

Sin embargo, en la situación mostrada en la gráfica (b), la posición de equilibrio de los iones depende del estado electrónico. Por ejemplo, cuando el electrón es atrapado, los iones de la red se recolocan y las posiciones de equilibrio de los osciladores cambian. Esto se representa en el diagrama de configuración con un desplazamiento de las parábolas que representan la energía vibracional. Como los iones tienen mucha más inercia que los electrones, habitualmente se recurre a la aproximación denominada principio de Frank-Condon, que supone que las posiciones de equilibrio de los iones no varían mientras el electrón cambia de estado [Rid82]. En este caso, si el sistema pasa de un estado con el electrón en el nivel  $E_0$  a otro con el electrón en el nivel  $E_1$  la energía aportada debe ser mayor que la diferencia entre los dos niveles electrónicos, puesto que mientras el electrón efectúa la transición (y al terminar ésta), la red está en una situación más energética que la correspondiente a la posición de equilibrio con el electrón en el nivel  $E_1$ . Este exceso de energía que hay que suministrar es justamente  $S\hbar\omega$ , que se transforma en energía vibracional cuando los iones de la red alcanzan la nueva posición de equilibrio. Es decir, en el proceso se han generado  $S$  fonones con energía  $\hbar\omega$ .

En la transición inversa (ver figura 3.8) la energía del fotón emitido es  $S\hbar\omega$  menor que la diferencia entre los dos niveles electrónicos. Por tanto, los espectros de absorción y emisión están desplazados una energía  $2S\hbar\omega$ , que se denomina desplazamiento de Stokes [Mad78].



**Figura 3.9:** Diagrama que muestra las transiciones asistidas por trampas con emisión multifonón y algunos de los parámetros del modelo.

En el estudio que realizaremos a continuación, las transiciones entre los estados electrónicos se realizan de forma no radiativa, únicamente mediante intercambio de fonones. Es decir, se pasa del estado inicial (con energía electrónica  $E_1$ , por ejemplo, y cierta energía vibracional) a un estado final con energía electrónica  $E_0$  y con la energía vibracional tal que la energía total sea la misma que la del estado inicial.

**3.4.3.1. Cálculo de la probabilidad de transición por túnel inelástico asistido por trampas**

En la figura 3.9 se muestra un esquema de los procesos considerados en este apartado. Las flechas indican las posibles transiciones para los electrones procedentes del cátodo. En primer lugar, hay una transición desde el estado inicial en la puerta y el estado atrapado. La energía electrónica de este estado es menor que la inicial, disipándose la diferencia mediante la emisión de fonones. El segundo paso es la emisión (con posible absorción de fonones) de un electrón desde la trampa al ánodo. Las flechas más gruesas indican las transiciones principales, como se explicará después.

La probabilidad, por unidad de tiempo, de emisión hacia el ánodo de un electrón

atrapado ( $W_e(z, E', E)$ ) se calculará a partir de la de captura por la trampa de un electrón situado en el ánodo, haciendo uso del principio de equilibrio microscópico:

$$W_e(z, E', E) \equiv W_e^a(z, E', E) = W_c^a(z, E', E) \exp\left(-\frac{\Delta E_a}{KT}\right). \quad (3.43)$$

$\Delta E_a$  es la diferencia entre la energía electrónica del estado en el ánodo ( $E$ ) y la del estado atrapado ( $E'$ ). Para evitar confusiones, hemos añadido un superíndice (que mantendremos en lo sucesivo en este apartado) para indicar el electrodo que interviene en la transición, hacia o desde la trampa. El subíndice, como anteriormente, indica el tipo de proceso: captura o emisión.

De nuevo, haremos uso de la regla de oro de Fermi para calcular las probabilidades de captura de un electrón por parte de las trampas. El hamiltoniano de perturbación es, en este caso, la parte no adiabática del hamiltoniano total del cristal. Este término se desprecia en la aproximación de Born-Oppenheimer porque acopla el movimiento de los electrones y de la red [Mad78]. Por tanto, la parte no adiabática es la responsable de las transiciones entre los estados descritos mediante la aproximación adiabática [Rid82]. Las probabilidades de captura de un electrón por unidad de tiempo,  $W_c^c(E, z)$  y  $W_c^a(E, z)$ , son obtenidas tras un promediado térmico sobre todos los estados vibracionales de la red en el estado inicial [Rid78]. El resultado final es [ZTN94]:

$$W_c^{c,a}(z, E', E) = \frac{\pi}{\hbar} |V_e|^2 S \left(1 - \frac{p}{S}\right)^2 \frac{1}{\hbar\omega} \exp\left(- (2n+1)S + \frac{\Delta E}{2kT}\right) \sum_{m=0} I_m(\xi) \delta(m-p). \quad (3.44)$$

El término  $|V_e|^2$  es el elemento de la matriz de transición,  $|\langle \phi_f | U | \phi_i \rangle|^2$ , donde  $U$  es el potencial de acoplamiento electrón-fonón, y  $\phi_i$  y  $\phi_f$  son las funciones de onda electrónica de los estados inicial y final, respectivamente;  $S$  es el factor de Huang-Rhys, que caracteriza el efecto de la interacción electrón-fonón sobre la posición de equilibrio de los osciladores de la red y se usará como un parámetro de ajuste del modelo;  $\hbar\omega$  es la energía de los fonones involucrados en las transiciones (o el *quantum* de energía vibracional) y  $\Delta E$  es la diferencia entre la energía, puramente electrónica, de los estados atrapado y libre. Por tanto,  $p = \Delta E/\hbar\omega$  es el número de fonones emitidos a causa de esta diferencia de energía. La población de fonones,  $n$ , viene

dada por la estadística de Bose.  $\xi$  se define como  $2S[n(n+1)]^{1/2}$ . Finalmente,  $I_m(\xi)$  es la función de Bessel modificada de orden  $m$ . Con los valores usuales que tomarán  $m$  y  $\xi$  en nuestras simulaciones, se cumple la condición  $(m^2 + \xi^2)^{1/2} \gg 1$ . Esto permite aproximar  $I_m(\xi)$  por [ZTN94]:

$$I_m(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\sqrt{m^2 + \xi^2}}}{(m^2 + \xi^2)^{1/4}} \left( \frac{\xi}{m + \sqrt{m^2 + \xi^2}} \right)^m. \quad (3.45)$$

La energía  $S\hbar\omega$  es la mitad de la energía de desplazamiento de Stokes, que es la energía involucrada en el cambio de la configuración espacial de los osciladores de la red cuando un electrón es atrapado o liberado. En las referencias [PGJT<sup>+</sup>97] y [HS95] se muestra que no hay diferencia apreciable en la probabilidad multifonón cuando se usan diferentes valores de  $S$  y  $\hbar\omega$  si el valor del producto  $S\hbar\omega$  es el mismo. Por tanto, usaremos en todas las simulaciones el mismo valor para  $\hbar\omega$  (20 meV, como en la referencia [FRZF90]) y  $S$  como un parámetro de ajuste.

Antes de seguir con el cálculo de las probabilidades  $W_c^{c,a}$ , comentaremos dos de las aproximaciones realizadas. En primer lugar, los niveles electrónicos han sido calculados despreciando la interacción electrón-fonón, aunque se sabe que como consecuencia de esta interacción se produce un desplazamiento en la energía electrónica. Este desplazamiento se debería tener en cuenta al calcular  $\Delta E$  y  $p$  [Rid78]. Sin embargo, se asumirá que es un término constante, independiente del estado no atrapado. De hecho, la parte de este desplazamiento dependiente del estado libre es habitualmente despreciada [Rid82]. La parte restante, asociada con el estado atrapado, puede incluirse en el parámetro que caracteriza el nivel de la trampa,  $E_T$ , que es uno de los parámetros libres o de ajuste del modelo.

Por otro lado, la expresión (3.44) es un caso particular de una más general (véase [ZTN94]), válida si el potencial de deformación óptico es el que describe el acoplamiento electrón-fonón [Rid82], [ZTN94], como se ha asumido en el presente trabajo.

Para el cálculo de las probabilidades  $W_c^{c,a}$  con la expresión (3.44), necesitamos un modelo para la descripción de los estados libre y atrapado. La función de onda de un

electrón en una subbanda en un canal de inversión es [AFS82]:

$$|\phi_i(z)\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}}\zeta(z), \quad (3.46)$$

donde  $\zeta(z)$  es la función de onda normalizada en la dirección perpendicular a la interface y  $A$  es el área del canal. Si el estado inicial es no ligado, entonces la función de onda viene dada por:

$$|\phi_i(z)\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\zeta_L(z), \quad (3.47)$$

donde  $V = A \times L$ . La función  $\zeta_L(z)$  está normalizada sobre una longitud  $L$  perpendicular a la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>. Las funciones de onda  $\zeta(z)$  y  $\zeta_L(z)$  se han calculado en las simulaciones realizadas en el presente trabajo resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger. De este modo, el efecto del campo eléctrico ya está incluido en el cálculo de los estados electrónicos  $\phi_{f,i}$ .

En los modelos usados en el estudio de niveles profundos en semiconductores, la carga de la trampa es habitualmente tenida en cuenta multiplicando la función de onda del estado libre, en la región cercana a la trampa, por el factor  $(C_0)^{1/2}$ , donde  $C_0$  es el factor de Sommerfeld [ZTN94], [Rid80]. Por tanto, en el cálculo de los elementos de matriz  $|\langle\phi_f|U|\phi_i\rangle|^2$  y de la integral de solapamiento (ver más abajo), consideraremos que [Pal95]:

$$|\phi_i(z)\rangle = (C_0)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{V}}\zeta_L(z) \quad (\text{si } |z - z_0| < \frac{z_T}{2}) \quad (3.48)$$

(sustitúyase  $V$  por  $A$  y  $\zeta_L(z)$  por  $\zeta(z)$  en el caso bidimensional), donde  $z_0$  es la posición del centro de la trampa y  $z_T$  su anchura. El factor de Sommerfeld se define como [Rid80]:

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta}-1}, & \eta &= -Z \left( \frac{R_H^*}{E} \right)^{1/2} & \text{si } Z \neq 0. \\ C_0 &= 1 & & & \text{si } Z = 0. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Donde  $Z$  es la carga de la trampa,  $E$  es la energía del estado libre y  $R_H^*$  es la energía efectiva de Bohr:

$$R_H^* = \frac{(e^2/4\pi\epsilon_{ox})^2}{2(\hbar^2/m_{ox}^*)}. \quad (3.50)$$

El resto de los símbolos tiene su significado habitual.

Para la función de onda de los electrones atrapados, hemos usado un modelo de bola de billar:

$$\begin{aligned} |\phi_f(z)\rangle &= \sqrt{\frac{1}{z_T^3}} \equiv \sqrt{\frac{3}{4\pi a_T^3}} \equiv V_T^{-1/2} \quad (\text{si } |z - z_0| < \frac{z_T}{2}) \\ |\phi_f(z)\rangle &= 0 \quad (\text{si } |z - z_0| > \frac{z_T}{2}) \end{aligned} \quad (3.51)$$

El radio de la trampa ( $a_T$ ) se ha estimado, como en el apartado 3.3.2, según la siguiente expresión:

$$a_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_{ox}^* E_T}}. \quad (3.52)$$

Finalmente, usando la expresión del potencial óptico de deformación para la descripción de la interacción electrón-fonón, se obtienen los elementos de transición  $|V_e|^2$  a partir de la siguiente ecuación [PGJT<sup>+</sup>97]:

$$|V_e|^2 = |\langle \phi_f | U | \phi_i \rangle|^2 = 5\pi S(\hbar\omega)^2 \frac{a_T^2}{V} \int_{z_0 - z_T/2}^{z_0 + z_T/2} |\zeta_L(z)|^2 dz, \quad (3.53)$$

( $V$  debe cambiarse por  $A$  y  $\zeta_L(z)$  por  $\zeta(z)$  en el caso bidimensional). El volumen  $V$  (o el área  $A$ ) se cancela con el respectivo término de la densidad de estados tridimensional (bidimensional).

Una vez obtenidas las probabilidades de captura podemos calcular ya las constantes de tiempo, como se muestra en el siguiente apartado.

### 3.4.3.2. Expresiones simplificadas de las constantes de tiempo de captura y emisión

Antes de sustituir las probabilidades de transición en las expresiones de las constantes de tiempo (3.7) - (3.9), hemos supuesto que las probabilidades de transición,  $W_c$ , no dependen de la energía transversal  $E_z$ , por lo que las integrales en  $E_z$  con las densidades de estados unidimensional y bidimensional resultan ser la densidad de estados tridimensional. El tiempo de captura en el caso bidimensional no se ve afectado por esta aproximación. Por tanto, con la notación empleada en este apartado, tenemos que:

$$\tau_c^{-1}(z, E') = \int_{E_T(z)}^{\infty} N_c(E) f_c(E) W_c^c(z, E', E) dE, \quad (3.54)$$

$$\tau_e^{-1}(z, E') = \int_{E_T(z)}^{\infty} N_a(E)(1 - f_a(E))W_e^a(z, E', E)dE. \quad (3.55)$$

Como ya se comentó, la probabilidad de emisión de un electrón desde una trampa hacia el ánodo,  $W_e^a(z, E', E)$  se calcula a partir de la de captura de un electrón libre en el ánodo por parte de la misma trampa,  $W_c^a(z, E', E)$ , haciendo uso del principio de equilibrio microscópico (ec. (3.43)). Puesto que hemos calculado en el apartado anterior las probabilidades  $W_c^{c,a}(z, E', E)$ , estamos ya en condiciones de obtener las constantes de tiempo.

El tiempo de captura se obtiene por substitución de la ecuación (3.44) en la expresión (3.54):

$$\tau_c^{-1}(z, E') = \sum_{p=p_1} N_c(E)f_c(E) \frac{\pi |V_e|^2}{\hbar^2 \omega} S \left(1 - \frac{p}{S}\right)^2 e^{-S(2n+1) + \frac{p\hbar\omega}{2kT}} I_p(\xi). \quad (3.56)$$

La sumatoria de la ecuación (3.44) ha transformado la integral de la expresión (3.7) en otra sumatoria, seleccionando sólo aquellas energías  $E$  que proporcionan un número  $p$  entero. La sumatoria (3.56) comienza desde el valor  $p_1$  dado por el fondo de la banda de conducción en la puerta (o por el fondo de la subbanda correspondiente, en el caso de transiciones desde un canal de inversión). Aunque la suma tiene infinitos términos, en la práctica sólo los primeros contribuyen apreciablemente, como consecuencia del factor de ocupación,  $f_c(E)$ . De todas formas, para conseguir una expresión más compacta, hemos realizado la siguiente aproximación, con un error estimado inferior al 10 %. Consiste en suponer que todos los electrones tienen la misma energía, correspondiente a la del fondo de la banda de conducción más la energía cinética media  $\frac{3}{2}kT$  (o la del fondo de la subbanda más  $kT$ , en el caso bidimensional). De esta forma se obtiene [JMPG+01]:

$$\tau_c^{-1}(z, E' = V(z) - E_T) \simeq \frac{\pi |V_e|^2}{\hbar^2 \omega} S \left(1 - \frac{p_0}{S}\right)^2 e^{-S(2n+1) + \frac{p_0\hbar\omega}{2kT}} I_{p_0}(\xi) \int_{E_c}^{\infty} N_c(E)f_c(E)dE, \quad (3.57)$$

donde:

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\frac{3}{2}kT - E'}{\hbar\omega} && \text{(gas de electrones tridimensional)} \\ p_0 &= \frac{E_i + kT - E'}{\hbar\omega} && \text{(gas de electrones bidimensional)} \end{aligned} \quad (3.58)$$

$V(z)$  es la energía potencial en la posición  $z$ :

$$V(z) = -e\phi(z) + E_{C0}(z),$$

donde  $\phi(z)$  es el potencial electrostático, solución de la ecuación de Poisson y  $E_{C0}(z)$  tiene en cuenta la discontinuidad en la banda de conducción, como se muestra en la figura 3.9. Finalmente,  $E_i$  es la diferencia entre el fondo de la subbanda y el fondo de la banda de conducción del silicio en su zona neutra.

Por otro lado, para calcular el tiempo de emisión, sustituimos las expresiones (3.43) y (3.44) en (3.9). Se obtiene:

$$\tau_e^{-1}(z) = \sum_{p=0} N_a(E) (1 - f_a(E)) \frac{\pi |V_e|^2}{\hbar^2 \omega} S \left(1 - \frac{p}{S}\right)^2 e^{-S(2n+1) + \frac{p\hbar\omega}{2kT}} I_p(\xi) e^{-\frac{p\hbar\omega}{kT}}. \quad (3.59)$$

Para obtener una expresión más compacta, supondremos que todas las emisiones desde la trampa se llevan a cabo sin absorción de fonones ( $p = 0$ ). Esta aproximación se apoya en el hecho de que las funciones  $I_p(\xi)$  decrecen cuando  $p$  se incrementa. Además, esta tendencia se refuerza por la exponencial  $e^{-p\hbar\omega/kT}$ , procedente de la aplicación del principio de equilibrio microscópico (3.43), que se convierte en  $W_e^a(z, E', E) = W_c^a(z, E', E)$  para estas transiciones. Finalmente, con la aproximación  $f_a(E) \simeq 0$ , se obtiene la expresión [JMPG<sup>+</sup>01]:

$$\tau_e^{-1}(z) \simeq \frac{\pi |V_e|^2}{\hbar^2 \omega} S e^{-S(2n+1)} I_0(\xi) N_a(E). \quad (3.60)$$

Las expresiones finales a las que hemos llegado de las constantes de tiempo, (3.57) y (3.60), pueden ser usadas para estudiar diversos tipos de problemas relacionados con trampas en el óxido de dispositivos MOS o en otras heteroestructuras donde exista una barrera de potencial con trampas en su interior. Además, se puede aplicar también a un mayor rango de problemas si nos quedamos al nivel de las probabilidades de transición de un electrón  $W_{c,e}(z, E', E)$  (ecuación (3.44)), que podrían ser usadas, por ejemplo, en simuladores de Monte-Carlo para estudiar la corriente túnel con el transistor MOSFETs funcionando normalmente (esto es, con una función de distribución para los electrones distinta de la de Fermi-Dirac), el ruido debido a las trampas próximas a la interface [PGJT<sup>+</sup>97] o la corriente transitoria causada por procesos de atrapamiento y liberación tras someter el óxido a estrés mediante corriente en régimen de Fowler-Nordheim.

Una vez calculadas las probabilidades de transición, para validar el modelo, hemos



centrado nuestra atención en primer lugar en la corriente en régimen estacionario a través de capacidades MOS sometidas a estrés eléctrico. La razón es que éste es un fenómeno experimentalmente muy estudiado y se pueden encontrar abundantes medidas en la bibliografía.

En los siguientes apartados compararemos los resultados proporcionados por nuestro modelo de corriente SILC en estado estacionario con los obtenidos experimentalmente y analizaremos la influencia de los parámetros de las trampas.

#### 3.4.4. Distribución espacial y carga de las trampas

Antes de mostrar los resultados del modelo y las comparaciones con resultados experimentales, en este apartado comentaremos la distribución espacial de trampas que se ha supuesto en las simulaciones realizadas y que posteriormente mostraremos. También explicaremos brevemente cómo hemos tenido en cuenta la carga atrapada en el óxido en la resolución de la ecuación de Poisson.

En la bibliografía de la que se han obtenido los resultados experimentales, las trampas de los dispositivos estudiados fueron creadas después de someterlos a estrés eléctrico mediante corriente en régimen de FN (con polarización de puerta negativa generalmente). Por tanto, cabe esperar que la máxima concentración de trampas esté cerca de la interfaz entre el óxido y la puerta [DC95], mientras que el mínimo se encuentre en la interfaz substrato-óxido.

Hemos supuesto la siguiente dependencia de la concentración de las trampas con la posición (el origen del eje  $z$  está sobre la interfaz substrato-óxido):

$$N_T(z) = N_0 e^{-\Lambda(t_{ox}-z)}, \quad (3.61)$$

donde  $\Lambda = \frac{-\ln(10^{-\lambda})}{t_{ox}}$ .  $\lambda$  es el logaritmo decimal del cociente entre la concentración en la interfaz óxido-puerta y la concentración en la interfaz substrato-óxido.

Por otro lado, como comprobaremos más adelante, en la resolución de la ecuación de Poisson debemos tener en cuenta la carga en el óxido [SAE<sup>+</sup>97], [ISRL00b], que depende del tipo y concentración de las trampas. Se han considerado dos tipos de trampas: trampas neutras, que se convierten en negativas cuando atrapan un electrón;

o trampas positivas, que se convierten en neutras al atrapar un electrón. En el primer caso, la densidad de carga es:

$$\rho(z) = -eN_T(z)f_T(z), \quad (3.62)$$

y en el segundo:

$$\rho(z) = eN_T(z)(1 - f_T(z)). \quad (3.63)$$

A partir de la ecuación (3.1), particularizada para el estado estacionario, se obtiene que la función de ocupación viene dada por:

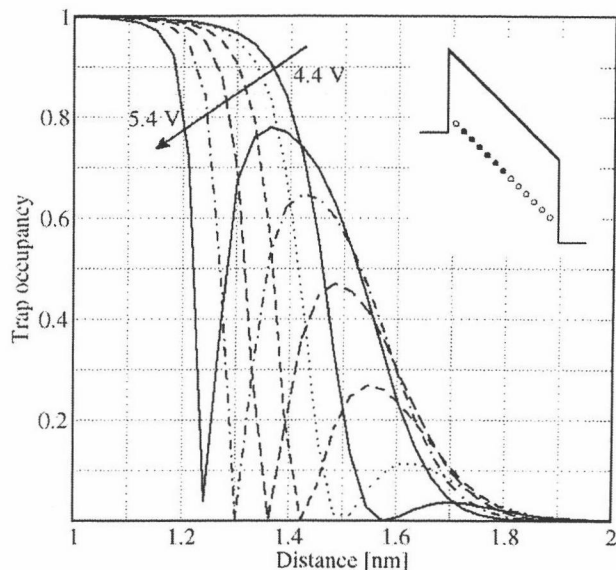
$$f_T(z) = \frac{1}{1 + \frac{\tau_e^{-1}}{\tau_c^{-1}}}. \quad (3.64)$$

La resolución de la ecuación de Poisson y el cálculo de la función de ocupación se ha realizado siguiendo un esquema iterativo: en primer lugar, la ecuación de Poisson se resuelve sin considerar carga. Entonces se calculan las constantes de tiempo de captura y emisión y la correspondiente función de ocupación en estado estacionario,  $f_T(z)$ . Incorporando ahora la carga en el óxido según la función de ocupación obtenida, se resuelve la ecuación de Poisson otra vez. El proceso se repite hasta que se alcance la convergencia.

Puede comprobarse a partir de la ecuación (3.64) que, en general, las trampas cercanas a la puerta, o al cátodo en general (donde  $\tau_c^{-1} \gg \tau_e^{-1}$ ), están casi completamente ocupadas, si participan en la conducción. Sin embargo, las trampas próximas al substrato (ánodo) están prácticamente vacías.

Esto se muestra en la figura 3.10, en donde se ha representado la función de ocupación para diferentes tensiones de puerta. Se puede apreciar que las trampas más ocupadas son las próximas al cátodo por tener mayor constante de tiempo de emisión, mientras que las más cercanas al ánodo están prácticamente vacías.

Conforme aumenta la polarización, aumenta la probabilidad de emisión de todas las trampas y, por tanto, sólo las trampas más próximas al cátodo están totalmente ocupadas. Los mínimos de la función de ocupación observados entre 1.2 y 1.6 nm están principalmente motivados por el hecho de que la emisión desde las trampas correspondientes está determinada por una barrera triangular (régimen de FN), en

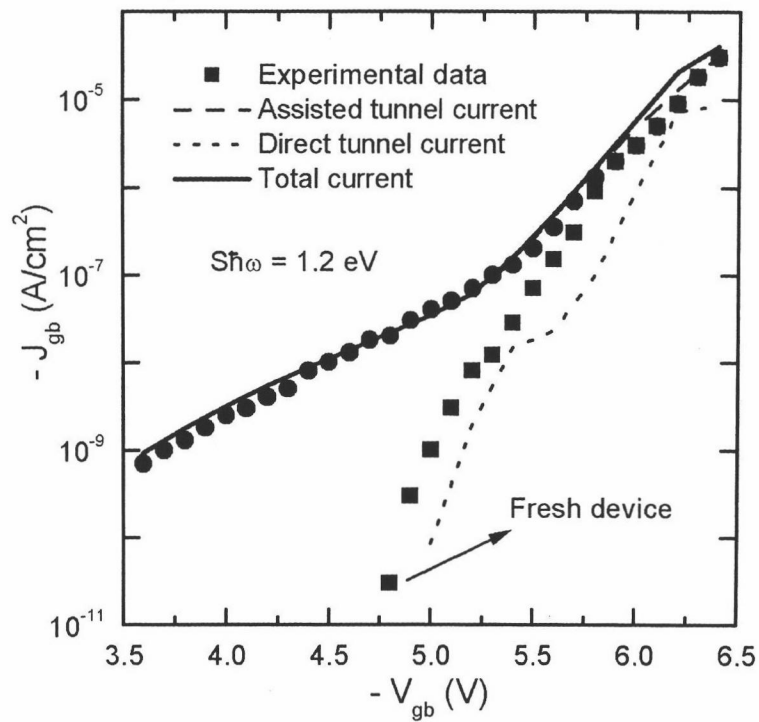


**Figura 3.10:** Función de ocupación para diferentes tensiones de puerta. El espesor del óxido es 3 nm y la profundidad de las trampas  $E_T = 3$  eV. La posición aproximada de las trampas mayoritariamente ocupadas se muestra en la figura insertada.

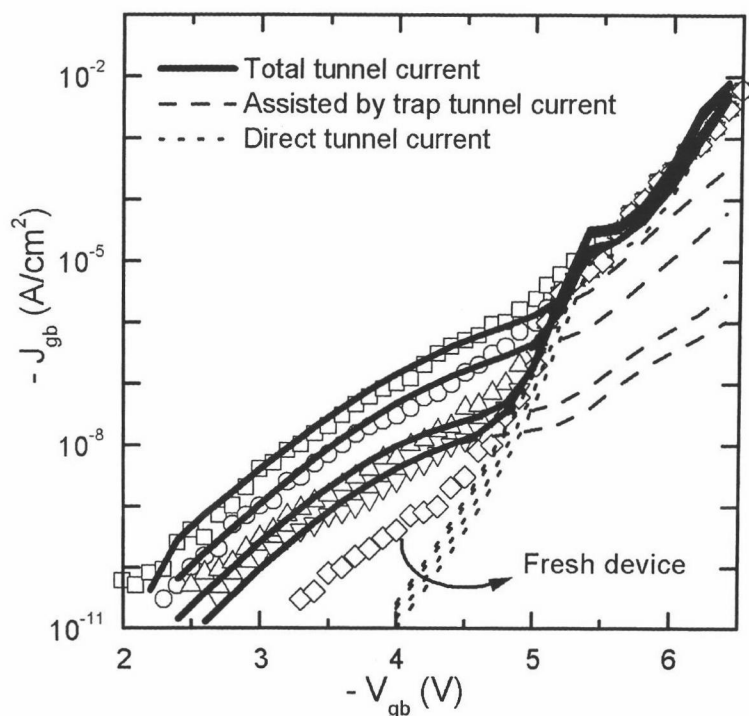
lugar de trapezoidal, por lo que pueden tener menor constante de tiempo de emisión que trampas situadas más cerca del ánodo. También determinan la función de ocupación de las trampas la dependencia del tiempo de captura con el número de fonones necesarios para que se produzca la transición y las oscilaciones de la constante de tiempo de emisión típicas del régimen de FN. Estos fenómenos se analizarán con más detalle en los siguientes apartados.

### 3.4.5. Comparación con resultados experimentales

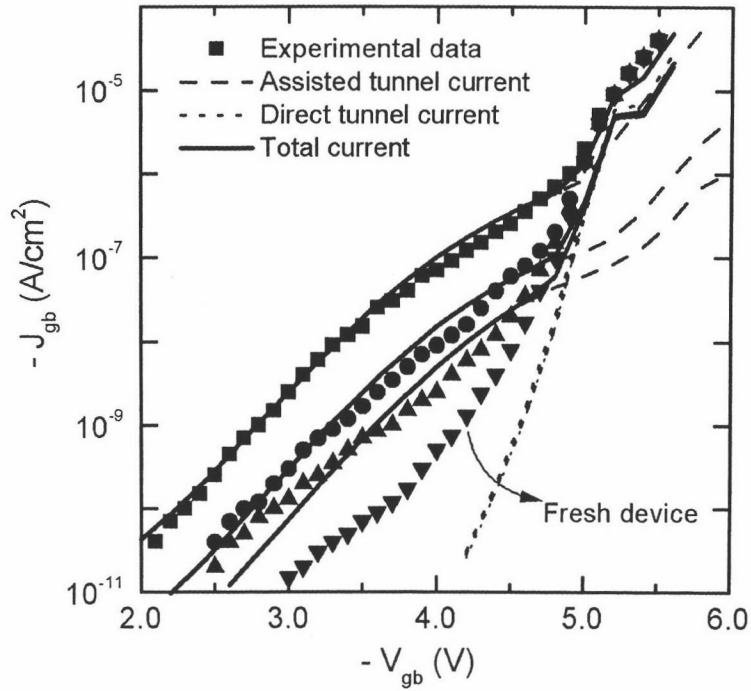
Para comprobar la bondad del modelo, hemos ajustado resultados de la bibliografía con los obtenidos con nuestras simulaciones (ver figs. 3.11, 3.12 y 3.13). Como puede observarse, todos los datos experimentales, aún procedentes de referencias distintas, han sido ajustados con valores muy similares de  $E_T$  y  $S\hbar\omega$ . Además, los valores de  $S\hbar\omega$  empleados están de acuerdo con otros previamente utilizados [PGJT<sup>+</sup>97], [PLVC96].



**Figura 3.11:** Comparación entre los resultados del modelo y los datos experimentales de la Ref. [TYT99b] ( $t_{ox} = 5.8 \text{ nm}$ ). Los parámetros de las trampas son:  $E_T = 2.8 \text{ eV}$ ,  $S\hbar\omega = 1.2 \text{ eV}$ ,  $N_0 = 7.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\lambda = 1$  y trampas neutras.



**Figura 3.12:** Comparación entre los resultados del modelo y los datos experimentales de la Ref. [RGL98] ( $t_{ox} = 5.0$  nm). Los parámetros de las trampas son (de la curva superior a la inferior):  $E_T = 2.7$  eV,  $S\hbar\omega = 1.3$  eV y  $N_0 = 3.0 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>;  $E_T = 2.7$  eV,  $S\hbar\omega = 1.4$  eV y  $N_0 = 2.0 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.6$  eV y  $N_0 = 1.0 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.7$  eV y  $N_0 = 7.0 \times 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>. El parámetro  $\lambda = 0$  para todas las muestras. En todos los casos las trampas son neutras.



**Figura 3.13:** Comparación entre los resultados del modelo y los datos experimentales de la Ref. [RR97] ( $t_{ox} = 5.5$  nm). Los parámetros de las trampas son (de la curva superior a la inferior):  $E_T = 2.4$  eV,  $S\hbar\omega = 1.5$  eV and  $N_0 = 5.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ;  $E_T = 2.5$  eV,  $S\hbar\omega = 1.8$  eV and  $N_0 = 5.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ;  $E_T = 2.5$  eV,  $S\hbar\omega = 2.0$  eV and  $N_0 = 6.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . El parámetro  $\lambda = 1$  para todas las muestras. Se han asumido trampas positivas en todos los casos.

Para reproducir los resultados experimentales mostrados en las figuras 3.11 y 3.12 hemos tenido que asumir que las trampas son neutras (cuando están vacías, esto es, cuando no han atrapado un electrón). Si se hubiera intentado reproducir los resultados experimentales empleando trampas positivas (neutras cuando han atrapado un electrón), las curvas experimentales quedarían a la derecha de las obtenidas mediante la simulación. Esto es, las curvas calculadas estarían desplazadas hacia bajas polarizaciones, como consecuencia de la disminución de la barrera en el interior del óxido y el consecuente adelantamiento de la entrada en el régimen de FN. En la sección 3.4.6.2 ilustraremos este hecho con mayor detalle.

Sin embargo, para reproducir los resultados experimentales de la Ref. [RR97] hemos tenido que suponer trampas positivas, neutras al atrapar un electrón. En caso contrario, las curvas calculadas quedan desplazadas hacia altas polarizaciones respecto de las experimentales. Este resultado está de acuerdo con las propias medidas de E. Rosenbaum [RR97], que muestran un desplazamiento de la corriente en régimen de Fowler-Nordheim negativo de las muestras estresadas respecto a las no sometidas a estrés.

En la bibliografía, se han empleado tanto trampas positivas como neutras para ajustar datos experimentales [DC95], [RR97], [WZLH98], [TYT99a], [LEM00], [ISRL00b] y se ha informado de que ambos tipos de trampas pueden producirse durante el proceso de estrés [ASH<sup>+</sup>93].

Por supuesto, el nivel y la pendiente de las curvas de corriente directa y asistida calculadas depende del valor tomado para la masa efectiva en la barrera. Por tanto, las conclusiones acerca de la carga de las trampas parecen depender de la masa efectiva en el óxido que se haya asumido. Sin embargo, nótese que hemos empleado el mismo valor ( $m_{ox} = 0.42m_0$ ) para todas las muestras, procedentes de tres referencias distintas. Además, este valor de  $m_{ox}$  ha sido previamente usado para ajustar curvas de corriente túnel en régimen de FN con muy buenos resultados [SH97].

Como puede verse, con el presente modelo podemos obtener las características de las trampas (carga, profundidad energética, concentración y factor de Huang-Rhys) a partir del ajuste de curvas experimentales de corriente SILC, y por tanto analizar

el tipo de trampas originadas mediante diferentes procesos de estrés. Por ejemplo, las muestras empleadas para obtener los resultados experimentales de la Fig. 3.13 fueron sometidas a diferente corriente y tiempo de estrés, pero de forma que la carga inyectada total fuese la misma. Se puede observar que, según los resultados de nuestro modelo, esto implica que el valor de la densidad de corriente inyectada afecta al valor de  $S\hbar\omega$  de las trampas generadas. En la siguiente sección estudiaremos la influencia de cada uno de estos parámetros sobre las curvas de corriente obtenidas mediante la simulación para poder así interpretar y ajustar con mayor facilidad las curvas experimentales de corriente SILC.

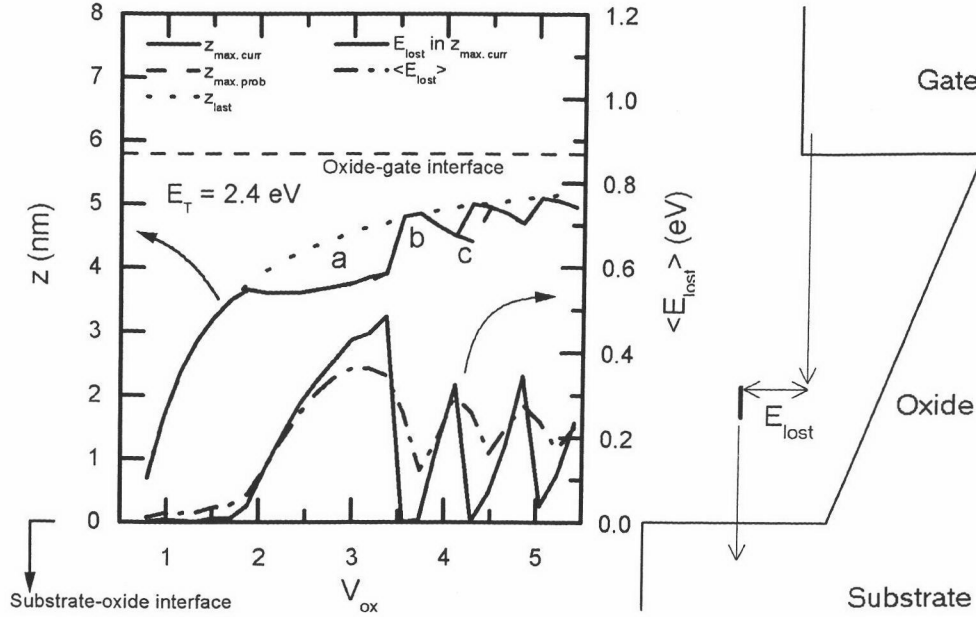
Finalmente, nótese que en todos los casos (Figs. 3.11, 3.12 y 3.13) no coincide (con baja polarización de la puerta) la corriente experimental del dispositivo no estresado con la corriente directa obtenida mediante las simulaciones. Como ya se explicó, la causa es la corriente asistida por trampas nativas en el óxido virgen, que se superpone a la corriente por túnel directo. Se ha demostrado experimentalmente que estas transiciones tienen carácter elástico [GAB<sup>+</sup>00] y, por tanto, no se han tenido en cuenta en este apartado. En la sección 3.3 se ha desarrollado un modelo para el estudio de las transiciones elásticas asistidas por trampas.

### 3.4.6. Simulaciones y resultados

Usando el modelo desarrollado en el apartado 3.4.3, en esta sección analizaremos la influencia sobre las curvas de corriente asistida por trampas de los parámetros del modelo: carga de las trampas, situación energética, concentración y factor de Huang-Rhys. Previamente, obtendremos las curvas teóricas de energía perdida por término medio por los electrones que efectúan la transición túnel. Interpretaremos su forma y la relacionaremos con las trampas que, para cada polarización, principalmente contribuyen a la corriente y el régimen en el que se encuentran (barrera trapezoidal o triangular, en régimen de FN).

En todas las simulaciones mostradas en esta sección, los parámetros usados son:  $t_{ox} = 5.8$  nm; dopado del polisilicio de puerta  $n^+$ ,  $N_D(poly) = 5 \times 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>; dopado del substrato,  $N_D(sub) = 5 \times 10^{15}$  cm<sup>-3</sup> (como en el dispositivo empleado en la



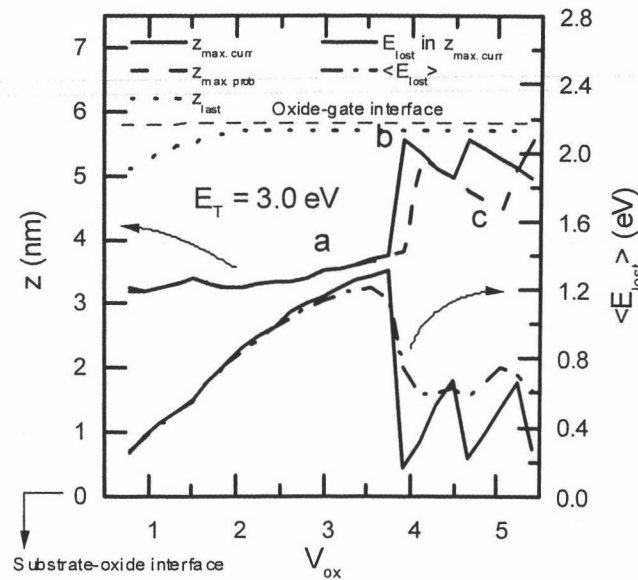


**Figura 3.14:** Posición de las trampas que más contribuyen a la corriente ( $z_{max.curr}$ ), que tienen la mayor probabilidad de asistir un proceso túnel ( $z_{max.prob}$ ) y que están más próximas a la puerta y contribuyen a la corriente túnel ( $z_{last}$ ). También se muestra la energía perdida en las trampas que más contribuyen a la corriente ( $E_{lost}$ ) y la energía perdida media por los electrones ( $\langle E_{lost} \rangle$ ).

referencia [TYT99b]);  $N_0 = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ;  $\lambda = 1$ ;  $S\hbar\omega = 0.6 \text{ eV}$ .

### 3.4.6.1. Interpretación de las curvas de energía perdida media frente a tensión en el óxido

En este apartado, estudiamos la dependencia de la energía perdida media ( $\langle E_{lost} \rangle$ ) con la caída de tensión en el óxido ( $V_{ox}$ ). Las figuras 3.14 y 3.15 ilustran la evolución de  $\langle E_{lost} \rangle$  cuando  $V_{ox}$  cambia. En estas gráficas se han representado la posición  $z_{max.curr}$  de las trampas que más contribuyen a la corriente (en las cuales el término  $R$  alcanza su máximo valor) y la situación  $z_{max.prob}$  de las trampas que más alta probabilidad tienen de asistir un proceso túnel (esto es, aquellas en las que es máximo el término  $1/[\tau_c + \tau_e]$ ). Ambas posiciones no coinciden siempre a causa del perfil de la concentración de trampas a lo largo del óxido (ver ec. (3.5)). También se muestra



**Figura 3.15:** Posición de las trampas que más contribuyen a la corriente ( $z_{max.curr}$ ), que tienen la mayor probabilidad de asistir un proceso túnel ( $z_{max.prob}$ ) y que están más próximas a la puerta y contribuyen a la corriente túnel ( $z_{last}$ ). También se muestra la energía perdida en las trampas que más contribuyen a la corriente ( $E_{lost}$ ) y la energía perdida media por los electrones ( $\langle E_{lost} \rangle$ ).

la posición de las trampas más cercanas al cátodo (la puerta, en nuestro caso) y que contribuyen a la corriente (por ser su posición energética inferior a la banda de conducción en la puerta). Finalmente, se muestra la energía perdida por los electrones que efectúan su transición asistidos por las trampas situadas en la posición  $z_{max.curr}$ , así como la energía perdida media por parte los electrones.

Para el análisis de éstas gráficas, nos centraremos en primer lugar en la correspondiente a las trampas con  $E_T = 2.4$  eV (Fig. 3.14). Esta figura muestra que las trampas cercanas al ánodo (a la interfaz sustrato-óxido) son las únicas capaces de asistir transiciones túnel con baja tensión de puerta. Cuando se incrementa la tensión en el óxido, progresivamente trampas situadas más hacia el interior quedan también por debajo de la banda de conducción en el cátodo y pueden, por tanto, asistir tran-

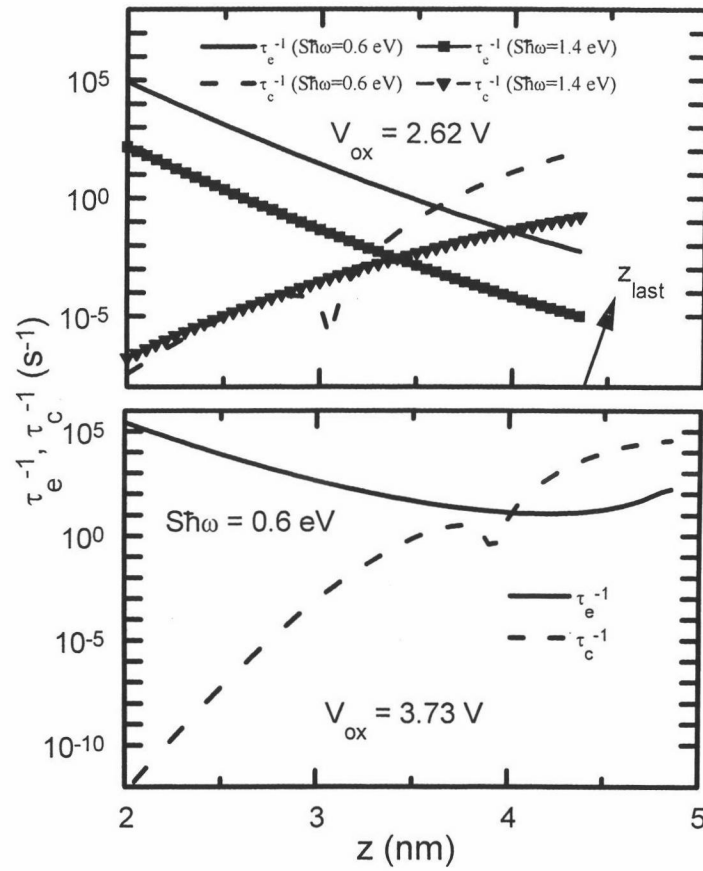
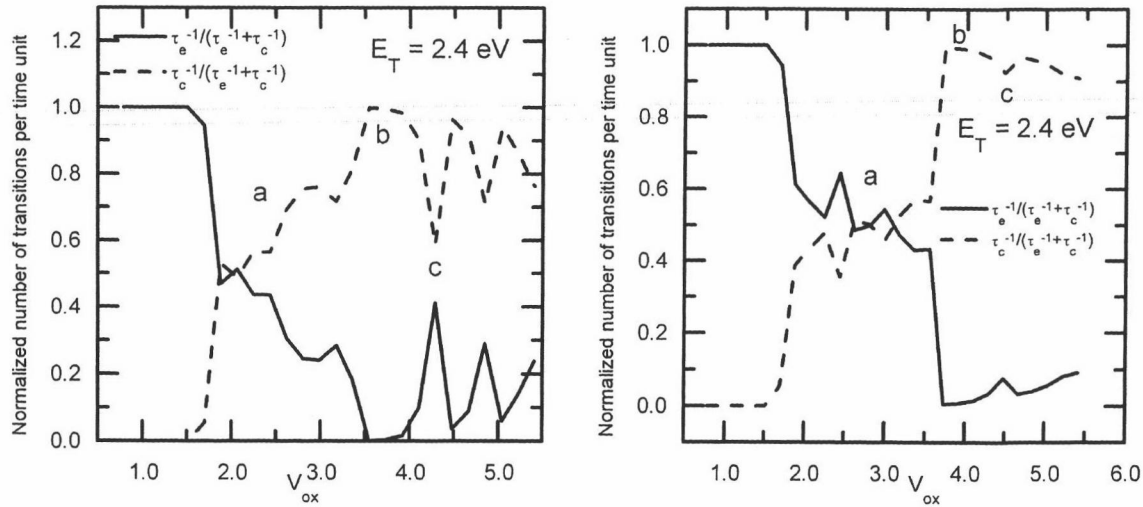


Figura 3.16: Transiciones por unidad de tiempo,  $\tau_c^{-1}$  y  $\tau_e^{-1}$ , vs. posición de las trampas en el óxido, para dos diferentes polarizaciones.



**Figura 3.17:** Constantes de tiempo de captura y emisión para las trampas que, para cada polarización, tienen más probabilidad de asistir una transición túnel. En la gráfica de la izquierda  $S\hbar\omega = 0.6$  eV y en la de la derecha  $S\hbar\omega = 1.4$  eV.

siciones. Además, éstas son las que más contribuyen a la corriente. Sin embargo, a partir de cierta tensión, en un amplio rango de valores de  $V_{ox}$  (1.5-3.4 V, aproximadamente) la posición de las trampas que más contribuyen a la corriente permanece casi constante (zona *a* de las gráficas), aunque nuevas trampas puedan contribuir a la conducción. A causa de esto, la energía media perdida por los electrones crece, puesto que las mismas trampas quedan situadas en una posición energética inferior conforme aumenta  $V_{ox}$ . Es decir, en este rango de tensiones, la posición de las trampas que más contribuyen a la corriente permanece prácticamente fija. Además, coincide con la posición en la que se verifica que los tiempos de captura y emisión ( $\tau_c + \tau_e$ ) son aproximadamente iguales (estas trampas se llaman baricéntricas). Esto puede verificarse en la figura 3.16, para el caso con  $V_{ox} = 2.62$  V, y en la figura 3.17, en la que se han representado los tiempos de captura y emisión de las trampas que tienen la probabilidad más alta de asistir una transición túnel.

Esta situación cambia cuando las trampas más cercanas al cátodo (a la interfaz óxido-puerta) entran en régimen de FN (como puede comprobarse a partir de los datos mostrados en la Fig. 3.14; en esta simulación no se incluyó la carga en el óxido

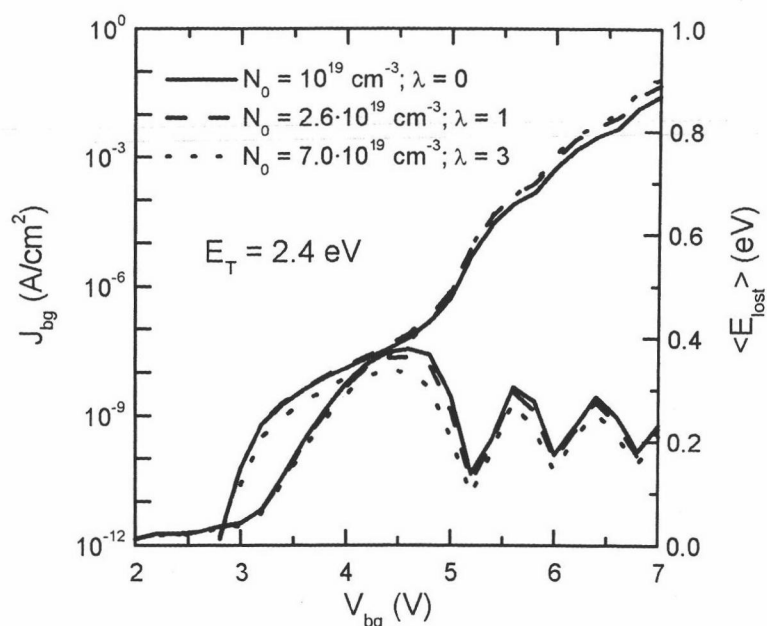
para facilitar la interpretación numérica de los datos). Esto se corresponde con la zona *b* de la Fig. 3.14. En este caso, como se puede observar en la Fig. 3.16, las trampas que más contribuyen a la corriente no son en las que se igualan  $\tau_c^{-1}$  y  $\tau_e^{-1}$ , sino aquellas en las que se ha alcanzado el régimen de FN. Para estas trampas, la probabilidad de emisión es más alta que para trampas más internas (a pesar de estar más lejos del ánodo), puesto que el electrón *ve* una barrera triangular en lugar de trapezoidal. Como estas trampas están más cerca del cátodo que las que más contribuyen a la corriente en la zona *a*, la energía perdida media es menor en este rango de tensiones.

Como conclusión, podemos destacar que la entrada de las trampas en régimen de FN puede ser detectada por el primer flanco de caída de la curva de energía perdida frente a la tensión de puerta. El resto de las oscilaciones de la gráfica de energía perdida media y de la posición de las trampas que más contribuyen a la corriente son a causa de la entrada de las trampas más internas en el régimen de FN (zona *c*) y por la dependencia del tiempo de captura ( $\tau_c$ ) con el número de fonones necesario para asistir la captura del electrón.

Similares resultados se han obtenido para el caso de trampas más profundas (ver Fig. 3.15), salvo en las siguientes particularidades:

- La energía perdida media es mayor.
- El comienzo de las zonas *b* y *c* está retrasado como consecuencia de la mayor profundidad energética de las trampas.
- Las trampas baricéntricas, en las que se igualan los tiempos  $\tau_c$  y  $\tau_e$ , pueden conducir desde muy bajas tensiones de puerta.

A partir de estos resultados, se observa que a través de las gráficas de energía perdida media frente a la polarización se puede obtener información acerca de la profundidad de las trampas, tanto a través del momento en el que la energía perdida media comienza a crecer como por el flanco de caída de las curvas.

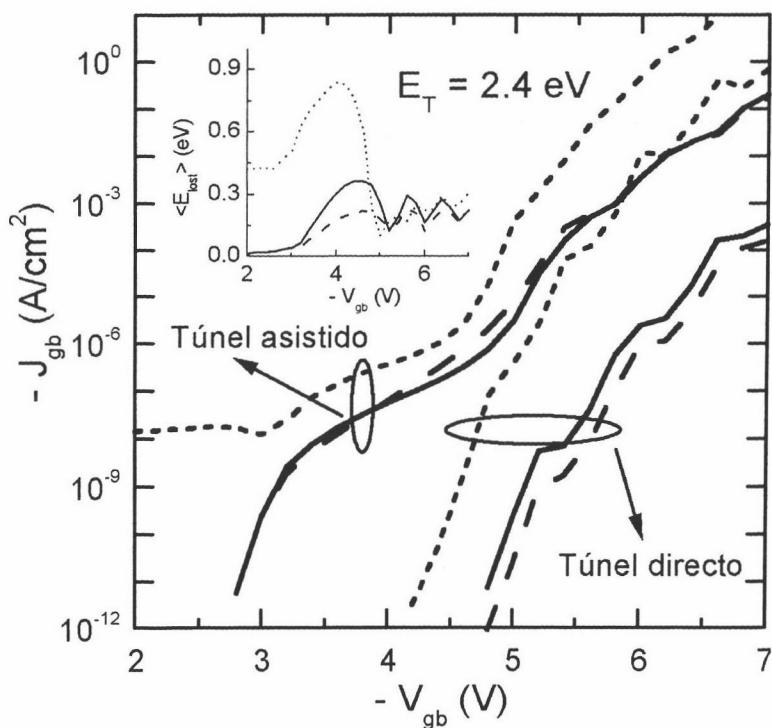


**Figura 3.18:** Energía perdida media y corriente túnel asistida por trampas. En los tres casos, la concentración de trampas por unidad de área es la misma, pero el perfil de impurezas es distinto.

### 3.4.6.2. Dependencia de la corriente de pérdidas con los parámetros del modelo

**Carga y concentración espacial de las trampas** En primer lugar, hemos analizado la influencia del parámetro  $\lambda$  que controla el perfil de impurezas según la expresión (3.61). Hemos comprobado que la influencia del perfil de las trampas es pequeña si la densidad de trampas integrada sobre el espesor del óxido permanece constante (Fig. 3.18). Las mayores diferencias aparecen a bajas y altas polarizaciones, porque las trampas que más contribuyen a la corriente están cercanas a una de las interfaces y es en estas zonas en donde es mayor la diferencia entre las concentraciones obtenidas con diferente valor de  $\lambda$ .

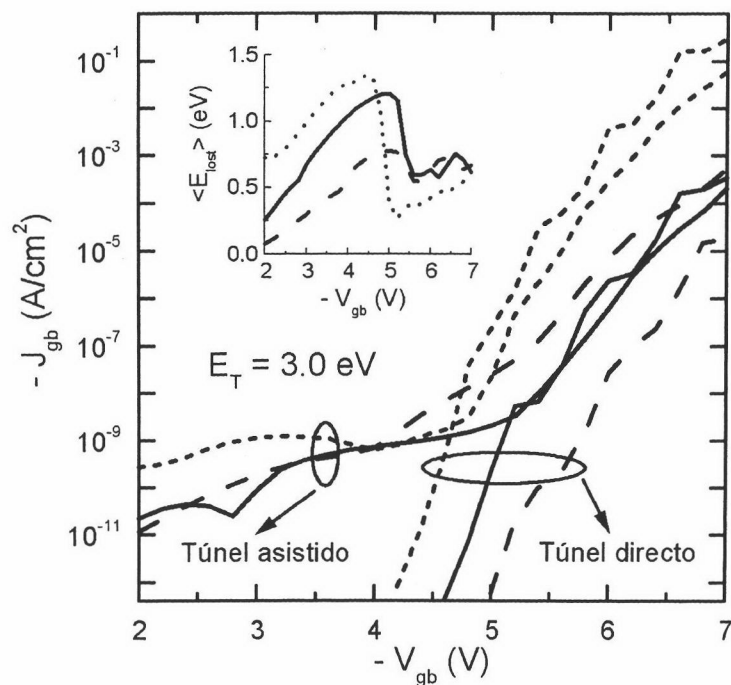
A continuación estudiamos la influencia de la carga de las trampas y ponemos de manifiesto la necesidad de incluir la carga en el óxido en la resolución de la ecuación de Poisson, especialmente en el caso de trampas positivas y con  $E_T$  menor que la



**Figura 3.19:** Efecto de la carga de las trampas sobre la corriente túnel y sobre la energía perdida media. Las curvas representadas con línea continua fueron obtenidas sin incluir la carga en la resolución de la ecuación de Poisson. Las curvas calculadas con trampas neutras (positivas) están representadas con línea discontinua (con línea de puntos). La gráfica del interior representa las correspondientes energías perdidas medias.

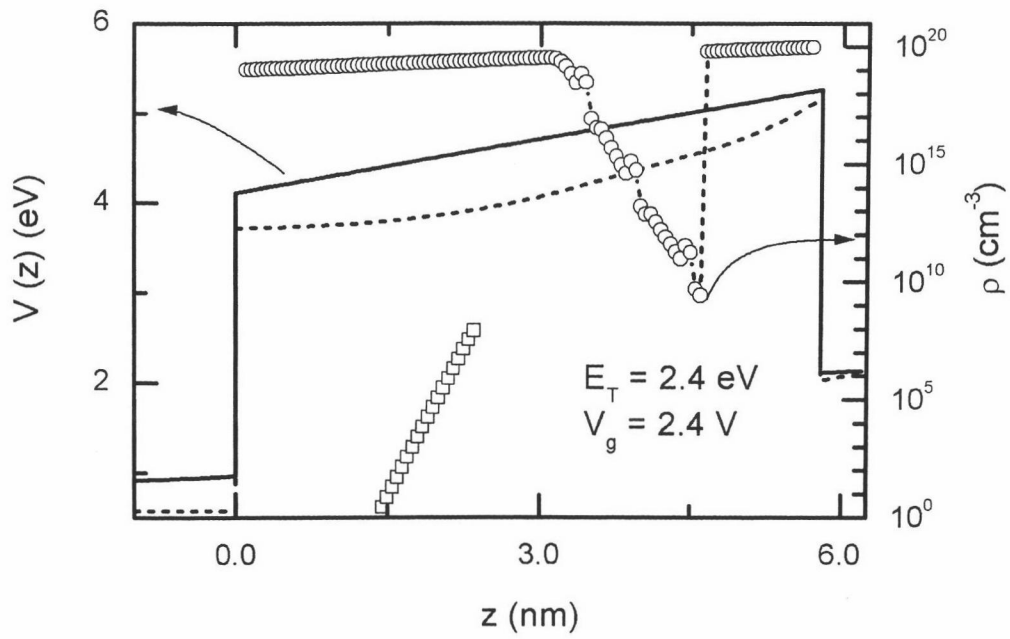
altura de la barrera en la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>.

En las figuras 3.19 y 3.20 se muestra el resultado de la inclusión de la carga en el óxido en la resolución de la ecuación de Poisson. Se ha representado tanto la corriente asistida por trampas como la directa en tres casos. En un caso, no se incluye la carga debida a las trampas situadas en el óxido. En los otros dos sí se incluye. De éstos, en un caso se trata de trampas positivas y en el otro de negativas. Como puede verse, la diferencia entre las distintas curvas son considerables, especialmente si las trampas son positivas y  $E_T$  es varias décimas inferior a la altura de la barrera ( $\phi_B$ ) causada por la discontinuidad en la banda de conducción de la estructura, como en el caso de la Fig. 3.19.

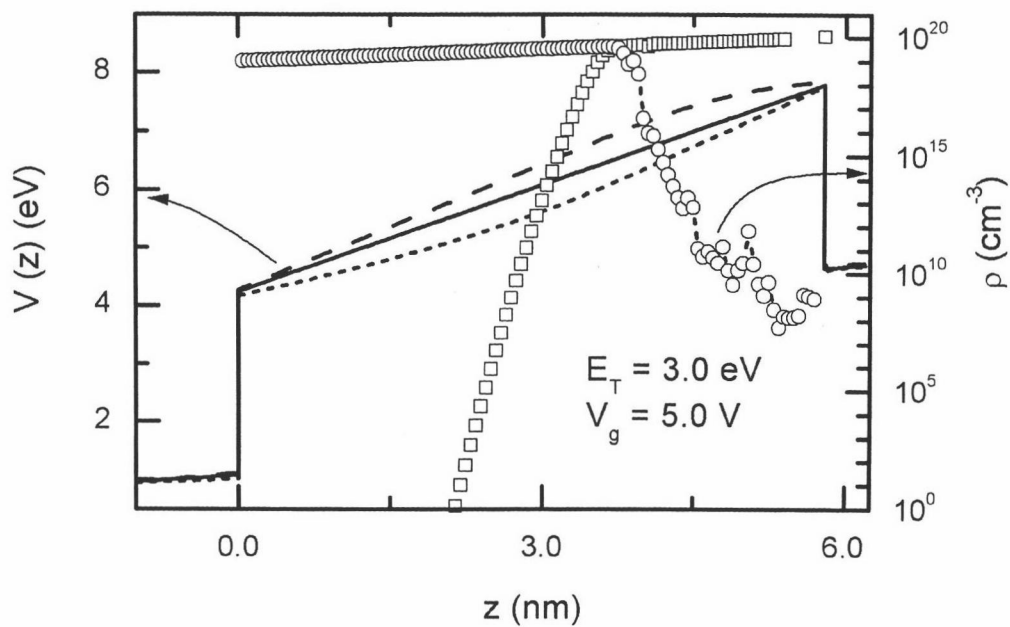


**Figura 3.20:** Efecto de la carga de las trampas sobre la corriente túnel y sobre la energía perdida media. Las curvas representadas con línea continua fueron obtenidas sin incluir la carga en la resolución de la ecuación de Poisson. Las curvas calculadas asumiendo trampas neutras (positivas) están representadas con línea discontinua (con línea de puntos).





**Figura 3.21:** Efecto de la carga atrapada en el óxido sobre el potencial. Línea continua: no se ha incluido la carga atrapada al resolver la ecuación de Poisson. Línea discontinua: efecto de la carga negativa atrapada en trampas neutras. Línea punteada: efecto de la carga positiva de las trampas no ocupadas. Línea con cuadrados: densidad de carga negativa (electrones atrapados). Línea con círculos: densidad de carga positiva (trampas vacías).



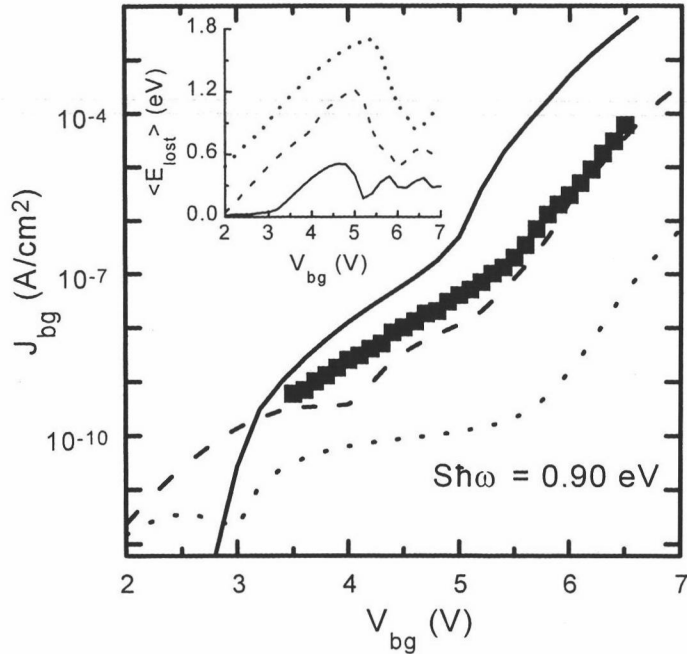
**Figura 3.22:** Efecto de la carga atrapada en el óxido sobre el potencial. Línea continua: no se ha incluido la carga atrapada al resolver la ecuación de Poisson. Línea discontinua: efecto de la carga negativa atrapada en trampas neutras. Línea punteada: efecto de la carga positiva de las trampas no ocupadas. Línea con cuadrados: densidad de carga negativa (electrones atrapados). Línea con círculos: densidad de carga positiva (trampas vacías).

La causa es la importante deformación que, en esta situación, ocurre en la barrera (ver Fig. 3.21), especialmente a bajas tensiones de puerta. Si la barrera no cambiase, todas las trampas quedarían por encima de la energía del electrón en el cátodo y, por tanto, no podrían asistir ninguna transición. Por consiguiente, las trampas estarían vacías y habría una alta densidad de carga positiva en el óxido. Esto hace que la barrera se deforme y se baje en el interior del óxido para permitir que algunas trampas queden por debajo de la banda de conducción en el cátodo y puedan asistir transiciones túnel. Lógicamente, este efecto se produce con trampas poco profundas (con  $E_T < \phi_B$ ) y bajas tensiones de puerta.

Por otro lado, como las trampas neutras sólo pueden deformar la barrera cuando están ocupadas, no ocurre esta deformación de la barrera (las trampas que podrían estar ocupadas son, según la Ec. (3.64), las próximas al cátodo, que quedan por encima de la energía de los electrones). Todo esto queda ilustrado en la Fig. 3.21. Por esto se obtiene prácticamente la misma corriente con cargas neutras que cuando la carga no se incluye en la resolución de la ecuación de Poisson. Sin embargo, cuando las trampas son más profundas (del orden de  $\phi_B$ ) sí se observan diferencias entre las curvas en las que se ha incluido la carga en el óxido (con trampas tanto positivas como neutras) y en las que no (ver Figs. 3.20 y 3.22).

Además, la inclusión de la carga en el óxido es la única forma por la cual el túnel asistido por trampas puede influir en el túnel directo, por medio de la deformación de la barrera [LVJTC<sup>+</sup>91], según el modelo presentado en el presente trabajo. Como se muestra en las Figs. 3.19 y 3.20, el efecto de las trampas negativas es el de disminuir la corriente por túnel directo (por efecto del incremento de la barrera, como se muestra en la Fig. 3.22), mientras que el de las positivas es aumentar la corriente directa y adelantar la entrada en régimen de FN tanto del túnel directo como del asistido por trampas. En las Figs. 3.19 y 3.20 se puede ver también el efecto de la carga en el óxido sobre la energía perdida media.

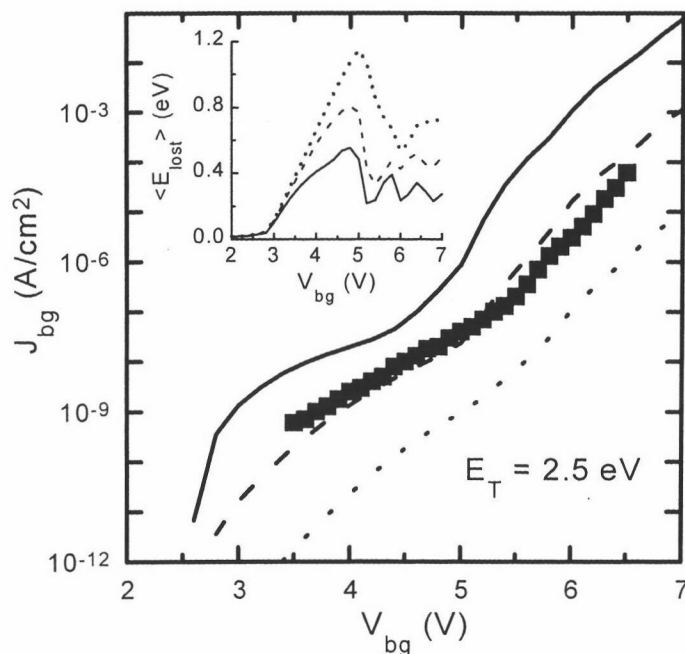
Finalmente, debe constatar que se ha comprobado que la carga en el óxido debe incluirse en la resolución de la ecuación de Poisson con densidades de trampas por encima de  $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Por debajo de estas densidades, la influencia de la carga



**Figura 3.23:** Dependencia de la corriente túnel asistida por trampas y de la energía perdida media, obtenidas mediante simulación, con la profundidad de las trampas,  $E_T$ . Los valores de  $E_T$  son: 2.4 eV (línea continua), 2.8 eV (línea discontinua) y 3.2 eV (línea punteada). Se muestran también datos experimentales de [TYT99b] como referencia.

atrapada sobre la barrera es despreciable.

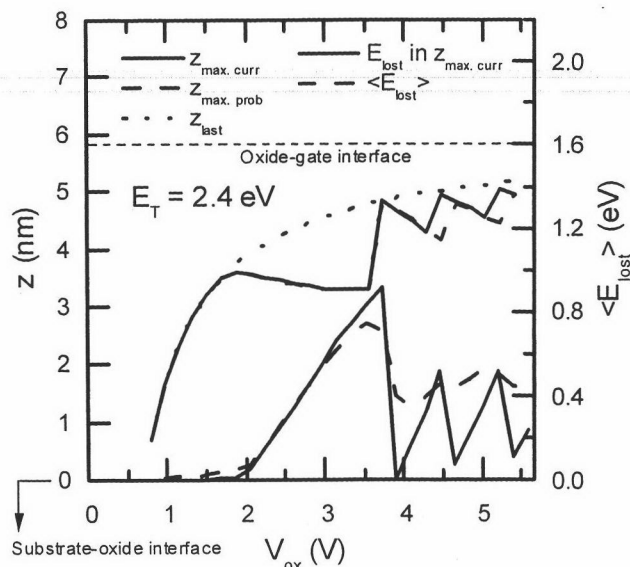
**Influencia de la profundidad de las trampas ( $E_T$ )** En la Fig. 3.23 se muestra la dependencia de la corriente túnel asistida por trampas y de la energía perdida media con la profundidad de las trampas. Se ha tomado un valor fijo de  $S\hbar\omega$  igual a 0.90 eV. Los datos experimentales se muestran sólo como referencia. Como se ha obtenido experimentalmente [RR97], valores más altos de  $E_T$  retrasan la entrada de la corriente asistida en régimen de FN. Esto puede concluirse tanto a través de las curvas de corriente asistida como de las curvas de energía perdida media. Como se observa, la profundidad de las trampas afecta a la pendiente de las curvas de corriente túnel asistida (en la zona anterior al régimen de FN) y a su nivel.



**Figura 3.24:** Dependencia de la corriente túnel asistida por trampas y de la correspondiente energía perdida media, obtenidas mediante simulación, con el parámetro  $S\hbar\omega$ . Los valores tomados para  $S\hbar\omega$  son: 0.6 eV (línea continua), 1.2 eV (línea discontinua) y 1.8 eV (línea punteada). Se muestran también datos experimentales de [TYT99b] como referencia.

**Influencia del factor de Huang-Rhys ( $S$ )** La dependencia de la corriente túnel asistida por trampas y de la energía perdida media con el parámetro  $S\hbar\omega$  se muestra en la figura 3.24. Como puede observarse, cuanto mayor es el valor de  $S\hbar\omega$ , mayor es la energía perdida media, menor es la corriente y mayor el valor de  $V_{ox}$  en el que las trampas alcanzan el régimen de FN, pero más suave es la transición.

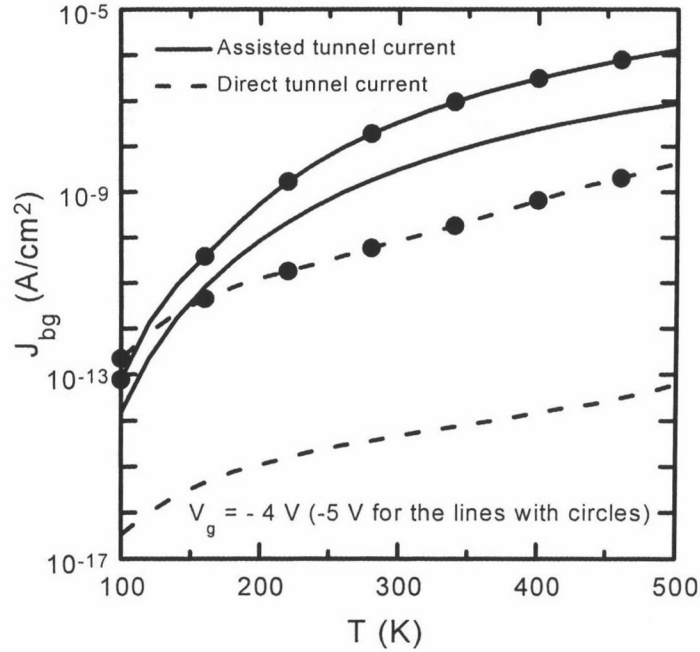
Estos resultados están de acuerdo con el hecho de que un valor más alto de  $S\hbar\omega$  favorece transiciones que involucran un mayor número de fonones. Por ello, aunque trampas cercanas al cátodo estén ya en régimen de FN a partir de cierta tensión de puerta, todavía asisten pocas transiciones túnel (respecto de las más internas) porque el número de fonones involucrado es bajo. Por eso, en la curva con mayor valor de  $S\hbar\omega$  de la Fig. 3.24, el codo de la curva de corriente está más suavizado que en el resto y el flanco de caída de la curva de energía perdida media es menos abrupto:



**Figura 3.25:** Gráfica obtenida con los mismos parámetros que en la Fig. 3.14, pero con  $S\hbar\omega = 1.4 \text{ eV}$ , en lugar de  $0.6 \text{ eV}$ .

el régimen de FN de las trampas cercanas al cátodo y el régimen correspondiente a una barrera trapezoidal de las trampas más internas coexisten hasta que las primeras involucren un mayor número de fonones en las transiciones que asisten. En la Fig. 3.16 (con  $V_{\text{ox}} = 2.62 \text{ V}$ ) se puede observar también que con un valor más alto de  $S\hbar\omega$  se obtienen valores más bajos de las probabilidades de transición  $\tau_c^{-1}$  y  $\tau_e^{-1}$ . Además, las trampas que más contribuyen a la corriente (situadas aproximadamente en la posición en la que se igualan los valores de  $\tau_c^{-1}$  y  $\tau_e^{-1}$ ), como se puede comprobar en la Fig. 3.25 son ligeramente más internas que las correspondientes con un valor menor de  $S\hbar\omega$ .

La Fig. 3.25 se ha obtenido con los mismos parámetros que la Fig. 3.14, salvo el valor de  $S\hbar\omega$ , que se ha tomado igual a  $1.4 \text{ eV}$  en lugar de  $0.6 \text{ eV}$ . Como puede observarse, la forma de la gráfica es la misma y sólo se observan algunas diferencias derivadas del hecho, arriba comentado, de que un mayor valor del factor de Huang-Rhys favorece las transiciones que involucran un mayor número de fonones. En concreto, se puede apreciar que la energía perdida media es bastante mayor que

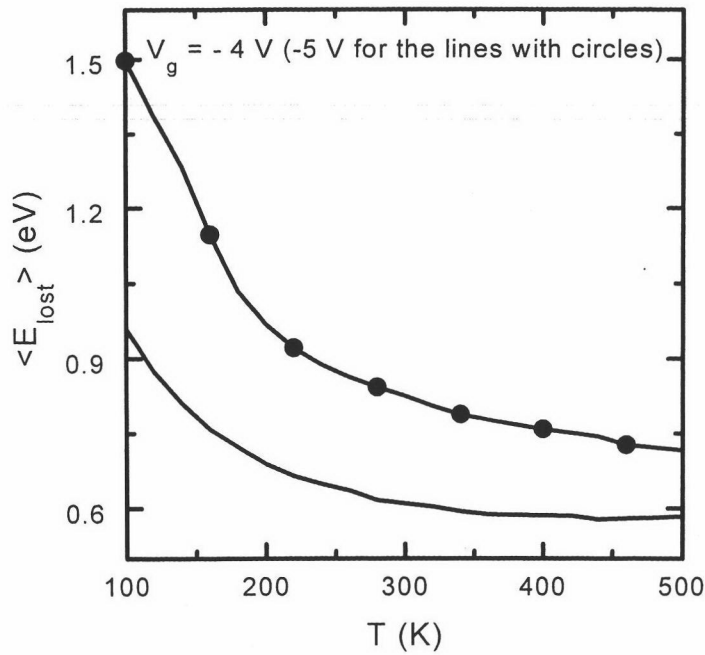


**Figura 3.26:** Simulación de la dependencia de la corriente por túnel directo y asistido para el dispositivo de la Ref. [TYT99b]. Los parámetros son los mismos que los empleados para ajustar los datos experimentales en la Fig. 3.11 ( $E_T = 2.8 \text{ eV}$ ,  $S\hbar\omega = 1.2 \text{ eV}$ ,  $N_0 = 7.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  and  $\lambda = 1$ . Trampas neutras).

en el caso de menor factor de Huang-Rhys y que la posición  $z_{max.curr}$  de las trampas que más contribuyen a la corriente experimenta un leve retroceso en la zona  $a$ , que ya no es plana. También en la Fig. 3.17 puede observarse una ligera diferencia entre las gráficas obtenidas con diferente valor de  $S\hbar\omega$ .

### 3.4.6.3. Dependencia con la temperatura

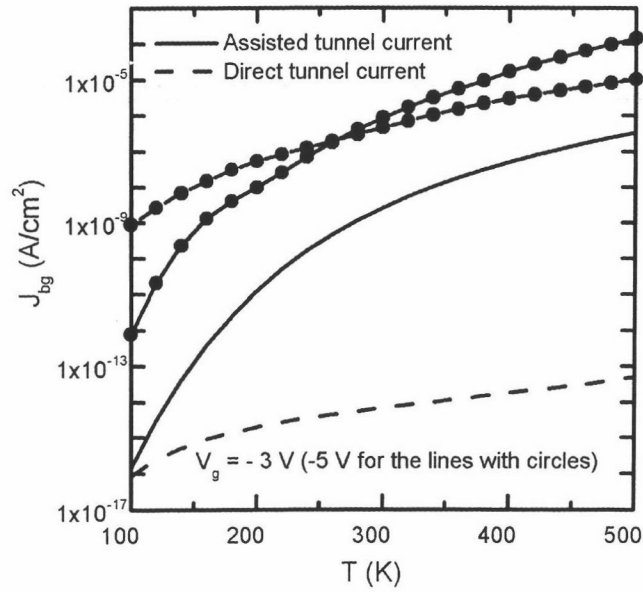
Como ya se ha comentado, el hecho de que nuestro modelo esté basado en primeros principios y de que use como parámetros de ajuste características de las trampas, permite que una vez que éstas han sido determinadas para cierta temperatura se pueda predecir el comportamiento del dispositivo para otra temperatura diferente (si asumimos que estos parámetros no cambian con la temperatura). De este modo, hemos obtenido la influencia de la temperatura sobre la corriente y sobre la energía



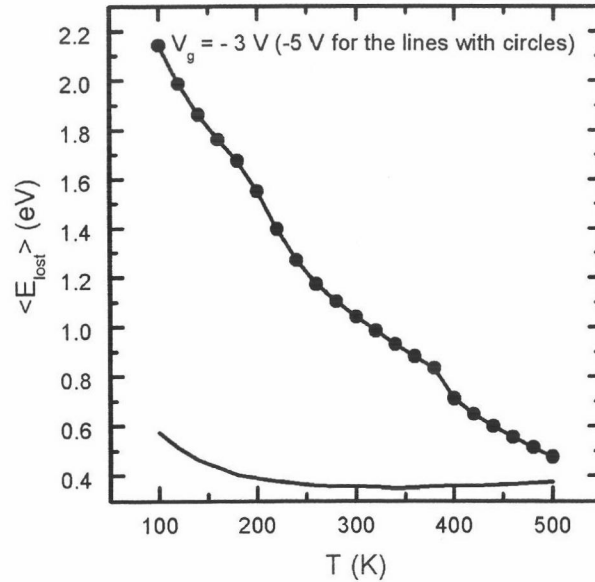
**Figura 3.27:** Energía perdida media para el mismo dispositivo que en la Fig. 3.26.

perdida media para dos polarizaciones diferentes (Figs. 3.26, 3.27, 3.28 y 3.29). En la curva correspondiente al túnel asistido, pueden distinguirse dos zonas: la primera tiene una pendiente pronunciada, mientras que la segunda es sólo ligeramente más pronunciada que la curva de túnel directo. Este hecho se debe al comportamiento térmicamente activado de los procesos de captura y emisión (y, por tanto, del túnel asistido). El codo de la curva está en torno a  $T = 220\text{ K}$ , cerca de la temperatura equivalente correspondiente a la energía  $\hbar\omega = 20\text{ meV}$ . Así mismo, la curva de la energía perdida media presenta dos zonas, con la frontera también alrededor de  $T = 220\text{ K}$ .





**Figura 3.28:** Simulación de la dependencia de la corriente por túnel directo y asistido para el dispositivo de la Ref. [RR97] (curva superior). Los parámetros son los mismos que los empleados para ajustar los datos experimentales en la Fig. 3.13 ( $E_T = 2.4$  eV,  $S\hbar\omega = 1.5$  eV and  $N_0 = 5.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Trampas positivas).



**Figura 3.29:** Energía perdida media para el mismo dispositivo que en la Fig. 3.28.

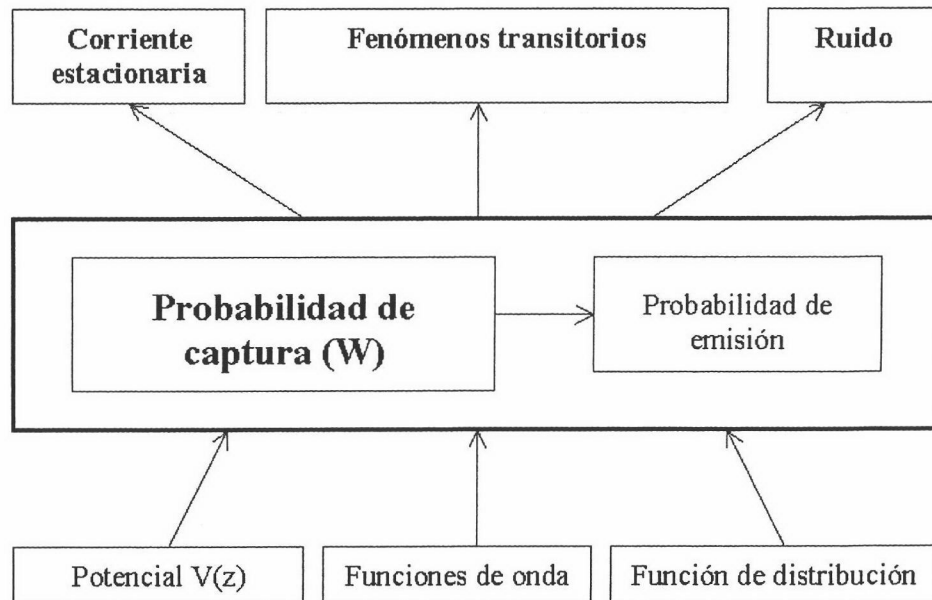
## 3.5. Modelo analítico y aplicaciones

### 3.5.1. Introducción

En los apartados anteriores del presente trabajo, hemos estudiado los tres tipos de transiciones túnel que pueden provocar corriente de pérdidas a través de óxidos de puerta. Para comprobar la consistencia de los modelos desarrollados, hemos comparado los resultados proporcionados por las simulaciones con los obtenidos experimentalmente en capacidades MOS en condiciones estacionarias de corriente. Una vez verificados los modelos, las probabilidades de transición (2.51), (3.26) y (3.44) pueden ser utilizadas para estudiar fenómenos relacionados con transiciones túnel en una variedad mucho más amplia de situaciones y dispositivos. Por ejemplo, en el caso de las transiciones asistidas por túnel inelástico se puede estudiar también la corriente a través de la puerta en un MOSFETs normalmente polarizado, la inyección de portadores calientes, el ruido generado por el atrapamiento-liberación de portadores por parte de las trampas situadas en el óxido [God97] o la componente transitoria de la corriente SILC [SAE+97], [ISRL00a]. También se puede simular el efecto de la corriente causada por transiciones por efecto túnel en dispositivos como memorias FLASH o EEPROM y su influencia sobre los tiempos de retención [ASH+93].

Para llevar a cabo todas estas simulaciones contamos ya con el bloque fundamental: el cálculo de las probabilidades de captura. Como ya se ha expuesto, las probabilidades de emisión se obtienen directamente a partir de las de captura mediante la aplicación del Principio de Balance Microscópico. Una vez programada la función que realiza el cálculo de la probabilidad de captura, se puede usar para la simulación de todos los fenómenos arriba enumerados siempre y cuando se disponga de la información necesaria (que proporcionaría el resto de módulos del simulador), como funciones de onda, concentración de electrones, potencial, etc. La Fig. 3.30 ilustra las relaciones entre los distintos módulos de un programa que efectúase estas tareas.

Para realizar estas simulaciones, lo más cómodo es emplear alguno de los simuladores de dispositivos disponibles, como MINIMOS-NT, que permite una rápida



**Figura 3.30:** Obtenida la probabilidad de captura se pueden estudiar una amplia variedad de fenómenos en los que está implicada la captura y emisión de electrones por parte de trampas.

definición y simulación de muchos tipos de dispositivos. Sin embargo, MINIMOS-NT es un simulador clásico, mientras que los procesos túnel son, obviamente, cuánticos. Para el cálculo de todas las probabilidades de transición que hemos obtenido a lo largo de los capítulos anteriores se necesita el conocimiento de las funciones de onda de los estados inicial y final. Estas funciones de onda no las puede proporcionar un simulador clásico, por lo que tienen que ser calculadas de alguna forma por la propia función que realice el cálculo de las probabilidades de transición.

Por otra parte, el simulador que hemos empleado nosotros en el presente trabajo resuelve las ecuaciones de Poisson y Schrödinger de forma autoconsistente. Dado el potencial  $V(z)$ , el módulo que calcula las funciones de onda resuelve la ecuación de Schrödinger de forma numérica, dividiendo el eje  $z$  en trozos de potencial constante, en los cuales las soluciones son conocidas [MF97]. Esto permite la obtención de las funciones de onda para cualquier forma arbitraria del pozo o de la barrera. Sin embargo, en situaciones concretas podría ser deseable obtener las funciones de onda

mediante alguna expresión analítica, por razones de velocidad de cálculo.

Por estos dos motivos, realizaremos una aproximación analítica del modelo desarrollado en el capítulo anterior para el cálculo de las probabilidades de transición por túnel inelástico asistido por trampas. El modelo analítico obtenido lo hemos incluido en el simulador de dispositivos MINIMOS-NT.

En el siguiente apartado, mostraremos los resultados obtenidos y los compararemos con los del modelo no analítico para comprobar el grado de exactitud de las aproximaciones realizadas.

Como ejemplo de otro caso en el que se puede hacer uso de las probabilidades de transición, hemos desarrollado un modelo para el cálculo de fenómenos transitorios, que también hemos incluido en MINIMOS-NT. Finalmente, como aplicación de lo anterior, hemos obtenido la curva de descarga de la puerta flotante de una memoria EEPROM.

### 3.5.2. Cálculo analítico de las probabilidades de transición

En este apartado, se muestran las aproximaciones realizadas para conseguir una expresión que nos proporcione la función de onda. De este modo, obtendremos una expresión totalmente analítica para calcular las probabilidades de captura (3.44), puesto que la integración necesaria para obtener el elemento de matriz  $|V_e|$  (expresión 3.53) puede calcularse entonces analíticamente.

El paso fundamental consiste en dividir la barrera en regiones de potencial constante. Hemos distinguido dos casos: barreras trapezoidales y barreras triangulares (como las que se tienen en régimen de Fowler-Nordheim).

#### 3.5.2.1. Función de onda aproximada en barreras trapezoidales

La barrera trapezoidal se aproxima por una función escalón de altura intermedia entre la que hay justo en la interfaz y la del punto  $z_0$  donde nos interesa calcular la

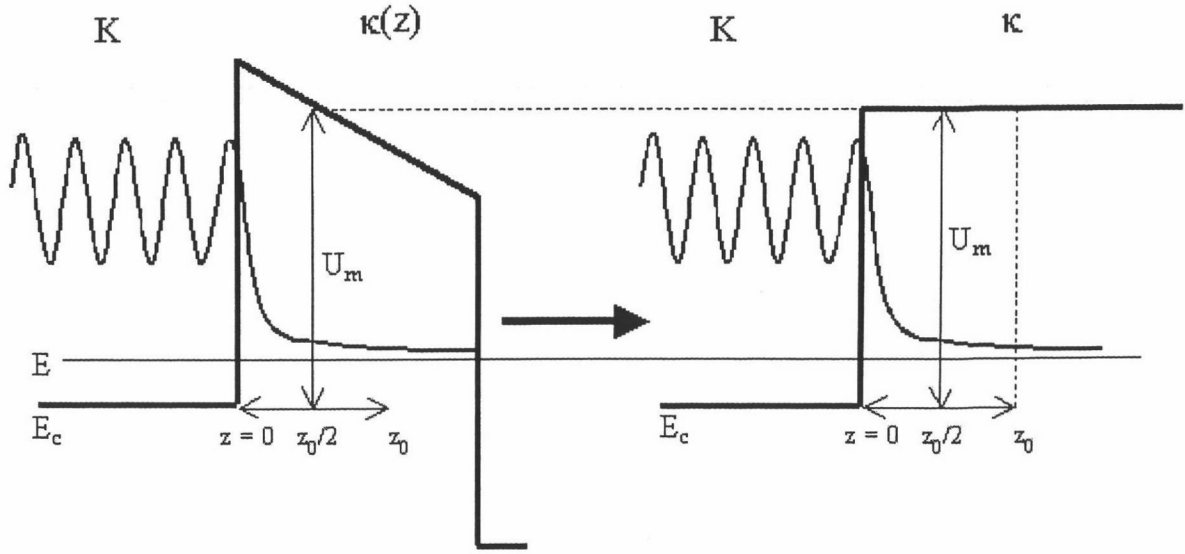


Figura 3.31: Transformación de la barrera trapezoidal en una función escalón.

función de onda (figura 3.31). En este caso, las funciones de onda son conocidas:

$$\zeta(z > 0) = Ae^{-\kappa z}, \quad (3.65a)$$

$$\zeta(z < 0) = B\text{sen}(Kz + \varphi), \quad (3.65b)$$

donde los números de onda vienen dados por:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_{ox}^*(U_m - E)}}{\hbar^2}, \quad (3.66a)$$

$$K = \frac{\sqrt{2m_z^*(E - E_c)}}{\hbar^2}, \quad (3.66b)$$

siendo  $m_{ox}^*$  la masa efectiva del electrón en la barrera,  $m_z^*$  la masa efectiva transversal del electrón en el semiconductor,  $E$  la energía del estado y  $E_c$  la energía correspondiente al fondo de la banda de conducción en el pozo.

La constante  $B$  se calcula a partir de la condición de normalización de la función de onda sobre una distancia  $L$ , mientras que  $A$  y la fase  $\varphi$  están determinadas por las siguientes condiciones de contorno, que enlazan las funciones de onda a ambos lados

de la barrera:

$$\zeta(0^+) = \zeta(0^-), \quad (3.67a)$$

$$\frac{1}{m_{ox}^*} \frac{d\zeta}{dz} \Big|_{z=0^+} = \frac{1}{m_z^*} \frac{d\zeta}{dz} \Big|_{z=0^-}. \quad (3.67b)$$

Aplicando estas ecuaciones obtenemos que la función de onda en el interior de la barrera viene dada por la siguiente expresión:

$$\zeta(z > 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \text{arctg} \left( \frac{m_{ox}^* K}{m_z^* \kappa} \right) \right) e^{-\kappa z}. \quad (3.68)$$

Como se ha comentado anteriormente, disponiendo de esta expresión para el cálculo de la función de onda en el interior del óxido, no necesitamos tampoco llevar a cabo de forma numérica la integración de la ecuación (3.53), sino que ésta viene dada por:

$$\int_{z_0 - z_T/2}^{z_0 + z_T/2} |\zeta_L(z)|^2 dz = \frac{2}{L\kappa} \text{sen}^2 \left( \text{arctg} \left( \frac{m_{ox}^* K}{m_c^* \kappa} \right) \right) \text{senh}(\kappa z_T) e^{-2\kappa z_0}. \quad (3.69)$$

### 3.5.2.2. Función de onda aproximada en barreras triangulares

En este caso, dividimos la barrera en dos zonas de potencial constante. En la primera, la energía del electrón es mayor que la altura de la barrera y en la segunda, menor. La frontera entre ambas regiones está en el punto en el que se igualan la energía del electrón y la energía potencial, como se indica en la figura 3.32. La función de onda viene ahora dada por:

$$\zeta(z < 0) = A \text{sen}(Kz + \varphi), \quad (3.70a)$$

$$\zeta(0 < z < z_{FN}) = B \text{sen}(K_{FN}z + \varphi_{FN}), \quad (3.70b)$$

$$\zeta(z_{FN} < z) = C e^{-\kappa(z - z_{FN})}, \quad (3.70c)$$

con:

$$K = \frac{\sqrt{2m_z^*(E - E_c)}}{\hbar^2}, \quad (3.71a)$$

$$K_{FN} = \frac{\sqrt{2m_{oxc}^*(E - U_{FN})}}{\hbar^2}, \quad (3.71b)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_{ox}^*(U_m - E)}}{\hbar^2}. \quad (3.71c)$$

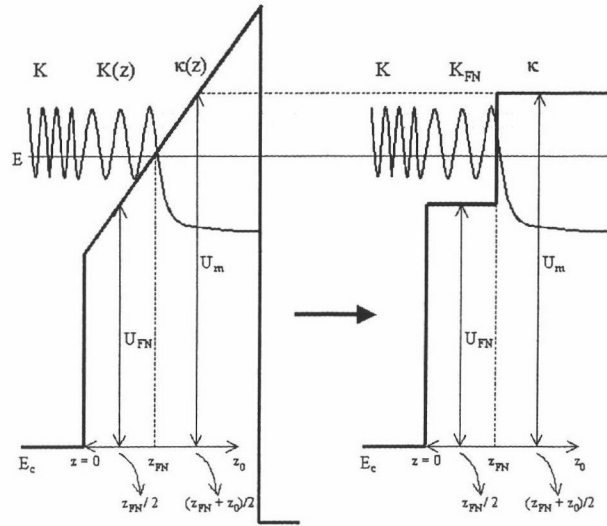


Figura 3.32: Transformación de una barrera triangular en una con dos escalones.

Los símbolos tienen el mismo significado que en el caso de la barrera trapezoidal, excepto  $m_{oxc}^*$ , que representa la masa efectiva en la banda de conducción del óxido.

Aplicando las condiciones de contorno:

$$\zeta(0^+) = \zeta(0^-), \quad (3.72a)$$

$$\zeta(z_{FN}^+) = \zeta(z_{FN}^-), \quad (3.72b)$$

$$\left. \frac{1}{m_{oxc}} \frac{d\zeta}{dz} \right)_{z=0^+} = \left. \frac{1}{m_{ef}} \frac{d\zeta}{dz} \right)_{z=0^-}, \quad (3.72c)$$

$$\left. \frac{1}{m_{ox}} \frac{d\zeta}{dz} \right)_{z=z_{FN}^+} = \left. \frac{1}{m_{oxc}} \frac{d\zeta}{dz} \right)_{z=z_{FN}^-}, \quad (3.72d)$$

obtenemos que la función de onda en el interior de la barrera viene dada entonces por:

$$\zeta(z > z_{FN}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\text{sen}\varphi}{\text{sen}\varphi_{FN}} \text{sen}(K_{FN}z_{FN} + \varphi_{FN}) e^{-\kappa(z-z_{FN})}, \quad (3.73)$$

con:

$$\varphi = \text{arctg} \left( \frac{m_{oxc}^*}{m_z^*} \frac{K}{K_{FN}} \text{tg}\varphi_{FN} \right), \quad (3.74a)$$

$$\varphi_{FN} = \text{arctg} \left( \frac{m_{ox}^*}{m_{oxc}^*} \frac{K_{FN}}{\kappa} \right) - K_{FN}z_{FN}. \quad (3.74b)$$

Finalmente, la integral que hay que calcular para obtener el elemento de transición (ec. (3.53)) viene dada por la siguiente expresión analítica:

$$\int_{z_0-z_T/2}^{z_0+z_T/2} |\zeta_L(z)|^2 dz = \frac{2}{L\kappa} \frac{\text{sen}^2\varphi}{\text{sen}^2\varphi_{FN}} \text{sen}^2(K_{FN}z_{FN} + \varphi_{FN}) \text{senh}(\kappa z_T) e^{-2\kappa(z_0-z_{FN})}. \quad (3.75)$$

### 3.5.3. Verificación del modelo analítico

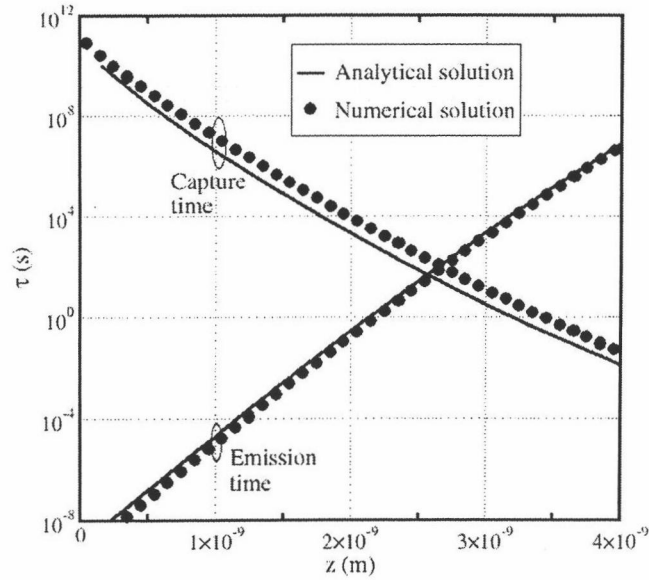
Para comprobar la consistencia de las aproximaciones realizadas, hemos comparado los resultados que se obtienen con este nuevo modelo (incorporado al simulador MINIMOS-NT) con los del anteriormente desarrollado, que calcula numéricamente las funciones de onda. En ambos casos no se ha incluido la carga en el óxido a la hora de resolver la ecuación de Poisson, pues MINIMOS-NT no lo puede hacer de momento.

En las figuras 3.33 y 3.34 se representan las constantes de tiempo en función de la posición con dos tensiones de puerta distintas (-3 V y -7V, respectivamante). El dispositivo simulado es una capacidad MOS con 5.0 nm de espesor de óxido y los siguientes parámetros de las trampas:  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.6$  eV y concentración constante de trampas,  $N_0$ , igual a  $10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Como puede observarse, los resultados son muy parecidos en los dos casos. Por otro lado, en la Fig. 3.34 se pueden observar las oscilaciones típicas del régimen de Fowler-Nordheim en la curva correspondiente al tiempo de emisión. La amplitud de las oscilaciones es la misma en ambos casos, pero están ligeramente desplazadas unas respecto de otras (aproximadamente el 2% del espesor del óxido).

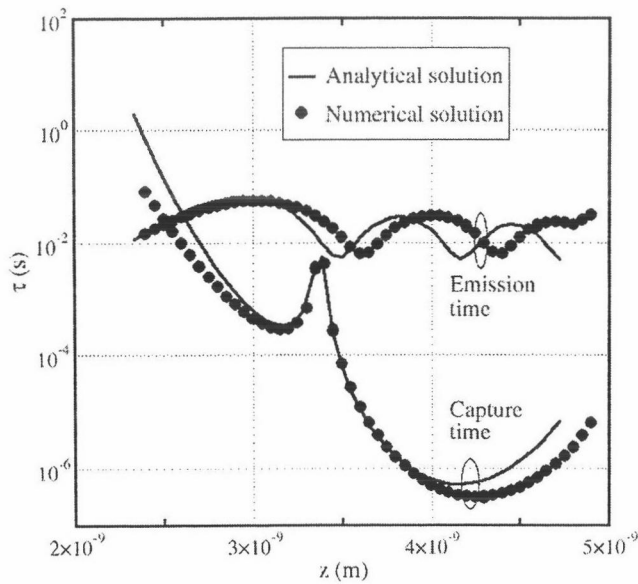
Por otra parte, en la figura 3.35 se comparan los resultados obtenidos con ambos modelos de la corriente asistida por túnel inelástico con los mismos parámetros que en la figura 3.12, pero sin incluir la carga atrapada en el óxido en la resolución de la ecuación de Poisson.

Finalmente, en la figura 3.36 se muestra una comparación con los resultados experimentales correspondientes a los mismos dispositivos. Para la reproducción de las medidas con el modelo analítico hemos usado casi los mismos valores que usamos con

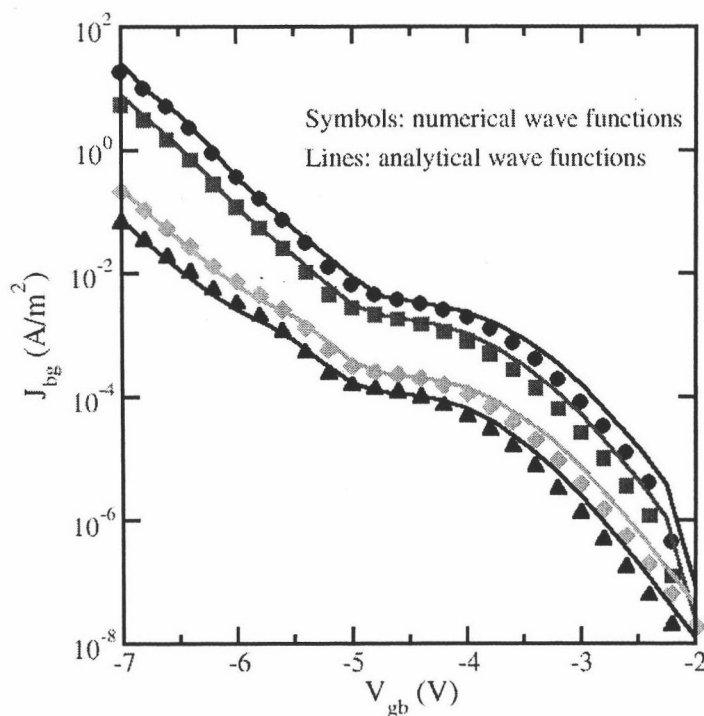




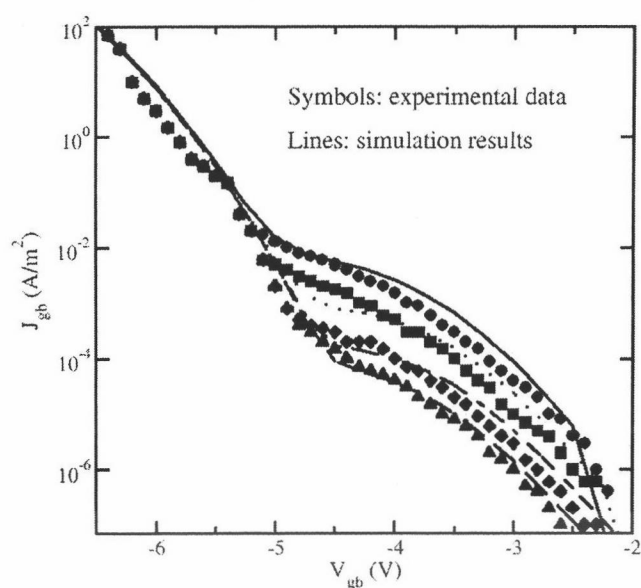
**Figura 3.33:** Comparación de las constantes de tiempo obtenidas con los dos modelos discutidos ( $V_{gb} = -3$  V). Parámetros del dispositivo:  $t_{ox} = 5.0$  nm,  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.6$  eV y  $N_0$ , igual a  $10^{19}$  cm $^{-3}$ .



**Figura 3.34:** Comparación de las constantes de tiempo obtenidas con los dos modelos discutidos ( $V_{gb} = -7$  V).



**Figura 3.35:** Corriente túnel asistida por trampas obtenida mediante los dos modelos discutidos. ( $t_{ox} = 5.0$  nm). Los parámetros de las trampas son (de la curva superior a la inferior):  $E_T = 2.7$  eV,  $S\hbar\omega = 1.3$  eV and  $N_0 = 3.0 \times 10^{19}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.7$  eV,  $S\hbar\omega = 1.4$  eV and  $N_0 = 2.0 \times 10^{19}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.6$  eV and  $N_0 = 1.0 \times 10^{19}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.7$  eV and  $N_0 = 7.0 \times 10^{18}$  cm $^{-3}$ . Finalmente,  $\lambda = 0$  para todas las muestras. Se han asumido trampas neutras en todos los casos.



**Figura 3.36:** Comparación entre los resultados del modelo analítico y los datos experimentales de la Ref. [RGL98] ( $t_{ox} = 5.0$  nm). Los parámetros de las trampas son (de la curva superior a la inferior):  $E_T = 2.6$  eV,  $S\hbar\omega = 1.3$  eV and  $N_0 = 2.0 \times 10^{19}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.7$  eV,  $S\hbar\omega = 1.4$  eV and  $N_0 = 9.0 \times 10^{18}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.6$  eV and  $N_0 = 7.0 \times 10^{18}$  cm $^{-3}$ ;  $E_T = 2.8$  eV,  $S\hbar\omega = 1.7$  eV and  $N_0 = 4.0 \times 10^{18}$  cm $^{-3}$ . El parámetro  $\lambda = 0$  para todas las muestras. Se han asumido trampas neutras en todos los casos.

el modelo numérico (ver figura 3.12), salvo una ligera modificación de la concentración de las trampas y de su posición energética. Esta pequeña diferencia se debe a que MINIMOS-NT no incluye la carga atrapada en el óxido en la resolución de la ecuación de Poisson. Una leve disminución de la concentración y de la profundidad de las trampas compensa el ligero incremento de la barrera en el interior del óxido causado por las cargas negativas atrapadas.

En esta última gráfica, la corriente representada es la corriente total, suma de las componentes producidas por túnel directo y por túnel asistido por trampas. Puesto que para bajas polarizaciones la corriente asistida es varios órdenes de magnitud superior que la corriente directa, se ha empleado la expresión de Lezinger-Snow [LS69], para el cálculo de la corriente directa en régimen de FN. Éste es uno de los modelos que incorpora el programa MINIMOS-NT y la expresión correspondiente es la siguiente:

$$J_{\text{FN}} = \frac{q^3}{8\pi\hbar\Phi_{\text{B}}m_{\text{ox}}/m_0} \cdot F_{\text{ox}}^2 \cdot \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m_{\text{ox}}}\Phi_{\text{B}}^3}{3q\hbar F_{\text{ox}}}\right).$$

$F_{\text{ox}}$  es el campo eléctrico en el óxido y  $\Phi_{\text{B}}$  la altura de la barrera. Esta expresión no es adecuada para bajas tensiones de puerta, pero proporciona una buena aproximación para tensiones mayores [Cap00].

### 3.5.4. Corriente transitoria

En el apartado 3.4 hemos aplicado las expresiones obtenidas para las probabilidades de transición por túnel asistido por trampas al cálculo de la corriente estacionaria. Modelar y simular la corriente estacionaria es de gran interés, puesto que la mayoría de los estudios con corriente SILC realizados para estudiar el fenómeno y caracterizar las trampas se han obtenido midiendo curvas de corriente estacionaria. Sin embargo, el estudio y simulación de fenómenos transitorios es también muy importante. Por ejemplo, se han medido curvas I-V de capacidades MOS en las que se han obtenido regiones que presentan una resistencia diferencial negativa, que depende de la velocidad con la que se cambia la tensión de puerta [MH92]. Así mismo, es necesario incluir el estudio de la corriente transitoria para la simulación de las curvas de descarga, mediante corriente SILC, de celdas de memoria no volátiles con puerta flotante.

Para apreciar mejor las particularidades del cálculo del comportamiento transitorio respecto del estacionario vamos, en primer lugar, a recordar brevemente las expresiones usadas en el caso estacionario. Para simplificar la exposición, supondremos una única posición energética de las trampas y omitiremos, con el fin de simplificar la notación, la variable correspondiente ( $E'$ ) en las siguientes expresiones.

El punto de partida para la obtención de la expresión de la densidad de corriente es la siguiente ecuación de balance de portadores:

$$\begin{aligned} N_T(z) \frac{df_T(z, t)}{dt} &= N_T(z)(1 - f_T(z, t))\tau_C^{-1}(z, t) - N_T(z)f_T(z, t)\tau_E^{-1}(z, t) \equiv \quad (3.76) \\ &\equiv R_c(z, t) - R_e(z, t), \end{aligned}$$

donde  $f_T(z)$  es la función de ocupación de las trampas,  $N_T(z)$  es su concentración y  $\tau_C(z, t)$  y  $\tau_E(z, t)$  son las constantes de tiempo de los procesos de captura y emisión de un electrón por parte de una trampa situada en la posición  $z$ . En estado estacionario, las tasas de emisión ( $R_e(z, t)$ ) y de captura ( $R_c(z, t)$ ) son las mismas y, de esta condición, se puede deducir la función de ocupación de las trampas e, inmediatamente, la densidad de corriente:

$$J_T = q \int_0^{t_{ox}} dz \frac{N_T(z)}{\tau_c(z) + \tau_e(z)}. \quad (3.77)$$

Si suponemos que los electrones en el cátodo tienen todos la misma energía ( $E_c + 3/2k_B T$ ), el tiempo de captura viene dado por (ver apartado 3.4.3.2):

$$\tau_c^{-1}(z) \approx W_c(z, E_c + \frac{3}{2}k_B T) \cdot \underbrace{\int_{E_C}^{\infty} N_c(E) f_c(E) dE}_{n(z)}. \quad (3.78)$$

Y el de emisión por:

$$\tau_e^{-1}(z) \approx W_e(z, E') \cdot N_a(E'). \quad (3.79)$$

Donde  $E'$  es, como se ha dicho, la posición energética de las trampas y  $N_a(E')$  la densidad de estados con energía  $E'$ .

En estado estacionario, las magnitudes anteriores no cambian. Sin embargo, a lo largo de un proceso que evolucione temporalmente puede cambiar tanto la concentración de trampas ocupadas ( $f_T$ ) como también el valor de las constantes de tiempo.

El cambio en la constante de tiempo de captura puede ser provocado por un cambio en la forma de la barrera (que conlleva una modificación de las probabilidades de transición) o por un cambio en la concentración de electrones en el cátodo (como el que se produce, por ejemplo, en la descarga de la puerta flotante de una memoria EEPROM).

Otra diferencia entre el comportamiento estacionario y el transitorio es que, en general, debemos tener en cuenta los procesos de captura y emisión desde o hacia cualquier electrodo, pues puede haber trampas que por su posición energética no puedan contribuir a la corriente estacionaria pero sí puedan emitir o capturar electrones de forma transitoria. Por tanto, las constantes de tiempo anteriores deben ser redefinidas y calculadas ahora del siguiente modo:

$$\tau_C^{-1}(z, t) = \tau_{ci}^{-1}(z, t) + \tau_{cd}^{-1}(z, t), \quad (3.80a)$$

$$\tau_E^{-1}(z, t) = \tau_{ei}^{-1}(z, t) + \tau_{ed}^{-1}(z, t). \quad (3.80b)$$

Donde  $\tau_{ci}$  y  $\tau_{cd}$  son los tiempos de captura para los electrones procedentes del lado izquierdo y derecho de la barrera, respectivamente. Análogamente,  $\tau_{ei}$  y  $\tau_{ed}$  son los tiempos de emisión para los electrones emitidos hacia el lado izquierdo y derecho, respectivamente.

Por otra parte, en régimen transitorio el número total de electrones capturados por unidad de tiempo ( $R_c(z, t)$ ) no es necesariamente igual que el número de electrones emitidos ( $R_e(z, t)$ ). Por tanto, no podemos igualar a cero la ecuación (3.76) para obtener directamente la función de ocupación  $f_T(z, t)$ , como en régimen estacionario. En cambio, debemos resolver la ecuación diferencial (3.76). Una vez conocida la función de ocupación  $f_T$  en cada instante, se puede calcular fácilmente la densidad de corriente a través de cada una de las interfaces (en general no serán iguales). Por ejemplo, para la interfaz izquierda:

$$J_{Ti}(t) = q \int_0^{tox} N_T(z) (\tau_{ci}^{-1}(z) - f_T(z, t) (\tau_{ci}^{-1}(z) + \tau_{ei}^{-1}(z))) dz. \quad (3.81)$$

Para calcular la función de ocupación  $f_T(z, t)$  debemos resolver, como hemos dicho anteriormente, la ecuación diferencial (3.76). Podemos distinguir dos casos, según varíen o no las constantes de tiempo. Si las constantes de tiempo no cambian a lo

largo del proceso transitorio, podemos resolver directamente la ecuación (3.76) para obtener una expresión analítica de  $f_T(z, t)$ :

$$f_T(t) = f_T(0) \exp(-t/\tau_m) + \frac{\tau_m}{\tau_C} [1 - \exp(-t/\tau_m)], \quad (3.82)$$

donde  $\tau_m^{-1} = \tau_C^{-1} + \tau_E^{-1}$ .

Como se ha comentado anteriormente, esta expresión es sólo válida si no cambia ni la forma de la barrera ni la concentración de electrones en los electrodos durante el proceso. En general, esta condición no se cumplirá y deberemos discretizar la variable temporal  $t$  para obtener la función de ocupación  $f_T$  en un instante  $t_i$  a partir de la función de ocupación en el instante anterior haciendo uso de la ecuación (3.76), como se explica a continuación.

Integrando (3.76) en la variable  $t$ , en el intervalo entre  $t_0$  y  $t$ , se obtiene la siguiente relación:

$$f_T(z, t) - f_T(z, t_0) = \tau_C^{-1}(z, t_0) \cdot (t - t_0) - (\tau_C^{-1}(z, t_0) + \tau_E^{-1}(z, t_0)) \int_{t_0}^t f(z, t) dt. \quad (3.83)$$

Se supone que las constantes de tiempo no cambian en este pequeño intervalo de tiempo. Si discretizamos la variable temporal se obtiene la expresión equivalente:

$$\begin{aligned} f_T(z, t_i) - f_T(z, t_{i-1}) &\simeq & (3.84) \\ &\simeq \tau_C^{-1}(z, t_{i-1}) \cdot \Delta t_i - (\tau_C^{-1}(z, t_{i-1}) + \tau_E^{-1}(z, t_{i-1})) \frac{f(z, t_i) + f(z, t_{i-1})}{2} \Delta t_i. \end{aligned}$$

En donde hemos definido  $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$ . Operando se obtiene la siguiente relación recursiva:

$$f_T(z, t_i) = A_i + B_i f(z, t_{i-1}), \quad (3.85)$$

con:

$$A_i = \frac{\tau_C^{-1}(z, t_{i-1}) \cdot \Delta t_i}{1 + C_i}, \quad (3.86a)$$

$$B_i = \frac{1 - C_i}{1 + C_i}, \quad (3.86b)$$

$$C_i = \frac{(\tau_C^{-1}(z, t_{i-1}) + \tau_E^{-1}(z, t_{i-1})) \cdot \Delta t_i}{2}. \quad (3.86c)$$

En el siguiente apartado expondremos algunos ejemplos de los dos tipos de simulaciones transitorias.

### 3.5.5. Simulaciones y resultados

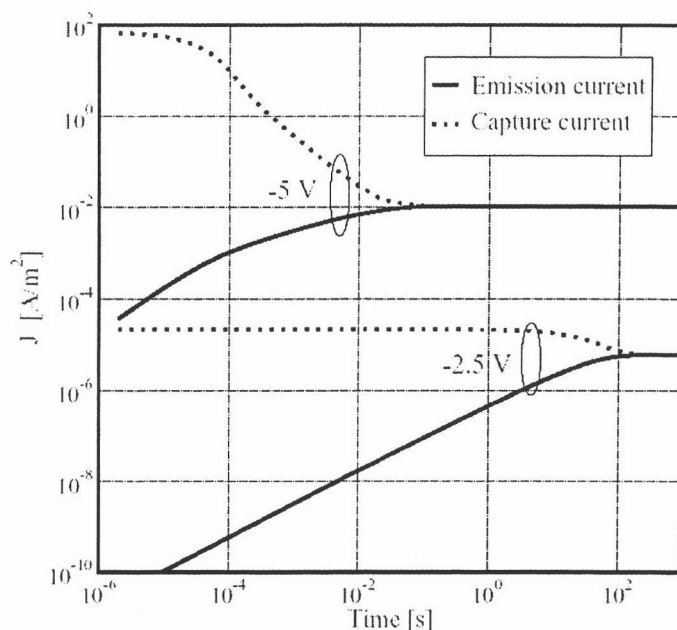
En este apartado mostraremos algunos resultados obtenidos con el modelo anteriormente expuesto. Como ya hemos indicado, cabe distinguir dos tipos de simulaciones transitorias. En el primer caso, la forma de la barrera y la densidad de portadores en los electrones se mantiene constante a lo largo del tiempo. Por tanto basta con, una vez calculados el potencial y la densidad de portadores por el simulador, obtener una vez las probabilidades de transición y aplicar las ecuaciones (3.81) y (3.82) para calcular la corriente en cada instante. Sin embargo, en el segundo caso debe llevarse a cabo una simulación completamente transitoria. Es decir, calcular en cada paso de tiempo los nuevos valores del potencial y de la densidad de portadores en los electrodos. Conocidas estas magnitudes, a partir de la función de ocupación del paso anterior, se calcula la nueva función de ocupación y los valores actuales de las constantes de tiempo, con los que se evalúa entonces la expresión (3.81) para obtener la densidad de corriente.

Los primeros ejemplos que vamos a mostrar corresponden a capacidades MOS a las que súbitamente se les cambia la tensión de puerta. Inicialmente todas las trampas están vacías y hasta que la función de ocupación de las trampas alcanza los valores correspondientes a la situación estacionaria tiene lugar un proceso transitorio en el que la corriente a través de las dos interfaces es diferente. Finalmente, se alcanza la situación estacionaria, en las que las tasas de captura ( $R_c(z, t)$ ) y emisión ( $R_e(z, t)$ ) son las mismas en todo instante y además permanecen constantes.

Para lograr que inicialmente todas las trampas estén vacías, se puede suponer que el dispositivo ha estado previamente un tiempo suficientemente largo en condiciones de banda plana, por lo que todas las trampas han sido desocupadas (en las simulaciones realizadas la profundidad energética de las trampas,  $E_T$ , es menor que la altura de la barrera,  $\phi_B$ , y las trampas están por encima del nivel de Fermi, por lo que la mayoría están vacías).

La figura 3.37 muestra los resultados obtenidos con un espesor de óxido  $t_{ox} = 5.0$  nm y los siguientes parámetros para las trampas:  $E_T = 2.6$  eV,  $S\hbar\omega = 1.3$  eV y  $N_0 = 2.0 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Por otra parte, la figura 3.38 muestra una comparación con



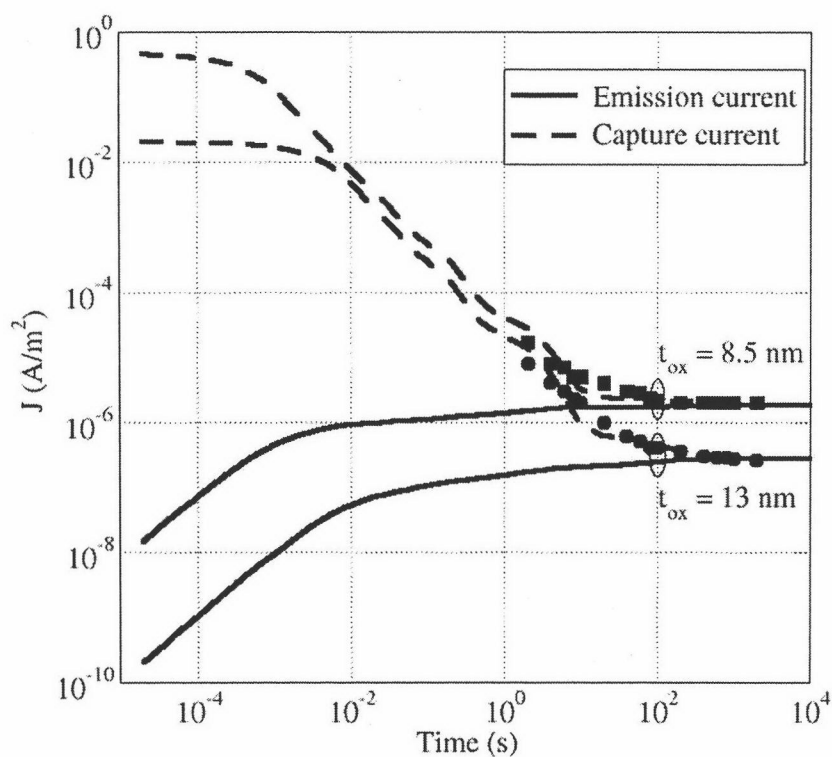


**Figura 3.37:** Corrientes transitorias de captura y emisión. Inicialmente todas las trampas están vacías. Los parámetros del dispositivo son:  $t_{ox} = 5.0$  nm,  $E_T = 2.6$  eV,  $S\hbar\omega = 1.3$  eV y  $N_0 = 2.0 \times 10^{19}$  cm $^{-3}$ . En  $t = 0$  se aplica la tensión de puerta indicada en cada caso.

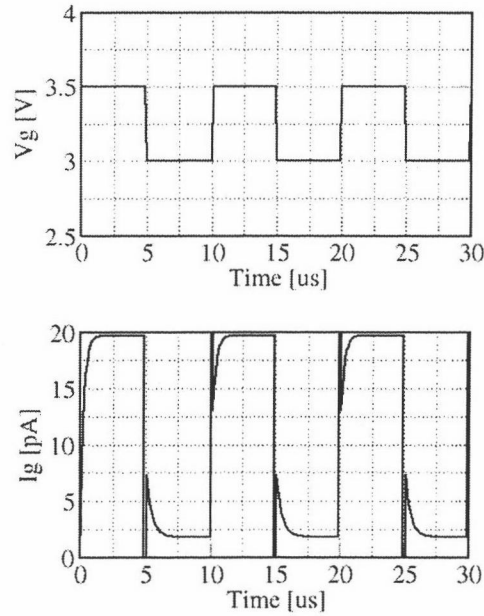
las medidas obtenidas de la referencia [MH92]. Los parámetros de las trampas usados para realizar el ajuste de las curvas experimentales se detallan en el pie de figura.

Puede comprobarse en las figuras que la corriente de captura de electrones por parte de las trampas excede el valor estacionario en varios órdenes de magnitud, puesto que la ocupación de las trampas es menor que en la situación estacionaria. El valor estacionario de la densidad de corriente finalmente alcanzado en las simulaciones transitorias de la figura 3.37 coincide con los puntos correspondientes de la curva superior de la Fig. 3.36, que fue obtenida asumiendo estado estacionario (el dispositivo simulado es el mismo). La figura 3.38 muestra, además, un buen acuerdo con los resultados experimentales procedentes de la referencia [MH92].

Las simulaciones mostradas en las figuras 3.37 y 3.38 pertenecen a la primera clase de simulaciones transitorias, en las que no cambian las constantes de tiempo a lo largo del proceso. Sólo la función de ocupación varía y puede obtenerse a partir de la expresión (3.82).



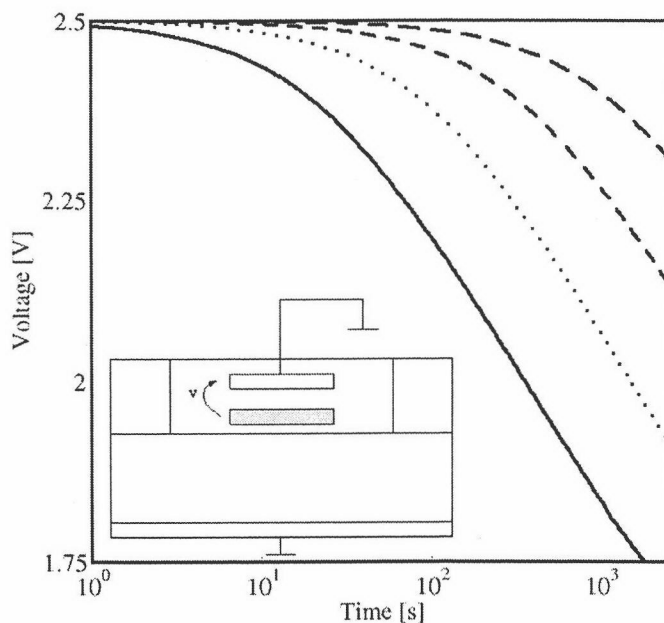
**Figura 3.38:** Corrientes transitorias de captura y emisión. Inicialmente todas las trampas están vacías. Datos experimentales de la Ref. [MH92]. El campo eléctrico en el óxido es 5.4 MV/cm ( $V_g = -5.8 \text{ V}$  en el óxido más delgado y  $V_g = -8.3 \text{ V}$  en el óxido con  $t_{ox} = 13.0 \text{ nm}$ ). Los parámetros de las trampas son:  $S\hbar\omega = 1.00 \text{ eV}$ ,  $E_T = 2.5 \text{ eV}$  and  $N_0 = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  para el óxido más delgado  $S\hbar\omega = 1.26 \text{ eV}$ ,  $E_T = 2.5 \text{ eV}$  y  $N_0 = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  para el otro.



**Figura 3.39:** Corriente de puerta en una capacidad MOS con  $t_{ox} = 3$  nm y trampas situadas a una profundidad  $E_T = 3$  eV.

En la figura 3.39 mostramos una simulación que pertenece al segundo grupo, pues las constantes de tiempo cambian. En este ejemplo, una capacidad MOS es sometida a una tensión de puerta que oscila periódicamente entre dos valores. Antes de alcanzarse el valor de la corriente correspondiente a la situación estacionaria tiene lugar un comportamiento transitorio. Los picos son debidos a que el voltaje cambia súbitamente, pero no la concentración de carga. Por ejemplo, en el cambio de 3.0 a 3.5 V, justo después de producirse, tenemos una barrera menor (la tensión que cae en el óxido es mayor) y una concentración de trampas ocupadas mayor que la correspondiente a la situación estacionaria (figura 3.10). En consecuencia, tendremos súbitamente una corriente mayor que la que había con la misma concentración de trampas ocupadas y menor tensión de puerta (3.0 V). El transitorio que se observa posteriormente tienen lugar mientras se alcanza la nueva situación de equilibrio, en la que también entran en juego nuevas trampas que antes no participaban en la conducción (situadas en las cercanías del cátodo).

Finalmente la figura 3.40 muestra las curvas de descarga de una celda EEPROM



**Figura 3.40:** Curvas de descarga de una celda EEPROM con los mismos parámetros de las trampas que en la figura 3.36.

con la puerta completamente cargada antes (curva superior) y después de ser sometida a estrés eléctrico (los parámetros de las trampas son los mismos que los de la figura 3.36). El dispositivo simulado se muestra en el interior de la figura.

Esta simulación es completamente transitoria (pertenece al segundo grupo), pues a lo largo del proceso cambia no sólo el valor de las constantes de tiempo sino también la concentración de electrones en uno de los electrodos (la puerta flotante).

### 3.6. Resumen y conclusiones

En este capítulo se han estudiado las transiciones túnel asistidas por trampas en el óxido de puerta, tanto elásticas como inelásticas. Ambas han sido tratadas como procesos en dos pasos.

En primer lugar, se han estudiado las transiciones elásticas, empleando el método de Bardeen para el cálculo de las correspondientes probabilidades de transición. El modelo desarrollado tiene como parámetros la profundidad energética ( $E_T$ ) y la

concentración de las trampas, pues han sido eliminados los relativos a la geometría del pozo de potencial de las trampas. Además, es aplicable a transiciones tanto desde estados casi ligados como desde estados no ligados.

El modelo obtenido se ha comparado con el de la matriz de transferencia en un caso en el que ambos métodos proporcionan una solución analítica (una doble barrera resonante) y se ha comprobado que ambos proporcionan resultados muy parecidos. Posteriormente, se han comparado resultados experimentales con los resultados de nuestro modelo y se ha obtenido la posición energética de las trampas que permite el ajuste de las medidas experimentales. Ésta está de acuerdo con el nivel correspondiente a las vacantes de oxígeno, propuestas por numerosos autores como la responsable de la corriente a través de óxidos vírgenes (no estresados).

Para los procesos túnel asistidos por trampas de forma inelástica se ha desarrollado un modelo que, a diferencia de los existentes en la bibliografía, se apoya sobre primeros principios de forma que permita usar las propias características de las trampas como los únicos parámetros de ajuste. Éstos son: profundidad de las trampas ( $E_T$ ), concentración y el semidesplazamiento de Stokes ( $S\hbar\omega$ ). Esto permite calcular los tiempos de captura y emisión para cada trampa (no son un parámetro de ajuste) y su dependencia con la posición y la polarización. Por tanto, el modelo puede usarse para analizar las trampas generadas bajo diferentes condiciones de estrés y, por ejemplo, para predecir la dependencia de la corriente túnel con la temperatura una vez que las características de las trampas han sido obtenidas a una temperatura dada. Hemos obtenido buena concordancia entre los resultados experimentales procedentes de diversas referencias y los calculados con el modelo presentado.

Se han obtenido mediante simulación curvas de la energía perdida, por término medio, por los electrones durante las transiciones. Se ha mostrado que depende de la polarización y se ha dado una interpretación de las curvas de  $\langle E_{perdida} \rangle$  vs.  $V_{ox}$ . Se ha encontrado una relación entre el flanco de bajada de estas curvas y la entrada en régimen de Fowler-Nordheim del túnel asistido por trampas. Puesto que estas curvas dependen de  $E_T$ ,  $S\hbar\omega$  y de la carga de las trampas (positiva o neutra), medidas experimentales de la corriente inelástica asistida por trampas y de la energía

perdida por los electrones podrían ayudar a determinar estos parámetros.

Finalmente, hemos adaptado el modelo desarrollado previamente para el cálculo de la corriente asistida por trampas de forma inelástica para su sencilla incorporación a un simulador clásico como MINIMOS-NT. Se ha buscado una expresión analítica de las funciones de onda que permite obtener una expresión para calcular directamente (analíticamente) las probabilidades de transición. Hemos comparado el modelo analítico obtenido con el numérico previamente desarrollado y con resultados experimentales para comprobar la bondad de las aproximaciones realizadas. Además, se han desarrollado también las expresiones necesarias para la simulación de fenómenos transitorios.

El modelo obtenido se ha incorporado al simulador MINIMOS-NT y con este programa se han obtenido los resultados mostrados en el último apartado del presente capítulo, que comprenden simulaciones temporales y en estado estacionario de capacidades MOS y de memorias no volátiles con puerta flotante. Aunque se reconoce que el estudio de la corriente SILC es muy importante por su efecto sobre los tiempos de degradación de las memorias no volátiles, sin embargo la mayoría de los estudios que se pueden encontrar en la bibliografía se han realizado con capacidades MOS en situación estacionaria. La corriente transitoria se ha estudiado en menor grado [ISRL00a], [SAE<sup>+</sup>97] y apenas directamente simulando celdas de memoria con puerta flotante [KBC<sup>+</sup>92]. El modelo desarrollado en este capítulo permite la simulación de estos fenómenos y dispositivos, como se ha mostrado.

## Capítulo 4

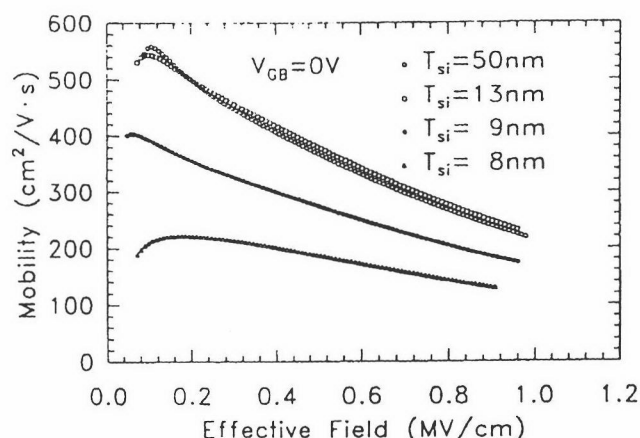
# Dispersión culombiana en estructuras SOI

### 4.1. Introducción

En este capítulo modelaremos la dispersión culombiana en estructuras SOI con el fin de incluir su efecto en simuladores de Monte Carlo. Ésta consiste en el cambio del estado de movimiento de los electrones del canal de inversión causado por las cargas fijas y puntuales presentes en la estructura.

La movilidad en dispositivos MOSFETs convencionales (o *bulk* MOSFETs) es una magnitud que ha sido ampliamente estudiada [AFS82], [FL93]. Los mecanismos de dispersión que la determinan (incluida la dispersión culombiana) han sido bien estudiados y modelados. Sin embargo, se deben realizar nuevos estudios cuando se pretende estudiar la movilidad en MOSFETs de tecnología SOI, puesto que entran en juego nuevos fenómenos propios de esta estructura.

Cabe esperar que cuando la lámina de silicio es suficientemente ancha, el comportamiento de ambos dispositivos sea muy similar. En efecto, se ha comprobado que por encima de 50 nm las curvas experimentales de movilidad coinciden con las del caso *bulk* [WKWV94]. Sin embargo, cuando la capa de silicio es más delgada que un cierto espesor (comprendido entre 10 y 20 nm), la movilidad decrece notablemente respecto de la obtenida en un MOSFET tradicional [CPM95], [TKSO95]. Las figuras



**Figura 4.1:** Movilidad experimental vs. campo efectivo, con el espesor de la capa de silicio como un parámetro. Fig. 2 de [CPM95].

4.1, 4.2, 4.3 pertenecen a estas referencias y muestran los resultados experimentales obtenidos.

En un principio, se atribuyó la disminución de la movilidad conforme se decrece el espesor de la capa de silicio a un mayor estrés de ésta [CPM95]. Esta explicación fue pronto descartada [TKSO95], debido a la ausencia de suficiente correlación entre el estrés de la capa de silicio, para varios espesores, y la correspondiente reducción de la movilidad. Se propuso entonces que la reducción de la movilidad debe estar relacionada con la interfaz Si-SiO<sub>2</sub> inferior y, en concreto, con el incremento de la dispersión coulombiana [TKSO95].

Descartado el estrés de la capa de silicio como una de las causas de la disminución de la movilidad en MOSFETs SOI con sustrato muy estrecho, los mecanismos fundamentales de dispersión son los mismos que en MOSFETs convencionales [TKSO95]: dispersión por fonones, por rugosidad superficial y por la dispersión coulombiana, aunque se ven modificados por la estructura SOI.

Para el estudio de la movilidad en diversas heteroestructuras, nuestro grupo de investigación ha desarrollado un simulador de Monte Carlo de una sola partícula [GP94]. Éste permite también la simulación de estructuras SOI, una vez que se hayan incorporado los modelos adecuados para la obtención de las probabilidades de



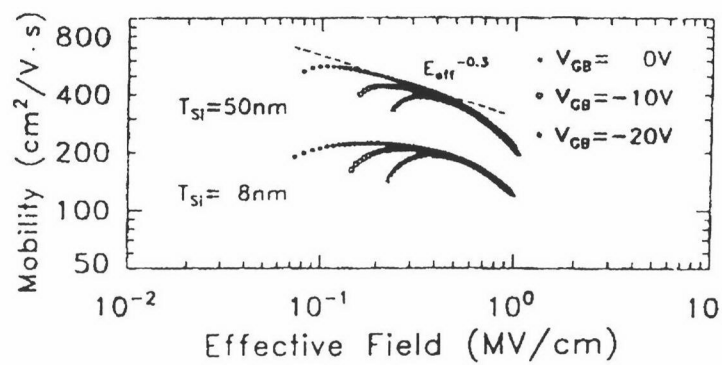


Figura 4.2: Movilidad experimental vs. campo efectivo, con la tensión de la puerta inferior y el espesor de la capa de silicio como parámetros. Fig. 3a de [CPM95].

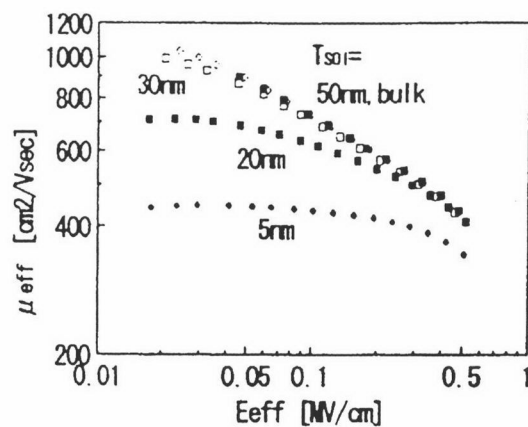


Figura 4.3: Movilidad experimental vs. campo efectivo, con el espesor de la capa de silicio como un parámetro. Fig. 3 de [TKSO95].

dispersión correspondientes a la estructura. En particular, respecto al caso de MOSFETs convencionales, los modelos de dispersión coulombiana y por rugosidad superficial deben ser modificados para tener en cuenta la presencia de una segunda interfaz silicio-dióxido de silicio.

En trabajos previos, miembros de nuestro grupo han realizado la correspondiente adaptación del modelo de la rugosidad superficial al caso de dos interfaces [GRLV<sup>+</sup>99], [CC00]. En este trabajo, nosotros nos centraremos en la dispersión coulombiana. Desarrollaremos un nuevo modelo adecuado para los dispositivos SOI (o, en general, para estructuras con dos interfaces) y mostraremos las nuevas curvas de movilidad obtenidas con él.

Como no es posible estudiar aisladamente la influencia de un mecanismo de dispersión sobre la movilidad total en un dispositivo, a continuación vamos a recordar brevemente en qué consisten los otros dos procesos de dispersión y las particularidades que presentan en estructuras SOI respecto al caso convencional (*bulk*).

**Rugosidad superficial** El origen del fenómeno, como su nombre indica, está en las irregularidades de la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>. Como se recordará, a la hora de resolver autoconsistentemente las ecuaciones de Poisson y Schrödinger para calcular la estructura de bandas, se supuso que la estructura es independiente de las coordenadas paralelas a la interfaz, de modo que el potencial es sólo dependiente de la coordenada  $z$ . Sin embargo, una interfaz real nunca es realmente abrupta ni uniforme, por lo que el potencial electrostático depende también de las coordenadas paralelas [Ste77]. Esta fluctuación del potencial provoca una modificación de la estructura de las subbandas y de la densidad de carga en inversión y puede tratarse, con ayuda de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, como responsable de las transiciones entre los estados no perturbados (correspondientes al sistema con una interfaz perfecta).

En el caso de una estructura SOI, las dos interfaces pueden ser tratadas, en principio, de forma independiente de forma que cada una de ellas es responsable de un mecanismo de dispersión en el simulador de Monte Carlo [GRLV<sup>+</sup>99]. No obstante, con capas muy delgadas de silicio el espesor puede ser conforme

(constante), existiendo correlación entre la rugosidad de ambas interfaces.

Al igual que en MOSFETs convencionales, en canales de inversión presentes en dispositivos SOI, la rugosidad superficial es el mecanismo predominante con altos campos eléctricos transversales, puesto que en este caso los portadores están más confinados, más cerca de la interfaz con el óxido de puerta.

**Dispersión por fonones** Está causada por las vibraciones de los átomos de la red y es, por tanto, muy dependiente de la temperatura. El comportamiento de la movilidad limitada por fonones en dispositivos SOI es muy interesante y merece ser detallado. Además, de este modo podremos interpretar las curvas de movilidad que obtengamos posteriormente.

Conforme se disminuye el espesor de la lámina de silicio (con orientación  $\langle 100 \rangle$ ), dos fenómenos de efectos contrapuestos tienen lugar [GRLV<sup>+</sup>01a]:

- Cuanto menor es la lámina de silicio mayor es la separación entre el fondo de las subbandas 0 y 0' (este efecto se denomina modulación de las subbandas) [TKT97]. Esto sucede, por supuesto, sólo para espesores inferiores a la extensión de la capa de inversión en el caso *bulk* (dependiente del campo transversal efectivo, pero aproximadamente en torno a 20 nm). Este hecho tiene dos consecuencias beneficiosas para la movilidad. Por un lado, disminuyen las transiciones asistidas por fonones entre valles no equivalentes (prima y no prima, según la notación del capítulo 1), debido a la separación energética de las correspondientes subbandas. Por otro lado, aumenta la población de la subbanda fundamental (0) a costa del resto. La masa transversal efectiva para la conducción en los valles no prima es menor que los valles prima, por lo que la movilidad será mayor cuanto mayor sea la ocupación de la subbanda fundamental.
- Sin embargo, una reducción de la lámina de silicio provoca un mayor confinamiento de las funciones de onda transversales. De acuerdo con el principio de indeterminación, esto provoca una distribución más ancha de las funciones de onda en el espacio de momentos (en el caso extremo de los

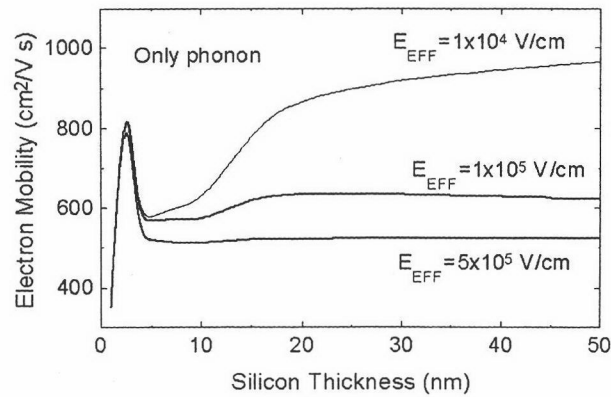


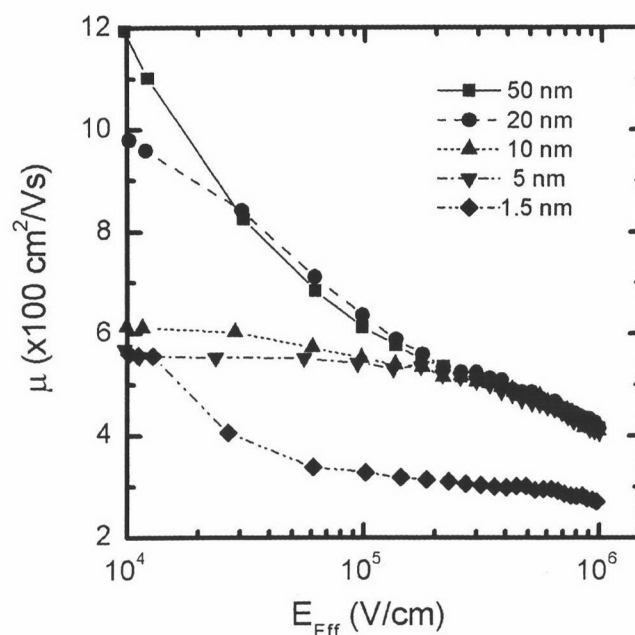
Figura 4.4: Dependencia de la movilidad limitada por fonones con el espesor de la capa de silicio, para varios campos eléctricos transversales [GRLV<sup>+</sup>01a].

electrones completamente deslocalizados, gas 3D, el momento tiene un único valor). Por tanto, teniendo en cuenta que debe conservarse el momento lineal en los procesos de dispersión (la diferencia entre los momentos en el estado final e inicial es igual al vector de onda del fonón que asiste la transición), se concluye que habrá un mayor número de fonones disponibles y que, por tanto, la movilidad será menor.

Como consecuencia de estas dos tendencias contrapuestas, se obtiene que conforme se disminuye el espesor de la capa de silicio, primero disminuye la movilidad hasta que se llega a, aproximadamente, 5 nm. Entonces, comienza a aumentar, con un máximo aproximadamente en 3 nm y después decae rápidamente. Este comportamiento se puede observar en la figura 4.4 para diferentes valores del campo transversal efectivo.

Además, esta figura se puede observar también la dependencia con el campo transversal efectivo. Como se aprecia, cuanto menor es éste, mayor es la movilidad (aunque para las muestras con la capa de silicio más delgada ambos parámetros son casi independientes).

Para ver su efecto, en la figura 4.5 se muestran las curvas de movilidad obtenidas al



**Figura 4.5:** Movilidad limitada únicamente por dispersión por fonones y por rugosidad superficial [CC00].

incluir sólo los anteriores mecanismos de dispersión. Como se ha comentado anteriormente, la dispersión producida por ambos procesos se ve favorecida por altos campos eléctricos transversales. Por eso, la movilidad aumenta o se mantiene constante al disminuir el campo eléctrico transversal (figura 4.5). Sin embargo, experimentalmente no se observa este aumento de la movilidad para bajos campos eléctricos o se obtienen valores más bajos [EMC<sup>+</sup>01]. Esto se debe a que no se ha tenido en cuenta en estas simulaciones la dispersión coulombiana que, al contrario que los otros dos mecanismos de dispersión, es más importante cuanto menor es el campo eléctrico transversal (por efecto del apantallamiento ejercido por la carga de inversión, que atenúa el efecto de las cargas externas con mayores campos transversales).

La dispersión coulombiana es debida al hecho de que la densidad de carga presente en la estructura tiene en realidad su origen en cargas puntuales. Es decir, la densidad de carga en los planos paralelos a la interfaz no es constante, sino dependiente de la coordenada paralela  $\vec{r}$ .

Cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger, consideramos una estructura ideal

en la que los centros cargados forman láminas uniformemente cargadas. Por tanto, la densidad de carga sólo depende de la coordenada transversal  $z$ . Con este modelo simple, los centros cargados únicamente determinan la relación existente entre la tensión aplicada y la curvatura de bandas obtenida. Además, ésta es independiente de las coordenadas paralelas.

Sin embargo, las cargas reales son centros localizados y la curvatura de bandas real tendrá fluctuaciones dependientes de la coordenada paralela  $\vec{r}$ . Como consecuencia, los electrones en inversión pueden ser dispersados por estas fluctuaciones, que introducen un hamiltoniano de perturbación que origina las transiciones entre los estados no perturbados (los del hamiltoniano del sistema ideal o uniforme).

Como después se detallará cuantitativamente, la presencia de una carga externa (la que no es carga móvil en inversión) en estructuras MIS o SOI origina una modificación del potencial electrostático que no es igual a la que originaría, en el mismo medio, si éste fuese infinito y no hubiese cargas móviles. Por un lado, la presencia de las interfaces provoca que aparezcan cargas imágenes consecuencia de la discontinuidad de las constantes dieléctricas. Por otro lado, la carga modifica la distribución de los electrones en inversión, lo cual a su vez también repercute en el potencial electrostático a través de la ecuación de Poisson. Además, la carga en inversión también contribuye a compensar o apantallar el efecto de la carga externa. Todos estos efectos son tenidos en cuenta simultáneamente por una ecuación de Poisson generalizada que mostraremos en el siguiente apartado.

En [GP94] ya fue desarrollado un modelo para el cálculo de la dispersión coulombiana en MOSFETs convencionales. Es decir, en estructuras con una sola interfaz Si-SiO<sub>2</sub>. En este trabajo lo generalizaremos con el objeto de aplicarlo también en estructuras SOI, en las que la presencia de una segunda interfaz Si-SiO<sub>2</sub> modifica notablemente el efecto producido por las cargas externas [GJMRCC02], [KTT02].

Tras esta introducción, comenzaremos el capítulo con la presentación del modelo usado para calcular las probabilidades de transición a causa de la dispersión coulombiana. En el siguiente apartado, mostraremos los resultados obtenidos mediante la aplicación del nuevo modelo. Finalizaremos el capítulo con un breve resumen y con

las conclusiones obtenidas.

## 4.2. Modelo teórico para la dispersión culombiana

En este apartado detallaremos el modelo teórico empleado para el cálculo de las probabilidades de transición por dispersión culombiana en estructuras SOI. En primer lugar, revisaremos el modelo existente y expondremos en qué punto es necesario adaptar el cálculo para tener en cuenta la presencia de la segunda interfaz. Posteriormente, en el siguiente apartado, realizaremos una comparación de los resultados obtenidos usando el modelo previo de una sola interfaz y el aquí presentado. Comprobaremos entonces la necesidad del nuevo modelo, que tiene en cuenta las dos interfaces Si-SiO<sub>2</sub>.

### 4.2.1. Revisión del modelo teórico previo

En este apartado realizaremos una breve revisión del modelo previo que permite obtener la probabilidad de dispersión culombiana en una estructura MOS convencional [GP94], puesto que en él nos basaremos para el estudio del mismo fenómeno en estructuras SOI después de realizar la correspondiente generalización.

#### 4.2.1.1. Cálculo de la perturbación del pozo de potencial

A la hora de resolver la ecuación de Poisson para determinar la curvatura de la banda de conducción, se supone que la carga sólo depende de la coordenada  $z$  (transversal a la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>). Es decir, se distribuye uniformemente en el plano  $XY$  paralelo a la interfaz. Sin embargo, realmente las cargas presentes en la estructura (carga en inversión, carga en depleción, cargas situadas en la interfaz Si-SiO<sub>2</sub> y en el interior del óxido, ...) son discretas, por lo que la densidad de carga experimenta fluctuaciones en el plano  $XY$ , es decir, depende también de las coordenadas paralelas. En este trabajo vamos a estudiar el efecto de las fluctuaciones de carga externa (que definimos como la que no es carga móvil) sobre la densidad de carga en inversión y sobre la movilidad en estructuras SOI.

En ausencia de carga externa, los electrones se ven afectados por un potencial  $\phi(\vec{r}, z)$ , donde  $\vec{r}$  es el vector de posición del electrón en la dirección paralela a la interfaz Si-SiO<sub>2</sub> y  $z$  su coordenada en la dirección perpendicular. Sin embargo, la carga externa responsable de la dispersión coulombiana modifica este potencial en un valor  $\phi'(\vec{r}, z)$ , de forma que el potencial total viene dado por:

$$\phi_T(\vec{r}, z) = \phi(\vec{r}, z) + \phi'(\vec{r}, z). \quad (4.87)$$

Como consecuencia, la ecuación de Schrödinger correspondiente al sistema con las cargas externas tendrá un término adicional respecto a la ecuación en ausencia de estas cargas. Esta energía potencial extra, dada por  $-\phi'(\vec{r}, z)$ , se puede ver como una perturbación al hamiltoniano del sistema sin cargas. Mediante la aplicación de la teoría de perturbaciones estacionarias de primer orden, se pueden obtener los nuevos autovalores:

$$E'_i = E_i + E_i^{(1)}, \quad (4.88)$$

donde  $i$  indexa a las subbandas,  $E_i^{(1)}$  es la corrección del autovalor correspondiente al hamiltoniano sin cargas externas ( $E_i$ ) y  $E'_i$  es la energía del mínimo de la subbanda  $i$  para el sistema perturbado. Las funciones de onda no cambian en primer orden de aplicación de la teoría de perturbaciones.

Como consecuencia del cambio en la posición energética de las subbandas se produce también un cambio en su población, de forma que el número de electrones en la subbanda  $i$  viene dado ahora por [GP94]:

$$N'_i = N_i \left( 1 + \frac{e\bar{\phi}_i(\vec{r})}{E_{d,i}} \right). \quad (4.89)$$

En esta ecuación,  $N_i$  es la población de la subbanda sin perturbar y  $\bar{\phi}_i(\vec{r})$  es igual a:

$$\bar{\phi}_i(\vec{r}) = \int \phi'(\vec{r}, z) g_i(z) dz, \quad (4.90)$$

con  $g_i(z) = |\xi_i(z)|^2$ . Finalmente,  $E_{d,i}$  recibe el nombre de energía de difusión y viene dada por:

$$E_{d,i} = -\frac{F_o(E_i)}{\frac{dF_o(E_i)}{dE_i}}, \quad (4.91)$$



siendo:

$$F_o(E_i) = \ln \left( 1 + e^{\frac{E_F - E_i}{K_B T}} \right). \quad (4.92)$$

Por tanto, como consecuencia directa de la presencia de la carga externa tenemos una modificación de la carga en inversión, que ahora es igual a:

$$\rho'_{inv}(\vec{r}, z) = -e \sum_i N'_i g_i(z) \equiv \rho_{inv}(\vec{r}, z) + \rho_{ind}(\vec{r}, z). \quad (4.93)$$

Es decir, mediante la aplicación de las expresiones (4.89) y (4.93) podemos descomponer la carga en inversión total en dos contribuciones: la carga en inversión correspondiente al sistema sin perturbar:

$$\rho_{inv}(\vec{r}, z) = -e \sum_i N_i g_i(z), \quad (4.94)$$

y la carga en inversión inducida por la presencia de las cargas externas:

$$\rho_{ind}(\vec{r}, z) = -e \sum_i N_i g_i(z) \frac{e\bar{\phi}_i(\vec{r})}{E_{d,i}}. \quad (4.95)$$

Resulta conveniente expresar esta última ecuación en función de la constante de apantallamiento en el límite de longitudes de onda largas,  $S_i$  [SH67], dada por:

$$S_i = \left( \frac{e^2}{2\varepsilon S_i} \right) \frac{N_i}{E_{d,i}}. \quad (4.96)$$

Por consiguiente:

$$\rho_{ind}(\vec{r}, z) = -2\varepsilon S_i \sum_i S_i g_i(z) \bar{\phi}_i(\vec{r}). \quad (4.97)$$

Para calcular el potencial perturbación introducido por las cargas externas y la carga en inversión hacemos uso de la ecuación de Poisson, aplicando el principio de superposición para separar los efectos de las distintas cargas. Para ello, descomponemos la carga total en las siguientes contribuciones:

$$\rho_T = (\rho_{inv} + \rho_{ext}) + (\rho'_{ext} + \rho_{ind}). \quad (4.98)$$

En esta ecuación,  $\rho_{ext}$  es la densidad de carga externa (carga que no pertenece a la capa de inversión) y  $\rho'_{ext}$  es la carga externa introducida como perturbación y responsable de la dispersión coulombiana. Por tanto, el primer paréntesis es la solución

de la ecuación de Poisson del sistema sin perturbación. La ecuación de Poisson del sistema perturbado es:

$$\nabla (\varepsilon(z)\nabla\phi_T) = \nabla (\varepsilon(z)\nabla (\phi + \phi')) = -(\rho_{inv} + \rho_{ext}) - (\rho'_{ext} + \rho_{ind}). \quad (4.99)$$

Por tanto, por el principio de superposición se tiene que:

$$\nabla (\varepsilon(z)\nabla\phi'(\vec{r}, z)) = -(\rho'_{ext}(\vec{r}, z) + \rho_{ind}(\vec{r}, z)). \quad (4.100)$$

Sustituyendo la ecuación (4.97) en la anterior, obtenemos la siguiente ecuación integro-diferencial para el cálculo de la perturbación al potencial introducida por la densidad de carga externa [GP94]:

$$\nabla (\varepsilon(z)\nabla\phi'(\vec{r}, z)) - 2\varepsilon_{Si} \sum_i S_i g_i(z) \bar{\phi}_i(\vec{r}) = -\rho'_{ext}(\vec{r}, z). \quad (4.101)$$

De este modo hemos aislado el problema de obtener el potencial responsable de la dispersión coulombiana, pudiéndolo calcular conocida la densidad de carga externa mediante la resolución de anterior ecuación de Poisson, que incluye el apantallamiento ejercido por las cargas móviles del canal de inversión (y que, por tanto, depende a su vez de la solución de la ecuación,  $\phi'(\vec{r}, z)$ ).

La resolución de esta ecuación requiere algunas transformaciones adicionales. En primer lugar, con el fin de eliminar la dependencia con la coordenada transversal  $\vec{r}$  trabajaremos, de ahora en adelante, con las transformadas de Fourier de las anteriores magnitudes. En concreto, se define la transformada de Fourier bidimensional como:

$$\phi'(\vec{Q}, z) = \frac{1}{S} \int \phi'(\vec{r}, z) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} d\vec{r}, \quad (4.102)$$

donde  $S$  es el área de la estructura en el plano paralelo  $XY$ . Si multiplicamos la ecuación (4.101) por  $e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$  e integramos en  $\vec{r}$  obtenemos la ecuación equivalente que relaciona la transformada de Fourier de las perturbaciones al potencial electrostático ( $\phi'(\vec{Q}, z)$ ) con la transformada de la densidad de carga externa responsable de la dispersión coulombiana ( $\rho'_{ext}(\vec{Q}, z)$ ):

$$\left( \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon(z) \frac{\partial}{\partial z} - \varepsilon(z) Q^2 \right) \phi'(\vec{Q}, z) = -\rho_{ind}(\vec{Q}, z) - \rho'_{ext}(\vec{Q}, z), \quad (4.103)$$

donde:

$$\rho_{ind}(\vec{Q}, z) = -2\varepsilon_{Si} \sum_i S_i g_i(z) \int \phi'(\vec{Q}, z_2) g_i(z_2) dz_2. \quad (4.104)$$

A continuación definimos las funciones de Green  $G_Q(z, z_1)$  como la solución de la ecuación diferencial (4.103) en la que la excitación la provoca una carga unidad y puntual situada en  $z_1$ :

$$\left( \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon(z) \frac{\partial}{\partial z} - \varepsilon(z) Q^2 \right) G_Q(z, z_1) = -\delta(z - z_1). \quad (4.105)$$

Podemos entonces expresar la solución de la ecuación (4.103) como una combinación lineal de las funciones de Green pesada por la carga que realmente existe en cada punto:

$$\phi'(\vec{Q}, z) = \int G_Q(z, z_1) \left( \rho_{ind}(\vec{Q}, z_1) + \rho'_{ext}(\vec{Q}, z_1) \right) dz_1. \quad (4.106)$$

Más adelante detallaremos el cálculo de las funciones de Green. De momento, las supondremos conocidas.

Sustituyendo  $\rho_{ind}(\vec{Q}, z)$  por su valor (ecuación 4.104) en la anterior expresión obtenemos:

$$\begin{aligned} \phi'(\vec{Q}, z) = & -2\varepsilon_{Si} \sum_i S_i \int G_Q(z, z_1) g_i(z_1) dz_1 \int \phi'(\vec{Q}, z_2) g_i(z_2) dz_2 + \\ & + \int G_Q(z, z_1) \rho'_{ext}(\vec{Q}, z_1) dz_1. \end{aligned} \quad (4.107)$$

Para simplificar la resolución de esta ecuación, supondremos que podemos descomponer el potencial creado en  $z$ ,  $\phi'(\vec{Q}, z)$ , en las contribuciones causadas por las cargas externas situadas en diferentes posiciones de modo que:

$$\phi'(\vec{Q}, z) = \int \frac{\rho'_{ext}(\vec{Q}, z')}{e} \phi'(\vec{Q}, z, z') dz'. \quad (4.108)$$

Donde, por tanto,  $\phi'(\vec{Q}, z, z')$  sería la contribución a la perturbación del potencial electrostático en la posición  $z$  de las cargas situadas en  $z'$ . Sustituyendo (4.108) en (4.107) se demuestra que esto es posible si las funciones  $\phi'(\vec{Q}, z, z')$  son soluciones de

las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned} \phi'(\vec{Q}, z, z') = & -2\varepsilon S_i \sum_i S_i \int G_Q(z, z_1) g_i(z_1) dz_1 \int \phi'(\vec{Q}, z_2, z') g_i(z_2) dz_2 + \\ & + eG_Q(z, z'). \end{aligned} \quad (4.109)$$

Por tanto, hemos descompuesto una ecuación que implicaba un gran número de cargas arbitrariamente dispuestas (4.107) en un conjunto de ecuaciones más sencillas que involucran una única carga situada en  $z'$ . Esta ecuación integral contiene la incógnita en ambos lados y necesita un proceso iterativo para ser resuelta. Más adelante comentaremos los detalles para su resolución.

Obsérvese que el desarrollo mostrado en este apartado anterior es completamente general. Las particularidades de cada estructura están recogidas en las funciones de Green.

#### 4.2.1.2. Cálculo de la probabilidad de dispersión coulombiana

Resuelta la ecuación (4.109), se puede calcular ya el hamiltoniano de perturbación responsable de las transiciones:

$$H'(\vec{Q}, z) = -e\phi'(\vec{Q}, z) = - \int \rho'_{ext}(\vec{Q}, z') \phi'(\vec{Q}, z, z') dz'. \quad (4.110)$$

Mediante la regla de oro de Fermi podemos determinar la probabilidad de que un electrón con vector de onda paralelo  $\vec{k}$  en la subbanda  $i$  pase a cualquier estado de la subbanda  $j$ :

$$P_{ij}(\vec{k}) = \frac{S}{2\pi\hbar} \int \left| \int dz \xi_j(z) H'(\vec{Q}, z) \xi_i(z) \right|^2 \delta(E - E') d\vec{k}', \quad (4.111)$$

donde  $\xi_j(z)$  y  $\xi_i(z)$  son las funciones de onda en la dirección perpendicular a la interface de los estados final e inicial, respectivamente, y  $\vec{Q} = \vec{k}' - \vec{k}$ .  $E$  y  $E'$  son las energías inicial y final del electrón.

Para facilitar la realización de los cálculos, se descompone la carga externa en capas paralelas a la interfaz Si-SiO<sub>2</sub>. La capa  $t$ -ésima tiene anchura  $\Delta z_t$  y una densidad de carga por unidad de área igual a  $\sigma'_t(\vec{Q}, z_t)$ , de modo que:

$$\phi'(\vec{Q}, z) = \sum_t \frac{\sigma'_t(\vec{Q}, z_t)}{e} \phi'(\vec{Q}, z, z_t). \quad (4.112)$$

Sustituyendo en la expresión (4.110) y ésta en la (4.111), se obtiene que la probabilidad de dispersión viene dada por [GP94], [GLVJT<sup>+</sup>94]:

$$P_{ij}(\vec{k}) = \sum_t \left\{ \frac{S}{2\pi\hbar} \int_{\vec{k}'} \left( \sigma'_t(\vec{Q}, z_t) \sigma'^*_t(\vec{Q}, z_t) \left| M_t^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t) \right|^2 \right) \delta(E - E') d\vec{k}' \right\} + \quad (4.113)$$

$$+ \sum_{t \neq u} \left\{ \frac{S}{2\pi\hbar} \int_{\vec{k}'} \left( \sigma'_t(\vec{Q}, z_t) \sigma'^*_u(\vec{Q}, z_u) \left| M_{tu}^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t, z_u) \right|^2 \right) \delta(E - E') d\vec{k}' \right\},$$

con:

$$\left| M_{tu}^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t, z_u) \right|^2 = \tilde{\phi}_t^{(ij)}(\vec{Q}, z_t) \left( \tilde{\phi}_u^{(ij)}(\vec{Q}, z_u) \right)^*, \quad (4.114a)$$

$$\left| M_t^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t) \right|^2 = \tilde{\phi}_t^{(ij)}(\vec{Q}, z_t) \left( \tilde{\phi}_t^{(ij)}(\vec{Q}, z_t) \right)^*, \quad (4.114b)$$

y:

$$\tilde{\phi}_t^{(ij)}(\vec{Q}, z_t) = \int dz \xi_j^*(z) \phi'(\vec{Q}, z, z_t) \xi_i(z). \quad (4.115)$$

siendo, como se ha expuesto antes,  $z_t$  en cada caso la posición de las cargas externas responsables de la dispersión. Como se ve, las probabilidades de transición están controladas por estas integrales del solapamiento de las funciones de onda, ponderado con la perturbación introducida por la carga externa.

Como se ha expuesto anteriormente, lo que realmente causa la dispersión coulombiana son las fluctuaciones de la carga respecto del valor medio. Por tanto, la densidad de carga bidimensional  $\sigma'_t(\vec{r}, z_t)$  responsable de la dispersión coulombiana se puede expresar como:

$$\sigma'_t(\vec{r}, z_t) = q_t \tilde{n}_t(\vec{r}, z_t) \equiv q_t (n_t(\vec{r}, z_t) - N_t), \quad (4.116)$$

donde  $q_t$  es la carga correspondiente a un centro cargado de la capa  $t$ -ésima y  $\tilde{n}_t(\vec{r}, z_t)$  es la fluctuación de la densidad de carga en la posición  $\vec{r}$  de la misma subcapa, definida como la diferencia entre la carga en esa posición y la carga media  $N_t$ :

$$N_t = \frac{1}{S} \int_S n_t(\vec{r}, z_t) d^2\vec{r}. \quad (4.117)$$

En resumen,  $q_t N_t$  es el valor de la densidad de carga con el que se supone que está cargada uniformemente la capa  $t$ -ésima a la hora de resolver la ecuación de Poisson, mientras que  $q_t \tilde{n}_t(\vec{r}, z_t)$  es la fluctuación de la carga, respecto al valor medio, responsable de la dispersión coulombiana.

Puesto que resulta imposible, además de poco práctico, calcular la probabilidad de dispersión dada por (4.113) para cada una de las posibles distribuciones de los centros cargados, lo que se hace es calcular la probabilidad de dispersión promedio debida a todas ellas:

$$\Gamma_{ij}(\vec{k}) \equiv \langle P_{ij}(\vec{k}) \rangle, \quad (4.118)$$

donde  $\langle f \rangle$  representa el valor medio de la función  $f$  dependiente de las coordenadas de los centros cargados:

$$\langle f \rangle = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N), \quad (4.119)$$

donde  $N$  es el número de partículas y  $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  es la probabilidad de que la partícula 1 esté en un elemento de superficie  $d\vec{r}_1$  en torno a  $\vec{r}_1$ , y la partícula 2 en torno a  $\vec{r}_2, \dots$

De acuerdo con esta notación, el valor medio de la probabilidad de dispersión viene dado por [GP94]:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\vec{k}) = & \sum_t \left\{ \frac{S}{2\pi\hbar} \int_{\vec{k}'} \left( q_t^2 \langle \tilde{n}_t(\vec{Q}, z_t) \tilde{n}_t^*(\vec{Q}, z_t) \rangle \left| M_t^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t) \right|^2 \right) \delta(E - E') d\vec{k}' \right\} + \\ & (4.120) \\ & + \sum_{t \neq u} \left\{ \frac{S}{2\pi\hbar} \int_{\vec{k}'} \left( q_t q_u \langle \tilde{n}_t(\vec{Q}, z_t) \tilde{n}_u^*(\vec{Q}, z_u) \rangle \left| M_{tu}^{(i,j)}(\vec{Q}, z_t, z_u) \right|^2 \right) \delta(E - E') d\vec{k}' \right\}. \end{aligned}$$

En esta ecuación,  $\langle \tilde{n}_t(\vec{Q}, z_t) \tilde{n}_t^*(\vec{Q}, z_t) \rangle$  representa la correlación espacial de las cargas presentes en una misma capa, mientras que  $\langle \tilde{n}_t(\vec{Q}, z_t) \tilde{n}_u^*(\vec{Q}, z_u) \rangle$  (con  $t \neq u$ ) es la correlación de las cargas que se encuentran en láminas diferentes. El valor de estas magnitudes depende de la distribución que se suponga para los centros cargados. Con un modelo de esferas duras se demuestra que [GP94]:

$$\langle \tilde{n}_t(\vec{Q}) \tilde{n}_t^*(\vec{Q}) \rangle = \frac{N_t}{S} \left( 1 - \frac{2C J_1(QR_0)}{QR_0} \right), \quad (4.121)$$

siendo  $J_1(x)$  la función de Bessel de primer orden,  $N_t$  es el número de partículas por unidad de superficie ( $N_t^{-1}$  es el área media que ocupa uno de los centros cargados) y  $R_0$  es la distancia mínima a la que pueden estar dos partículas. Finalmente, la

constante  $C$  es una medida del grado de correlación de las cargas y viene dada por:

$$C = \frac{\pi R_0^2}{N_t^{-1}} = \pi R_0^2 N_t. \quad (4.121)$$

Si  $C = 1$ , la distribución es uniforme, mientras que  $C = 0$  representa el caso de una distribución completamente aleatoria.

Por otro lado, la correlación entre las cargas situadas en dos láminas distintas, separadas una distancia  $d$ , viene dada por:

$$\langle \tilde{n}_t(\vec{Q}, z_t) \tilde{n}_u^*(\vec{Q}, z_u) \rangle = \begin{cases} -2C' \frac{N_{eff}}{S} \frac{J_1(QR'_0)}{QR'_0} & \text{si } d < R_0 \\ 0 & \text{si } d > R_0 \end{cases}. \quad (4.122)$$

En esta ecuación,  $N_{eff} = \sqrt{N_t N_u}$ ,  $R'_0 = \sqrt{R_0^2 - d^2}$  y  $C'$  es la constante que determina el grado de interacción de una distribución sobre la otra y viene dada por  $C' = \pi R_0'^2 N_{eff}$ .

Sustituyendo las expresiones (4.120) y (4.122) en (4.119) obtenemos finalmente la probabilidad promedio de transición  $\Gamma_{ij}(\vec{k})$ .

Por otro lado, en cuanto a las posibles transiciones, se demuestra que es suficiente con sólo tener en cuenta aquellas dentro de un mismo valle y de una misma subbanda [GP94]. En efecto, para las transiciones entre valles, el cambio en el vector de onda ( $Q = |\vec{k} - \vec{k}'|$ ) es mucho mayor que para transiciones intervalle (del orden de  $9.3 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ). Para estos valores de  $Q$ , las funciones de Green y los elementos de matriz correspondientes son mucho menores que para valores más bajos, como se mostrará en el apartado 4.3.2. En cuanto a las transiciones entre subbandas de un mismo valle, su contribución es también despreciable debido a que los estados electrónicos correspondientes son ortogonales y, por consiguiente, la integral de solapamiento de (4.114) toma un valor mucho menor que las de las transiciones intersubbanda.

Por tanto, si sólo consideramos transiciones intersubbanda, la diferencia entre los vectores de onda  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$  es pequeña y tenemos que  $Q = 2k \text{sen}(\theta/2)$ , siendo  $\theta$  el ángulo de separación de los dos vectores que apuntan al estado inicial y final, respectivamente. Después de realizar la integral en  $\vec{k}'$  de la expresión (4.119) y de sustituir los valores de las correlaciones (4.120) y (4.122), se obtiene que la probabilidad de dispersión promedio para las transiciones dentro de un mismo valle y de una misma subbanda

viene dada por:

$$\Gamma_i(\vec{k}) = \sum_t \left\{ \frac{N_t m_{\parallel}^*}{\pi \hbar^3} \int \left( q_t^2 \left( 1 - \frac{2C J_1(QR_0)}{QR_0} \right) |M_t^{(i,i)}(\vec{Q}, z_t)|^2 \right) d\theta \right\} - \sum_{t \neq u} \left\{ \frac{N_{eff} m_{\parallel}^*}{\pi \hbar^3} \int \left( q_t q_u 2C' \frac{N_{eff}}{S} \frac{J_1(QR'_0)}{QR'_0} |M_{tu}^{(i,i)}(\vec{Q}, z_t, z_u)|^2 \right) d\theta \right\}.$$

En esta ecuación,  $m_{\parallel}^*$  es la masa efectiva del electrón en la dirección paralela a la interfaz.

### 4.2.2. Funciones de Green

En este apartado mostraremos cómo calcular las funciones de Green que deben emplearse en la ecuación (4.109) para la obtención de la perturbación del potencial electrostático. En trabajos previos se usan las funciones de Green correspondientes a un sistema MOS incluso para el cálculo de la dispersión coulombiana en una estructura SOI [CC00], [GRLV<sup>+</sup>01a], [GRLV<sup>+</sup>01b], [GF01]. En este caso, para calcular las funciones de Green no se tiene en cuenta la influencia de una capa de aislante sobre la otra. Es decir, las funciones de Green son las correspondientes a una estructura constituida por una capa de dióxido de silicio y otra de silicio (o, en general, por dos materiales con diferente constante dieléctrica) con un contacto de puerta metálico.

En este trabajo, vamos a calcular las funciones de Green para una estructura SOI. Esto es, para dos capas de dióxido de silicio entre las cuales hay una lámina de silicio (en general, para tres capas de materiales diferentes) y que están, a su vez, entre dos puertas metálicas (MOS SOI de doble puerta o DGSOI) o entre una puerta metálica y un substrato de silicio (MOS SOI de simple puerta o SGSOI). Ésta es una de las aportaciones del presente trabajo y nos permitirá obtener curvas de movilidad en MOSFETs de tecnología SOI con capas de silicio muy delgadas.

La estructura bajo estudio se representa en la figura 4.6, donde también se muestran algunos de los símbolos utilizados a continuación.

Como vimos anteriormente, la perturbación del potencial electrostático se puede calcular resolviendo la ecuación (4.107) ó (4.109). Ambas contienen las funciones de Green correspondientes a la ecuación diferencial (4.103). Estas funciones de Green se



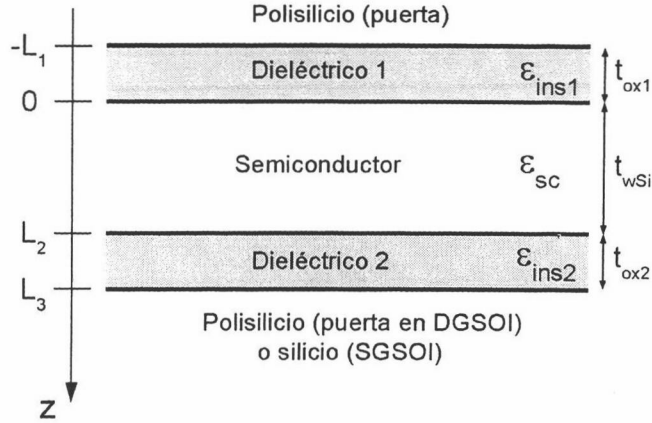


Figura 4.6: Esquema de la estructura SOI considerada.

pueden calcular multiplicando la ecuación (4.107) por:

$$\frac{1}{Q} e^{-Q|z-z_1|}$$

e integrando después con las siguientes condiciones de contorno:

$$\phi'(\vec{Q}, -L_1) = 0, \quad (4.123a)$$

$$\phi'(\vec{Q}, L_3) = 0, \quad (4.123b)$$

$$\frac{d\phi'(\vec{Q}, -L_1)}{dz} = 0, \quad (4.123c)$$

$$\frac{d\phi'(\vec{Q}, L_3)}{dz} = 0, \quad (4.123d)$$

$$\epsilon_{ins1} \frac{d\phi'(\vec{Q}, 0^-)}{dz} - \epsilon_{sc} \frac{d\phi'(\vec{Q}, 0^+)}{dz} = \sigma_{ss1}(\vec{Q}), \quad (4.123e)$$

$$\epsilon_{sc} \frac{d\phi'(\vec{Q}, L_2^-)}{dz} - \epsilon_{ins2} \frac{d\phi'(\vec{Q}, L_2^+)}{dz} = \sigma_{ss2}(\vec{Q}). \quad (4.123f)$$

$\sigma_{ss1}$  y  $\sigma_{ss2}$  son las transformadas de Fourier de la densidad de carga situada justo en las interfaces entre el semiconductor y el aislante superior (1) e inferior (2), respectivamente.  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  son las coordenadas de las interfaces que separan a los aislantes, como indica el dibujo de la figura 4.6. Finalmente,  $\epsilon_{ins1}$ ,  $\epsilon_{ins2}$  y  $\epsilon_{sc}$  son las constantes dieléctricas de los materiales.

Tras algunas laboriosas pero sencillas transformaciones, se demuestra que las funciones de Green correspondientes vienen dadas por las siguientes expresiones:

$$G_Q(z, z_1) = \frac{1}{2\varepsilon_{ins1}Q} e^{-Q|z-z_1|} + \left[ \frac{A}{2Q} - \frac{1}{2\varepsilon_{ins1}Q} \right] e^{-Q(|z|+|z_1|)} + \frac{A}{2Q} \frac{\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins2}}{\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins2}} e^{-Q(|L_2-z_1|+|L_2-z|)} \quad \text{si } -L_1 < z < 0, \quad (4.124a)$$

$$G_Q(z, z_1) = \frac{1}{2\varepsilon_{sc}Q} e^{-Q|z-z_1|} + \frac{A}{4Q} \left( 1 - \frac{\varepsilon_{ins1}}{\varepsilon_{sc}} \right) e^{-Q(|z|+|z_1|)} + \frac{B}{4Q} \left( 1 - \frac{\varepsilon_{ins2}}{\varepsilon_{sc}} \right) e^{-Q(|L_2-z|+|L_2-z_1|)} + \frac{C}{4Q} e^{-Q[(L_2-z)+L_2+|z_1|]} + \frac{C}{4Q} e^{-Q(z+L_2+|L_2-z_1|)} \quad \text{si } 0 < z < L_2, \quad (4.124b)$$

$$G_Q(z, z_1) = \frac{1}{2\varepsilon_{ins2}Q} e^{-Q|z-z_1|} + \left[ \frac{B}{2Q} - \frac{1}{2\varepsilon_{ins2}Q} \right] e^{-Q(|z-L_2|+|z_1-L_2|)} + \frac{B}{2Q} \frac{\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins1}}{\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins1}} e^{-Q(z+|z_1|)} \quad \text{si } L_2 < z < L_3. \quad (4.124c)$$

Con los coeficientes  $A$ ,  $B$  y  $C$ :

$$A = \frac{2(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins2})}{(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins2}) - e^{-2QL_2}(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins2})}, \quad (4.125a)$$

$$B = \frac{2(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins1})}{(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins2}) - e^{-2QL_2}(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins2})}, \quad (4.125b)$$

$$C = \frac{2(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins2})}{\varepsilon_{sc} [(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} + \varepsilon_{ins2}) - e^{-2QL_2}(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins1})(\varepsilon_{sc} - \varepsilon_{ins2})]}. \quad (4.125c)$$

Como se puede comprobar fácilmente, estas expresiones coinciden con las funciones de Green del viejo modelo [GLVJT<sup>+</sup>94] (que no considera la interacción entre las dos interfaces) cuando la capa de silicio se hace muy ancha ( $L_2 \rightarrow \infty$ ). Por otro lado, si los dos aislantes están formados por el mismo material ( $\varepsilon_{ins1} = \varepsilon_{ins2}$ ), entonces la estructura es simétrica y las dos superficies son intercambiables de forma que:

$$G_Q(z, z_1) = G_Q(L_2 - z, L_2 - z_1). \quad (4.126)$$

## 4.3. Resultados

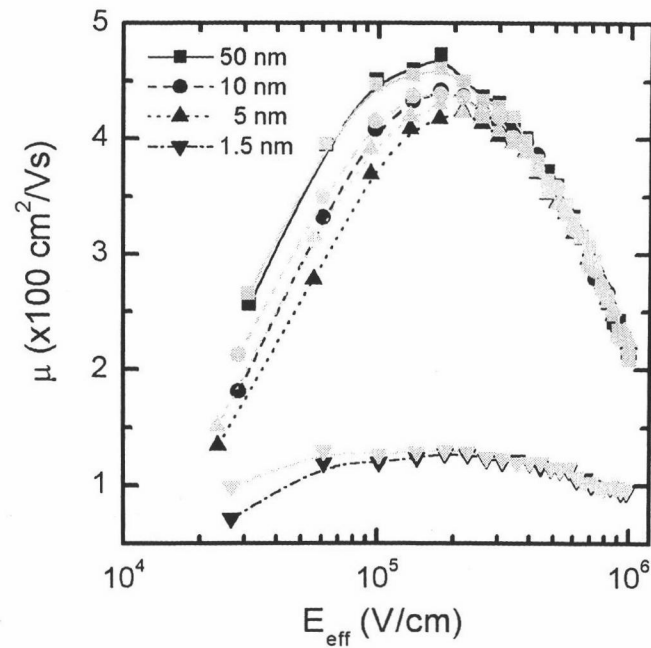
En este apartado mostraremos los resultados obtenidos usando las nuevas funciones de Green para el cálculo de la dispersión culombiana. En primer lugar, se realiza una comparación con el modelo de una sola interfaz. Posteriormente, se representan las propias funciones de Green, mostrando su dependencia con el espesor de la capa de silicio, con las constantes dieléctricas de los aislantes y con la coordenada  $Q$ . También se verá la diferencia entre estas funciones y las correspondientes a una sola interfaz Si-SiO<sub>2</sub>. Seguidamente, se obtendrán curvas de movilidad para diferentes MOSFETs SOI. Posteriormente, se analizará el apantallamiento que produce la carga en inversión y su papel sobre la movilidad limitada por la dispersión culombiana. Finalmente, se estudiará la dependencia de la dispersión culombiana, y de la movilidad en general, con la temperatura. Para ello, mostraremos curvas calculadas con una temperatura de 77 K.

### 4.3.1. Comparación con el modelo previo

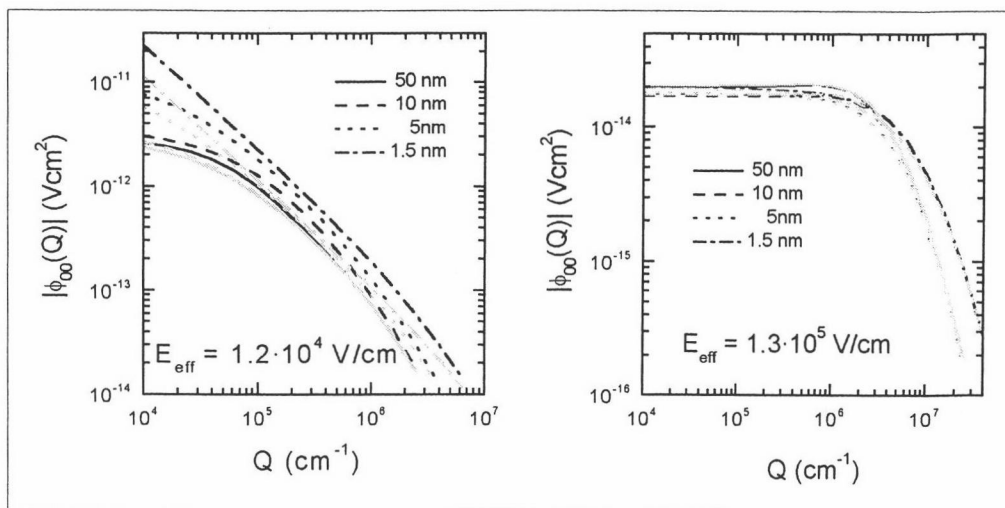
En este apartado vamos a adelantar algunas de las curvas de movilidad obtenidas empleando el nuevo modelo para el cálculo de la dispersión culombiana, anteriormente expuesto, con el fin de comprobar la necesidad de usarlo en lugar del antiguo. Como ya hemos comentado, este nuevo modelo para el cálculo de la dispersión culombiana usa las funciones de Green correspondientes a un sistema SOI (ec. 4.124) en lugar de las correspondientes a un sistema MOS, con la capa de silicio extendiéndose indefinidamente [GLVJT<sup>+</sup>94].

En la figura 4.7 se muestran los resultados obtenidos con ambos modelos para tres muestras con diferente espesor de la capa de silicio. Como puede observarse, hay diferencias apreciables, que son mayores con bajos campos transversales, puesto que en esta región es donde predomina la dispersión culombiana. Por otro lado, los elementos de matriz (4.114) calculados mediante los dos modelos se representan en la figura 4.8.

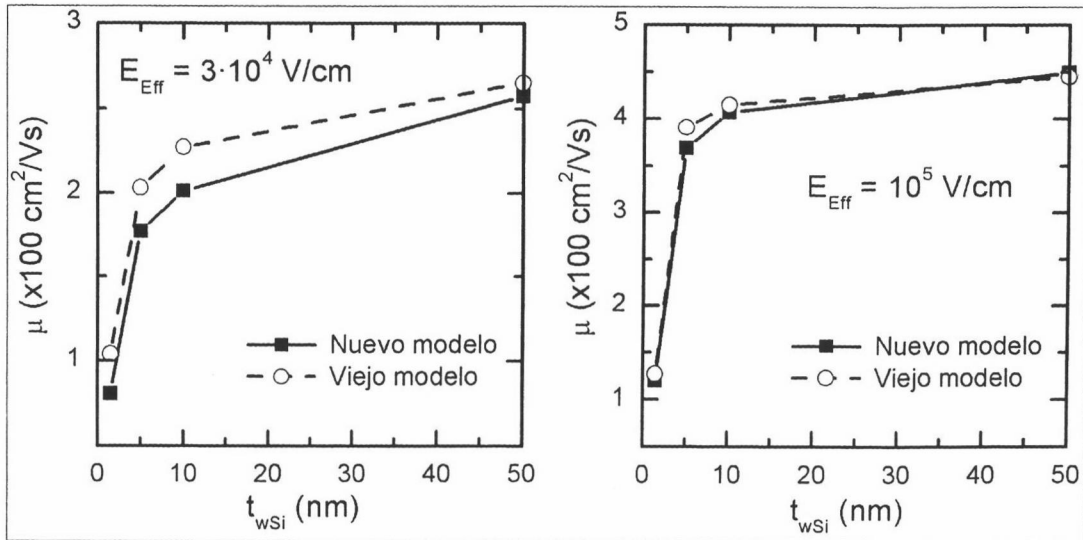
Como puede verse en ambas figuras, la diferencia entre los resultados es mayor



**Figura 4.7:** Comparación de los resultados obtenidos con el nuevo modelo y con el modelo de una sola interfaz para el cálculo de la dispersión coulombiana. Se ha supuesto una carga de  $5 \times 10^{10} \text{ C/cm}^2$  en las dos interfaces.



**Figura 4.8:** Elementos de matriz 4.114 (correspondientes a la subbanda fundamental 0), obtenidos con los dos modelos bajo discusión.

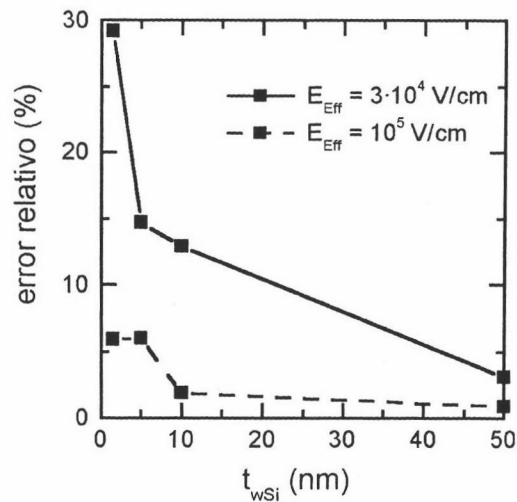


**Figura 4.9:** Movilidad obtenida con el viejo y con el nuevo modelo de dispersión coulombiana en función del espesor de la capa de silicio (con el campo transversal indicado en las gráficas).

cuanto menor sea el espesor del silicio ( $t_{wSi}$ ) y el campo eléctrico transversal. Para analizar mejor los resultados, hemos realizado dos secciones transversales a los datos de la figura 4.7 (para dos campos eléctricos transversales distintos).

La figura 4.9 muestra la movilidad en función del espesor de la capa de silicio, calculada empleando los dos modelos bajo discusión. Como puede observarse, en todos los casos la movilidad obtenida con el nuevo modelo es inferior que la correspondiente al modelo de una sola interfaz.

Este resultado es coherente, pues el modelo nuevo tiene en cuenta la extensión finita de la capa de silicio y la presencia de la otra capa de óxido de silicio. Debido a que el dióxido de silicio tiene menor constante dieléctrica que el silicio, se polariza menos. Por tanto, el dióxido de silicio tiene menos capacidad que el silicio para compensar la carga externa mediante las cargas fijas resultantes de su polarización. Por ello, la influencia de las cargas responsables de la perturbación se subestima si consideramos que el silicio se extiende indefinidamente y, por tanto, la movilidad obtenida es mayor. En el siguiente apartado comentaremos con más detalle este fenómeno.



**Figura 4.10:** Error relativo obtenido por la aplicación del viejo modelo. Se define como  $\frac{\mu_v - \mu_n}{\mu_n}$ , donde  $\mu_n$  y  $\mu_v$  son las movilidades obtenidas con el modelo nuevo y viejo, respectivamente.

En la gráfica de la izquierda de la figura 4.9 (correspondiente a un campo eléctrico transversal bajo) se puede apreciar que la dependencia con el espesor del silicio es más débil empleando el modelo de una sola interfaz. Esto se debe a que a la hora de calcular la dispersión culombiana con este modelo no se tiene en cuenta la extensión finita del silicio ni la presencia de la otra capa de dióxido de silicio.

En cuanto al comportamiento con mayores campos eléctricos transversales, la diferencia entre ambos modelos es mucho menor. La causa es que la densidad de carga en inversión es mucho mayor y por tanto también el correspondiente apantallamiento, por lo que pierde importancia la presencia de la otra interfaz.

Finalmente, en la figura 4.10 se muestra el error cometido (en tanto por ciento) por la aplicación del viejo modelo en lugar del nuevo. Como cabía esperar, el error relativo es tanto mayor cuanto más estrecha es la capa de silicio.

### 4.3.2. Funciones de Green

En este apartado representaremos y analizaremos las funciones de Green. Como se comentó anteriormente, éstas serían iguales a la perturbación del potencial si no

hubiese apantallamiento. Por tanto, observar la diferencia entre las tendencias aquí mostradas y las de las curvas de movilidad y de los elementos de matriz nos va a dar una idea de la importancia del apantallamiento. En cualquier caso, las funciones de Green nos pueden dar una pista sobre la influencia de parámetros como el espesor de la capa de silicio o las constantes dieléctricas de los aislantes.

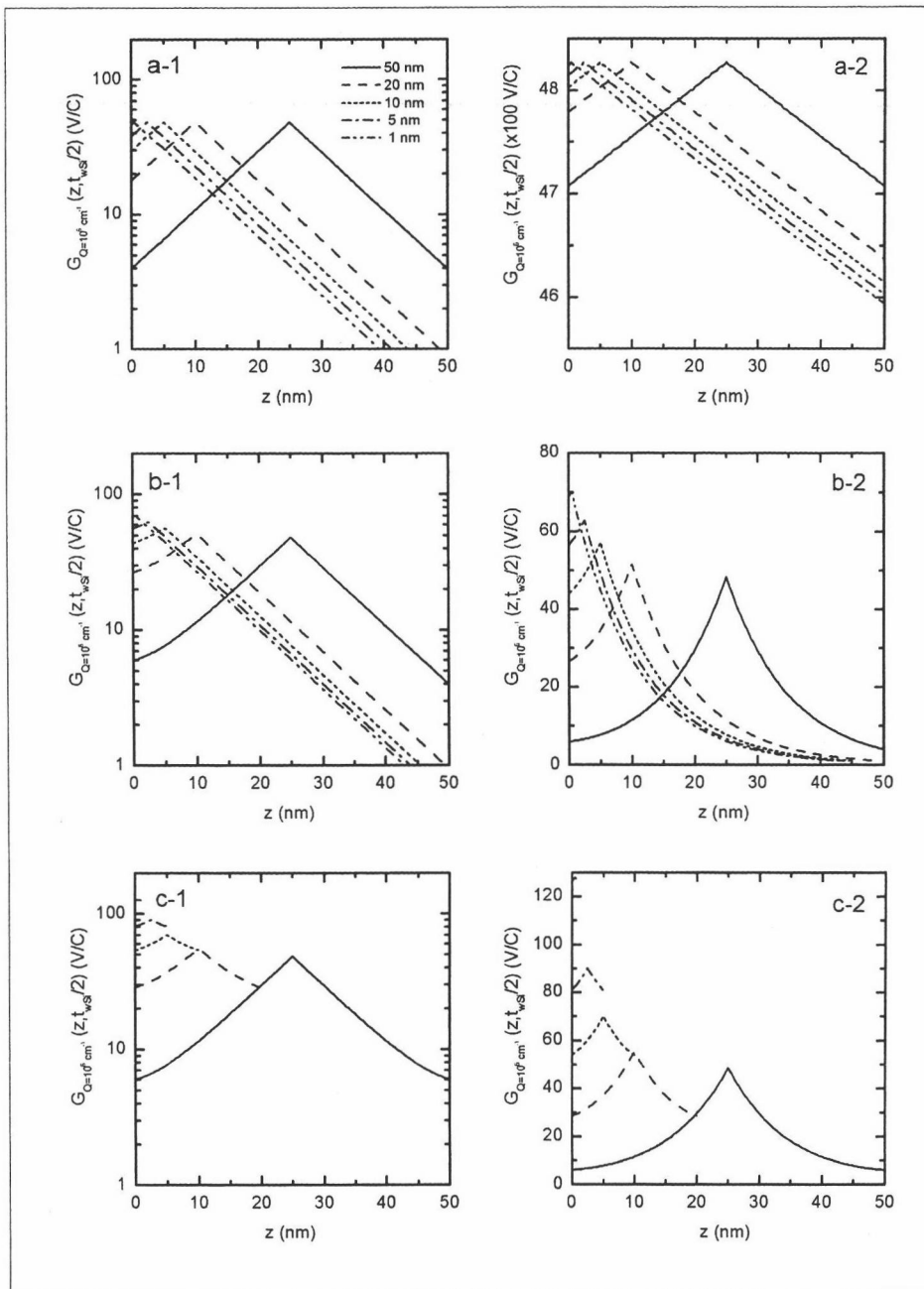
#### 4.3.2.1. Influencia del espesor de la capa de silicio y de las constantes dieléctricas

El efecto de una carga perturbación será tanto mayor cuanto menor sea la constante dieléctrica del material en el que se encuentra (supongamos que, de momento, no hay interfaces). Cuanto mayor sea la constante dieléctrica, más se puede polarizar el medio como reacción a la carga y antes (en menor distancia) podrá contrarrestar su efecto. El caso límite es el de un metal, que tiene constante dieléctrica infinita.

Sea una estructura como la de la figura 4.6 con una carga situada en el medio de la lámina de silicio. En primer lugar, supongamos que las constantes dieléctricas de los óxidos son las mismas que la del silicio. En este caso, se obtienen las siguientes funciones de Green representadas en las figuras 4.11a-1 y 4.11a-2 (en escala logarítmica y lineal, respectivamente). En este caso, a igual distancia a la carga perturbación, el potencial resultante es el mismo y el potencial máximo es independiente del espesor de la lámina de silicio (lógicamente, pues es como si fuese infinita).

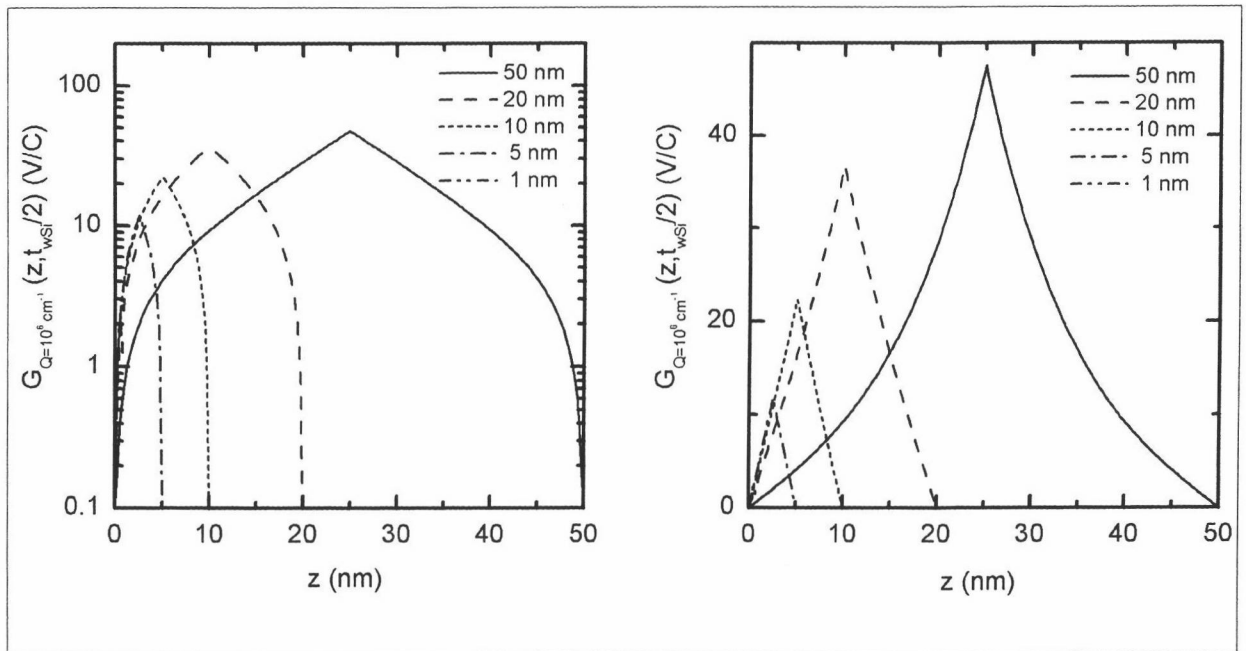
Si ahora situamos el óxido de puerta superior ( $\epsilon_{ins1} = 3.9\epsilon_0$ ), pero no el inferior ( $\epsilon_{ins2} = 11.7\epsilon_0 = \epsilon_{Si}$ ) obtendremos las funciones de Green correspondientes a una estructura MOS o a una estructura SOI en la que no se tiene en cuenta la influencia de una interfaz sobre la otra, como en el antiguo modelo. El resultado se muestra en las figuras 4.11b-1 y 4.11b-2. Como puede verse, el potencial perturbación aumenta significativamente respecto al caso anterior, especialmente cuanto menor es el espesor de la capa de silicio (hay menos material con constante dieléctrica alta). Además, se observa una consecuencia de la asimetría de la estructura: el potencial decae más lentamente en el lado del óxido.

El aumento de la perturbación introducida por la carga externa es aún más acu-



**Figura 4.11:** Funciones de Green para las siguientes estructuras: a) una única lámina de silicio. b) una capa de dióxido de silicio y otra de silicio. c) Una capa de silicio entre dos capas de dióxido de silicio. Las figuras de la izquierda están en escala logarítmica y el resto en escala lineal. El espesor de la lámina de silicio varía entre 50 y 1 nm: — 50 nm; -- 20 nm; - - - - 10 nm; - . - . - 5 nm; - - - - - 1 nm. Las cargas están situadas en el medio de las capas de silicio.





**Figura 4.12:** Funciones de Green correspondientes a una lámina de silicio (con el espesor indicado) entre dos aislantes de alta constante dieléctrica ( $\epsilon_{ins1} = \epsilon_{ins2} = 20\epsilon_0$ ). Las cargas están situadas en el medio de las capas de silicio.

sado si además situamos el óxido inferior ( $\epsilon_{ins1} = \epsilon_{ins2} = 3.9\epsilon_0$ ) y aplicamos el nuevo modelo para el cálculo de las funciones de Green (figuras 4.11c-1 y 4.11c-2). En este caso, las consecuencias de la carga externa son más acusadas (mayor perturbación y de mayor alcance) y se vuelve a recuperar la simetría.

Como ya se comprobó con las curvas de movilidad, se obtienen diferentes resultados según se emplee el modelo de una sola interfaz (gráfica 4.11b) o el nuevo (gráfica 4.11c) para el cálculo de las funciones de Green en una estructura SOI: en el último caso la dependencia con el espesor de la lámina de silicio es más acusada y, para un mismo espesor, la perturbación introducida es mayor.

En resumen, el efecto de la disminución de la capa de silicio es aumentar la dispersión coulombiana (al menos la perturbación en ausencia de apantallamiento, a parte de otros efectos que veremos posteriormente) a causa de que se disminuye la cantidad de material con mayor constante dieléctrica.

Una consecuencia de lo anterior es que si usásemos materiales de alta constante dieléctrica, al disminuir el espesor de la capa de silicio no sólo no aumentaríamos la perturbación, sino que se mejoraría respecto del caso sin aislante inferior (*bulk*). Como ejemplo, en la figura 4.12 se muestra el resultado obtenido suponiendo una estructura SOI en la cual los aislantes tienen alta constante dieléctrica ( $\epsilon_{ins1} = \epsilon_{ins2} = 20\epsilon_0$ ). Este valor es parecido, por ejemplo, al de la constante dieléctrica relativa del  $\text{HfO}_2$  [FNC01]). Como se puede observar, la perturbación introducida por la carga es menor que en los casos anteriores y además disminuye al estrechar la capa de silicio, al contrario de lo que sucede cuando el aislante es dióxido de silicio.

No obstante, el uso de estos aislantes presenta otros problemas (como la mayor dispersión inducida por los fonones ópticos del óxido [FNC01]).

#### 4.3.2.2. Influencia de $Q$

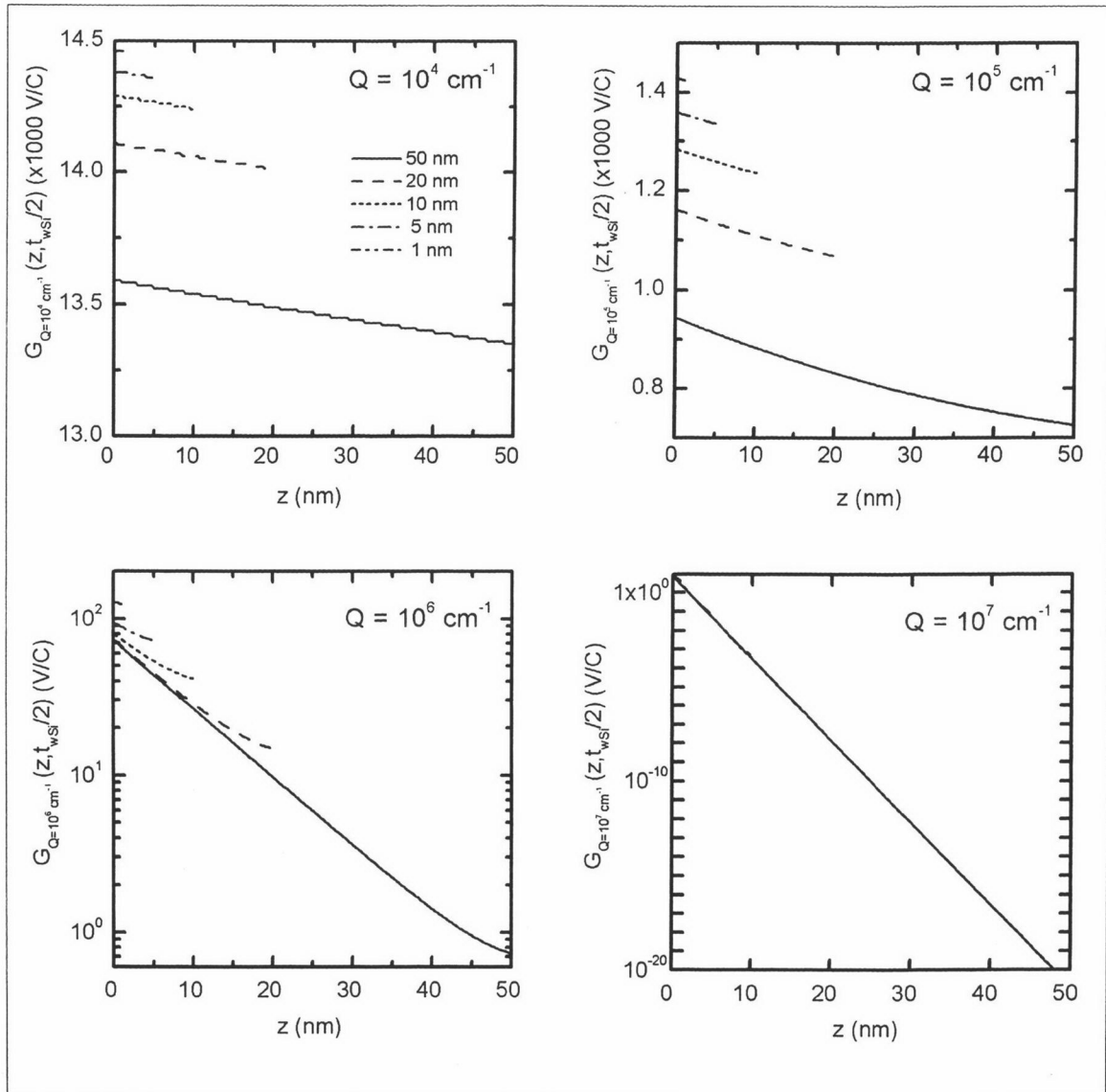
En este apartado estudiaremos la dependencia de las funciones de Green con la coordenada del espacio de momentos  $Q$ . En lo sucesivo, supondremos que la estructura es SOI convencional (una capa de silicio entre dos de dióxido de silicio) y que la carga externa está situada en la interfaz superior (en  $z = 0$ ).

En la figura 4.13 se muestran las funciones de Green obtenidas para muestras con diferentes espesores de la capa de silicio y diferentes valores de  $Q$ . Como se puede observar, los valores obtenidos para las funciones de Green dependen fuertemente de  $Q$ . Además, cuanto menor es el valor de  $Q$ , se obtiene que:

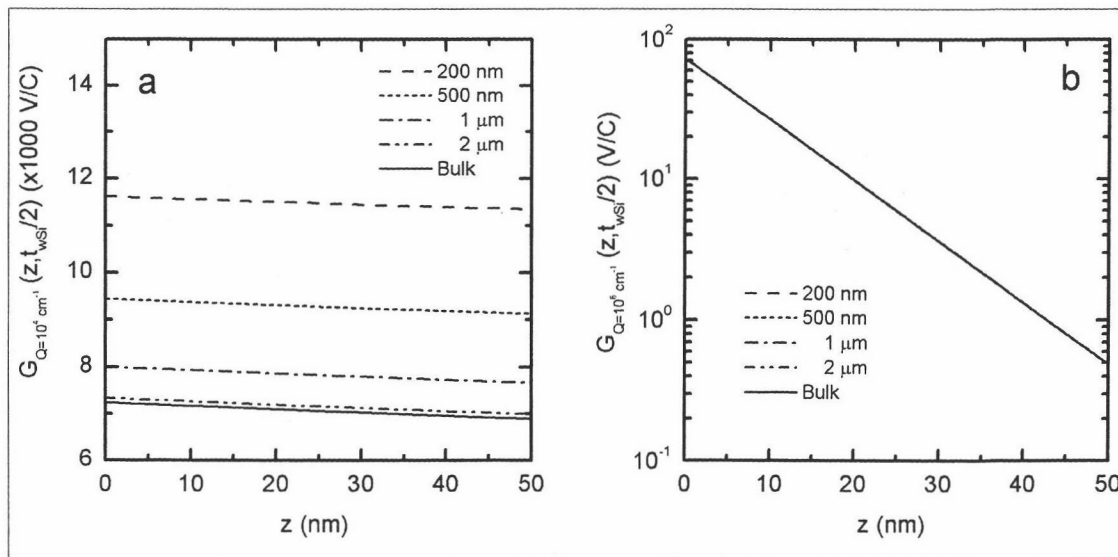
- las funciones de Green toman valores más altos,
- la dependencia con el espesor es mayor,
- la dependencia con la posición  $z$  es mucho más suave.

#### 4.3.2.3. Comparación con el modelo de una sola interfaz

Como ya se comentó cuando se consideraba la influencia de las constantes dieléctricas, las consecuencias fundamentales de aplicar el modelo de una sola interfaz es que hay menor perturbación y más débil dependencia con el espesor del silicio.



**Figura 4.13:** Funciones de Green para diferentes valores de  $Q$  con una estructura SOI (una capa de silicio entre dos capas de dióxido de silicio). El espesor de la lámina de silicio varía entre 50 y 1 nm: — 50 nm; --- 20 nm; - - - 10 nm; - . - . 5 nm; - - - - 1 nm. Las cargas están situadas en la interfaz óxido-silicio superior.



**Figura 4.14:** Función de Green para varios espesores de la capa de silicio en una estructura SOI. Se muestra también el caso *bulk* (sin óxido inferior). Se han considerado dos valores de  $Q$ : a)  $Q = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ; b)  $Q = 10^6 \text{ cm}^{-1}$ .

La figura 4.14 se ha representado para comprobar por encima de qué espesor de la capa de silicio se obtienen las mismas funciones de Green que en el caso de una sola interfaz. Como puede observarse, este valor es aproximadamente de  $2 \mu\text{m}$  si  $Q = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ , mientras que no hay dependencia con el espesor (por encima de  $50 \text{ nm}$ ) para  $Q = 10^6 \text{ cm}^{-1}$ .

### 4.3.3. Curvas de movilidad

En este apartado mostraremos el resultado de las simulaciones realizadas una vez incorporado el modelo de dispersión coulombiana expuesto anteriormente. En todas ellas se ha supuesto que la temperatura es igual a  $300 \text{ K}$  y que el substrato es silicio intrínseco.

En primer lugar se muestra, en la figura 4.15, una comparación con los resultados experimentales publicados en la referencia [EMC<sup>+</sup>01]. Como puede comprobarse, los resultados de la simulación son muy parecidos a las medidas experimentales en todo el rango de valores de la carga de inversión, lo cual apoya la validez de los modelos

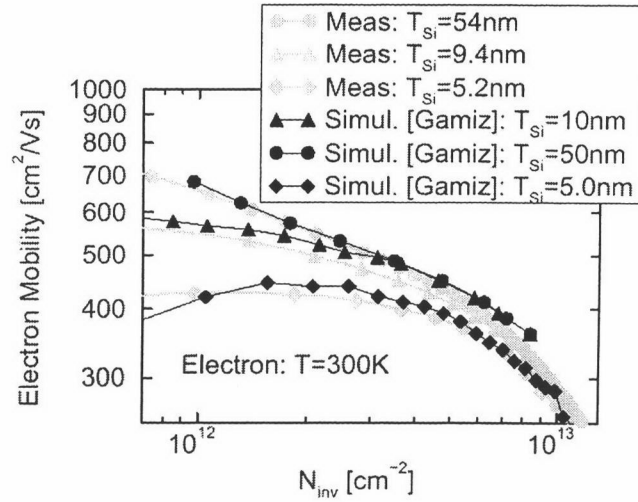


Figura 4.15: Comparación con resultados experimentales [EMC<sup>+</sup>01].

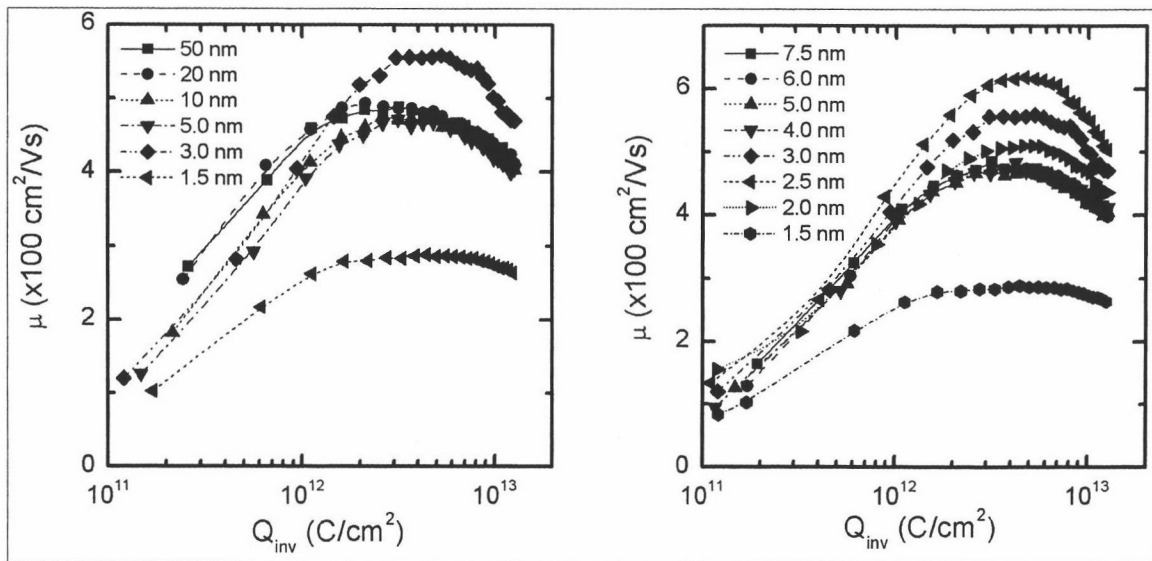
empleados para simular los tres mecanismos de dispersión considerados.

A continuación se ha querido evaluar la influencia del espesor de la capa de silicio,  $t_{wSi}$ . En la figura 4.16 se puede observar que cuanto menor es el espesor del silicio, menor es la movilidad con bajos campos eléctricos transversales, donde el mecanismo de dispersión coulombiana es el predominante [GP94] (se ha supuesto una densidad de carga superficial en las dos interfaces igual a  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ). Tanto la influencia del espesor como el rango de valores del campo transversal donde predomina la dispersión coulombiana se pueden verificar en la figura 4.17. En esta figura se ha aislado la movilidad por efecto de la dispersión coulombiana ( $\mu_c$ ) aplicando la regla de Matthiessen:

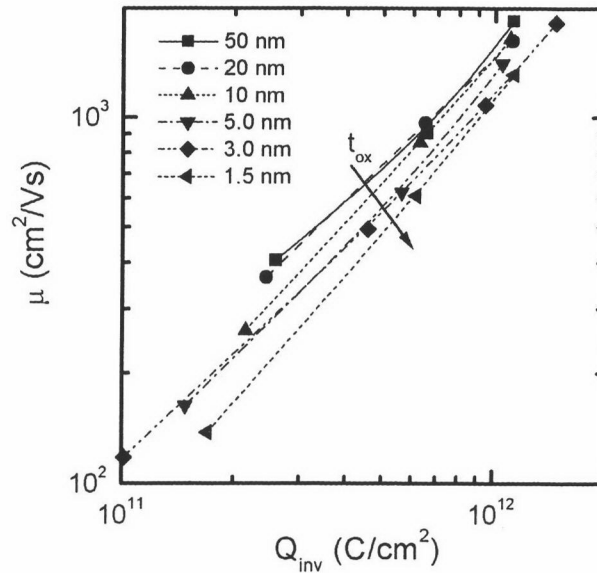
$$\mu_c^{-1} = \mu_T^{-1} - \mu_{f+r}^{-1} \quad (4.127)$$

Donde  $\mu_T$  es la movilidad incluyendo todos los mecanismos de dispersión y  $\mu_{f+r}$  es la movilidad obtenida al considerar sólo dispersión por fonones y por rugosidad superficial.

Por otro lado, en la figura 4.16 se observa también un cambio en la anterior tendencia para campos intermedios y altos, pues resulta que la movilidad es mayor en el caso con  $t_{wSi} = 3.0 \text{ nm}$ . Para apreciar mejor este fenómeno, en la gráfica de la derecha de la figura 4.16 hemos representado las curvas de movilidad para muestras



**Figura 4.16:** Curvas de movilidad obtenidas incluyendo los tres mecanismos de dispersión, con  $t_{wSi}$  como parámetro. Se ha supuesto una densidad de carga de  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en ambas interfaces. Los parámetros de la rugosidad son:  $\Delta = 0.1 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces [GRLV<sup>+</sup>99]. La curva de la derecha detalla los resultados para muestras con capas de silicio muy delgadas.



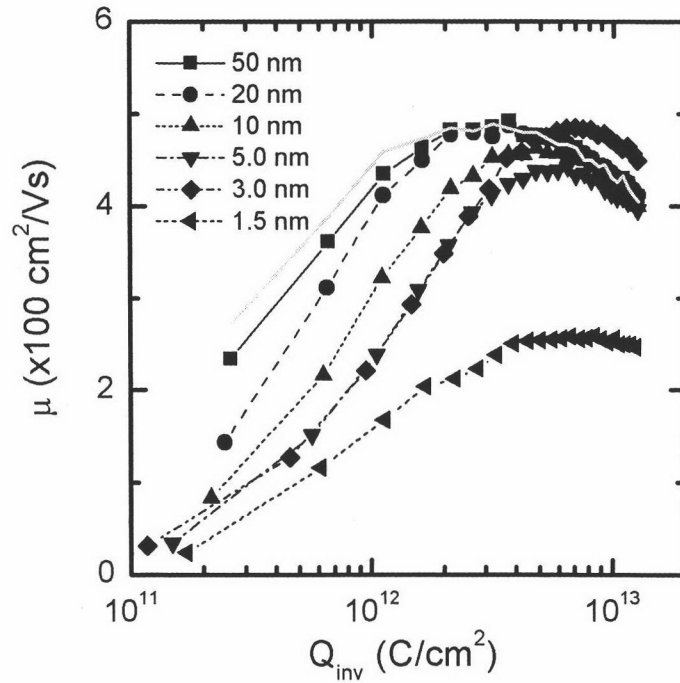
**Figura 4.17:** Movilidad coulombiana para las muestras de la figura 4.16 obtenida mediante la aplicación de la regla de Matthiessen.

con espesores de la capa de silicio inferiores a 7.5 nm. Como se observa, la máxima movilidad se obtiene con un espesor de 2.5 nm.

Como ya se comentó en la introducción de este capítulo, el aumento de la movilidad en las muestras con espesores entre 2 y 4 nm ha sido ya descrito [GRLV<sup>+</sup>01a], [SH99] y es una consecuencia de la dependencia contrapuesta con el espesor del silicio de dos de los fenómenos que afectan a la dispersión por fonones: la modulación de las subbandas y el mayor confinamiento de los electrones.

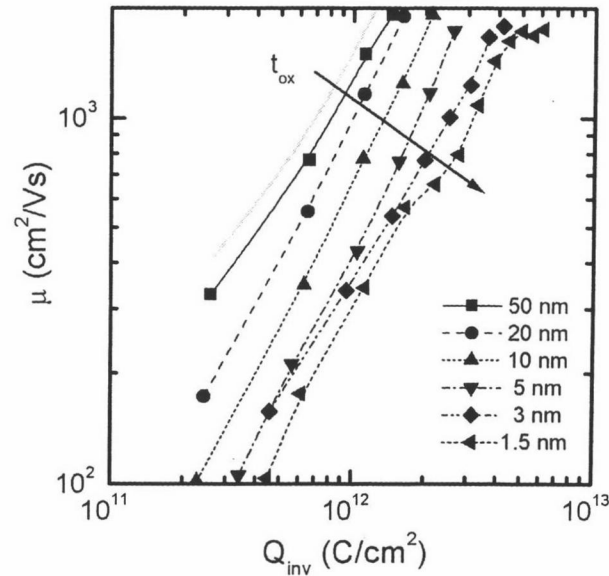
Por otra parte, en la figura 4.16 se comprueba que conforme se disminuye la capa de silicio sólo comienza a disminuir la movilidad por debajo de 20 nm. Es decir, el efecto de la interfaz inferior sobre la movilidad es sólo apreciable para espesores inferiores a este valor, aún cuando como comprobamos en el apartado anterior, el efecto sobre las funciones de Green sólo deja de ser apreciable para espesores por encima de  $2 \mu\text{m}$ .

Sin embargo, si situamos más carga en la interfaz inferior ( $50 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ), la dependencia de la movilidad con el espesor de la capa de silicio es mucho más fuerte



**Figura 4.18:** Curvas de movilidad obtenidas incluyendo los tres mecanismos de dispersión, con  $t_{w\text{Si}}$  como parámetro. Se ha supuesto una densidad de carga de  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en la interfaz superior y de  $50 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en la inferior. Los parámetros de la rugosidad son:  $\Delta = 0.1 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces [GRLV<sup>+</sup>99]. Se muestra como referencia el resultado correspondiente a  $t_{w\text{Si}} = 50 \text{ nm}$  de la figura 4.16.



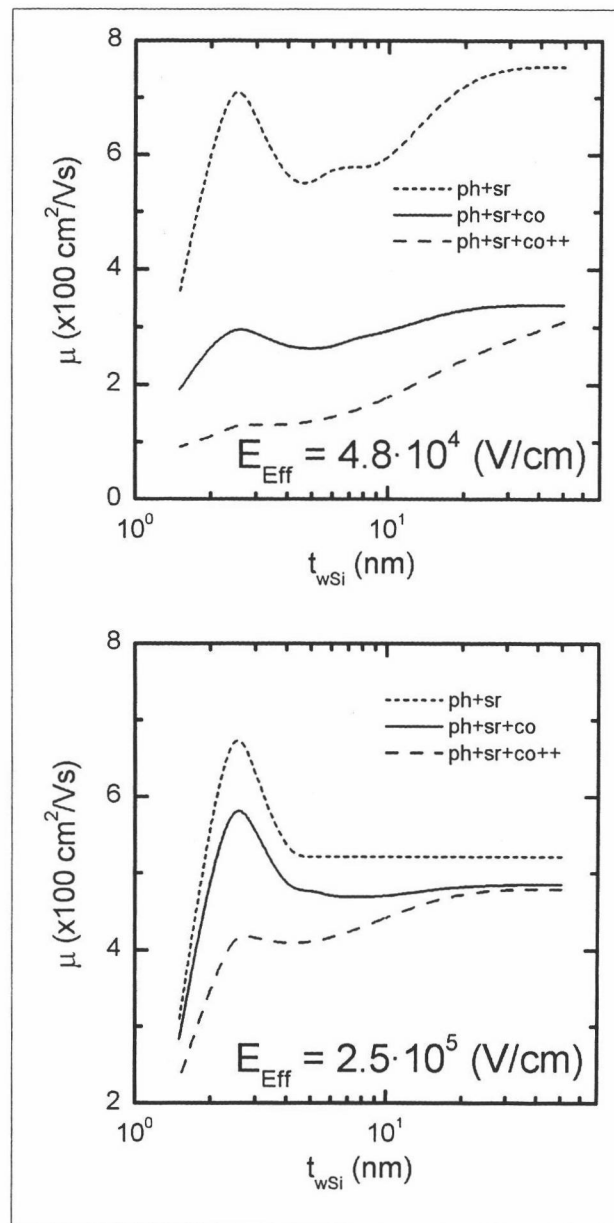


**Figura 4.19:** Movilidad coulombiana para las muestras de la figura 4.18 obtenida mediante la aplicación de la regla de Matthiessen.

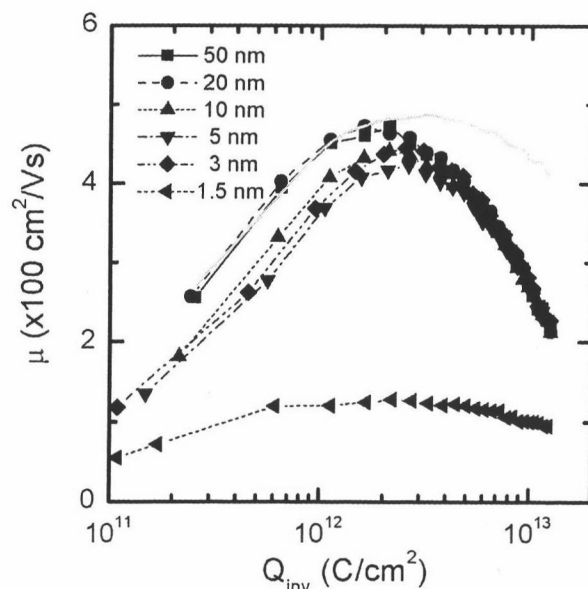
y separa más las curvas (figura 4.18). Además, el efecto anteriormente observado del aumento de la movilidad de los electrones con espesores de la capa de silicio en torno a 3 nm queda enmascarado por la mayor dispersión coulombiana, pues como se puede observar comparando las figuras 4.17 y 4.19, en este último caso la movilidad coulombiana es menor y puede influir con campos transversales intermedios.

Para observar mejor estos efectos, en la figura 4.20 se representa la movilidad en función del espesor de la capa de silicio para tres casos. En el primero, la movilidad se debe únicamente a dispersión por fonones y por rugosidad superficial. En el segundo, se ha añadido la dispersión coulombiana (con los mismos parámetros que en la figura 4.16). Finalmente, el tercer caso también contempla todos los mecanismos de dispersión pero la carga en la interfaz inferior es 10 veces mayor que en el caso anterior, por lo que la dispersión coulombiana es mayor.

Estas figuras resumen bastante claramente los efectos de la dispersión coulombiana sobre la movilidad comentados anteriormente. Por un lado, se observa que su influencia es mucho mayor cuanto menor es el campo transversal. No obstante, aunque



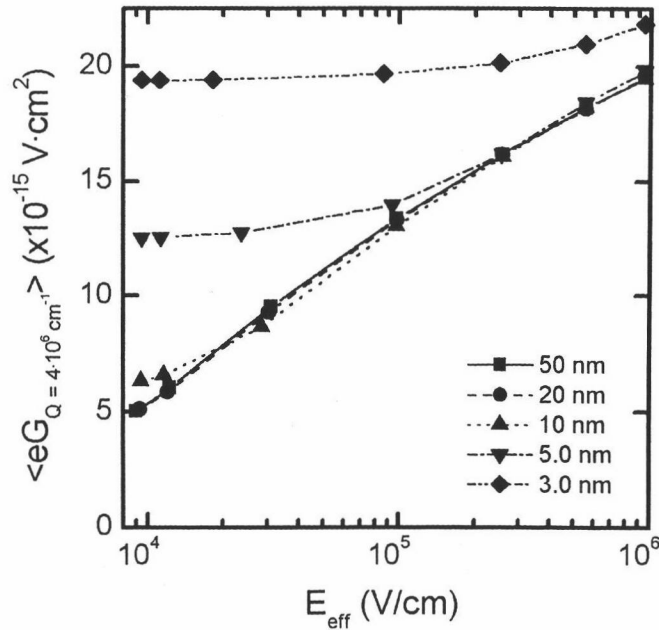
**Figura 4.20:** Dependencia de la movilidad con el espesor de la capa de silicio (para dos valores del campo efectivo). Se han considerado diferentes mecanismos de dispersión: - - - - - Fonones y rugosidad superficial (con los parámetros de la figura 4.16); — Fonones, rugosidad superficial y dispersión coulombiana (con los parámetros de la figura 4.16); - - - - - Fonones, rugosidad superficial y dispersión coulombiana con más carga en la interfaz inferior (los mismos parámetros que en la figura 4.18).



**Figura 4.21:** Curvas de movilidad obtenidas incluyendo los tres mecanismos de dispersión, con  $t_{wSi}$  como parámetro. Se ha supuesto una densidad de carga de  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en ambas interfaces y se ha aumentado la rugosidad respecto la de la figura 4.16. Los parámetros de la rugosidad son:  $\Delta = 0.25 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces [GRLV<sup>+</sup>99]. Se muestra como referencia el resultado correspondiente a  $t_{wSi} = 50 \text{ nm}$  de la figura 4.16.

menor, no es despreciable tampoco su efecto con campos efectivos intermedios. Por otro lado, el aumento de la movilidad en el rango 5-2 nm, que cabría esperar si la dispersión se debiese sólo a los fonones, queda muy debilitado a causa de la dispersión coulombiana.

Finalmente, debemos señalar que, lógicamente, también una menor calidad de las interfaces (en cuanto a rugosidad superficial) conlleva una disminución de la movilidad y la eliminación del aumento de la movilidad en el rango 5-2 nm. Para comprobarlo, en la figura 4.21 se representan las curvas de movilidad correspondientes a los mismos dispositivos que en la figura 4.16, pero con una mayor rugosidad superficial ( $\Delta = 0.25 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces.  $\Delta$  y  $L$  son los parámetros del modelo de rugosidad empleado [GRLV<sup>+</sup>99]).



**Figura 4.22:** Valor esperado de la función de Green en el estado fundamental 0 ( $\int \xi_0(z) G_Q(z, 0) \xi_0(z) dz$ ) con las cargas situadas en  $z_1 = 0$  (interfaz superior). Se indica el espesor de la capa de silicio.

#### 4.3.4. Apantallamiento

En este apartado analizaremos con más detalle el efecto de las cargas situadas en las interfaces silicio-dióxido de silicio sobre la limitación de la movilidad por dispersión coulombiana. Estudiaremos la dependencia de este fenómeno con el espesor de la capa de silicio y analizaremos la atenuación del efecto de las cargas gracias al apantallamiento de éstas por la carga móvil de la capa de inversión.

Como se demostró cuando se expuso el modelo teórico, se puede descomponer el efecto de todas las cargas presentes en la estructura. Por tanto, podemos estudiar el efecto de las cargas presentes en las dos interfaces por separado. Comenzaremos con las cargas situadas en la superficie de separación del sustrato con el óxido de puerta (interfaz superior).

Aunque ya hemos estudiado las funciones de Green previamente, se representa aquí su valor esperado en la subbanda fundamental 0 (Fig. 4.22). El valor esperado

pondera las funciones de Green mediante la función de onda. Así se evalúa el potencial donde realmente es importante (donde están los electrones).

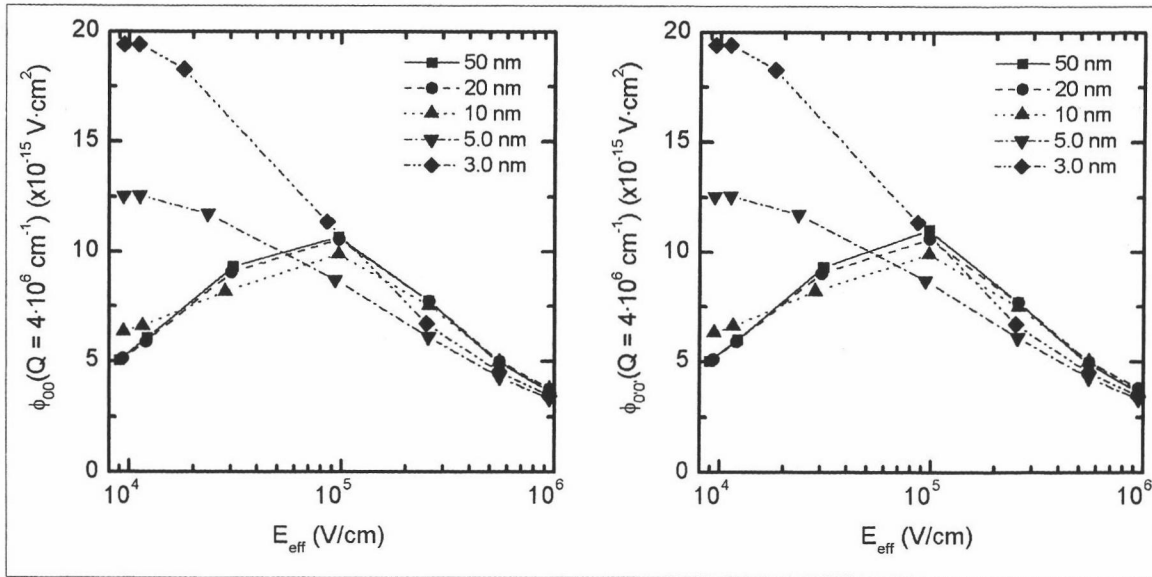
Este parámetro nos da una medida del potencial creado por la presencia de las cargas fijas en la interfaz y sería igual a esta magnitud si no fuera por el apantallamiento de las cargas móviles. Ha sido calculado para un valor de  $Q$  igual a  $4 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , pues éste es el momento que se corresponde con la energía térmica de los electrones de un gas bidimensional ( $kT$ ) a 300 K.

Como puede observarse, para las muestras con substratos más gruesos (por encima de 10 nm), el valor esperado del potencial sin apantallar depende fuertemente del campo eléctrico transversal. Cuanto mayor sea el campo, mayor será el confinamiento de los electrones y, por tanto, más próximos estarán a la interfaz en donde se encuentran las cargas. Sin embargo, con campos menores, la función de onda  $\xi(z)$  se extiende más, alejándose de la interfaz.

Con los substratos más delgados, la dependencia con el campo eléctrico es mucho más débil, pues los electrones están en cualquier caso muy confinados y, aproximadamente, a la misma distancia de la interfaz independientemente del campo transversal aplicado. Por ello, como también se puede apreciar en la figura 4.22, el valor esperado del potencial no apantallado es mayor cuanto menor sea la capa de silicio, por lo que cabe esperar que la movilidad siga la tendencia contraria (como se ha comprobado en las figuras 4.16 a 4.21).

Por otra parte, en la figura 4.23 se muestran los elementos de matriz que controlan las transiciones por efecto coulombiano, dentro de la subbanda fundamental 0 y que se corresponden con el valor esperado del potencial creado por las cargas de la interfaz superior, teniendo en cuenta el apantallamiento ( $\phi'(Q, z, 0)$ , solución de la ecuación (4.109)).

Como se puede apreciar, para bajos campos transversales, las curvas correspondientes a las dos capas más delgadas de silicio están notablemente por encima de las correspondientes a las más gruesas, como cabía esperar a la vista de los resultados mostrados en la figura 4.22, pues no hay mucha carga en inversión que apantalle a las cargas perturbación. De hecho, ambas figuras son muy parecidas en este rango de



**Figura 4.23:** Elementos de matriz para las transiciones por dispersión coulombiana en la subbanda fundamental 0 ( $\phi_{00}(Q)$ ) y en la subbanda 0' ( $\phi_{0'0'}(Q)$ ). Las cargas están situadas en  $z_1 = 0$  (interfaz superior). Se indica el espesor de la capa de silicio.

valores del campo transversal.

Sin embargo, al aumentar el campo aumenta la carga en inversión y el valor esperado del potencial deja de parecerse al valor esperado de las funciones de Green.

Además, se puede observar en los casos con los substratos más gruesos una doble tendencia. Conforme aumenta el campo eléctrico transversal, el elemento de matriz  $\phi_{00}(Q = 4 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1})$  primero crece y posteriormente empieza a disminuir su valor. Esto se debe a que al aumentar el campo transversal acercamos la función de onda a la interfaz donde se sitúan las cargas, por lo que aumenta la perturbación que éstas producen sobre los electrones (como se observa en la figura 4.22). Sin embargo, aumenta también la carga en inversión que apantalla a las cargas presentes en la interfaz, por lo que se atenúa su efecto.

Como vemos en ambas figuras, la influencia de la carga situada en la interfaz superior no depende apenas del espesor cuando el campo transversal es alto.

Para obtener una idea de la importancia del apantallamiento, hemos definido un coeficiente de apantallamiento (para cada subbanda) dado por el cociente de los valo-

res esperados del potencial perturbación realmente producido como consecuencia de las cargas ( $\phi'(Q, z, z_1)$ ) y del que habría si no hubiese apantallamiento ( $e \cdot G_Q(z, z_1)$ ):

$$\alpha_i = \frac{\int \xi_i^*(z) \phi'(Q, z, z_1) \xi_i(z) dz}{e \int \xi_i^*(z) G_Q(z, z_1) \xi_i(z) dz}. \quad (4.128)$$

El subíndice  $i$  representa la subbanda para la cual se calcula este parámetro. El valor de  $\alpha_i$  debe estar dentro del intervalo  $[0, 1]$ . Cuanto más próximo a 0 sea su valor, más efectivo será el apantallamiento de las cargas por los electrones de la capa de inversión. Por otro lado, un valor cercano a 1 indica que los valores de  $\phi'(Q, z, z_1)$  y  $e \cdot G_Q(z, z_1)$  son muy parecidos porque el apantallamiento es poco importante.

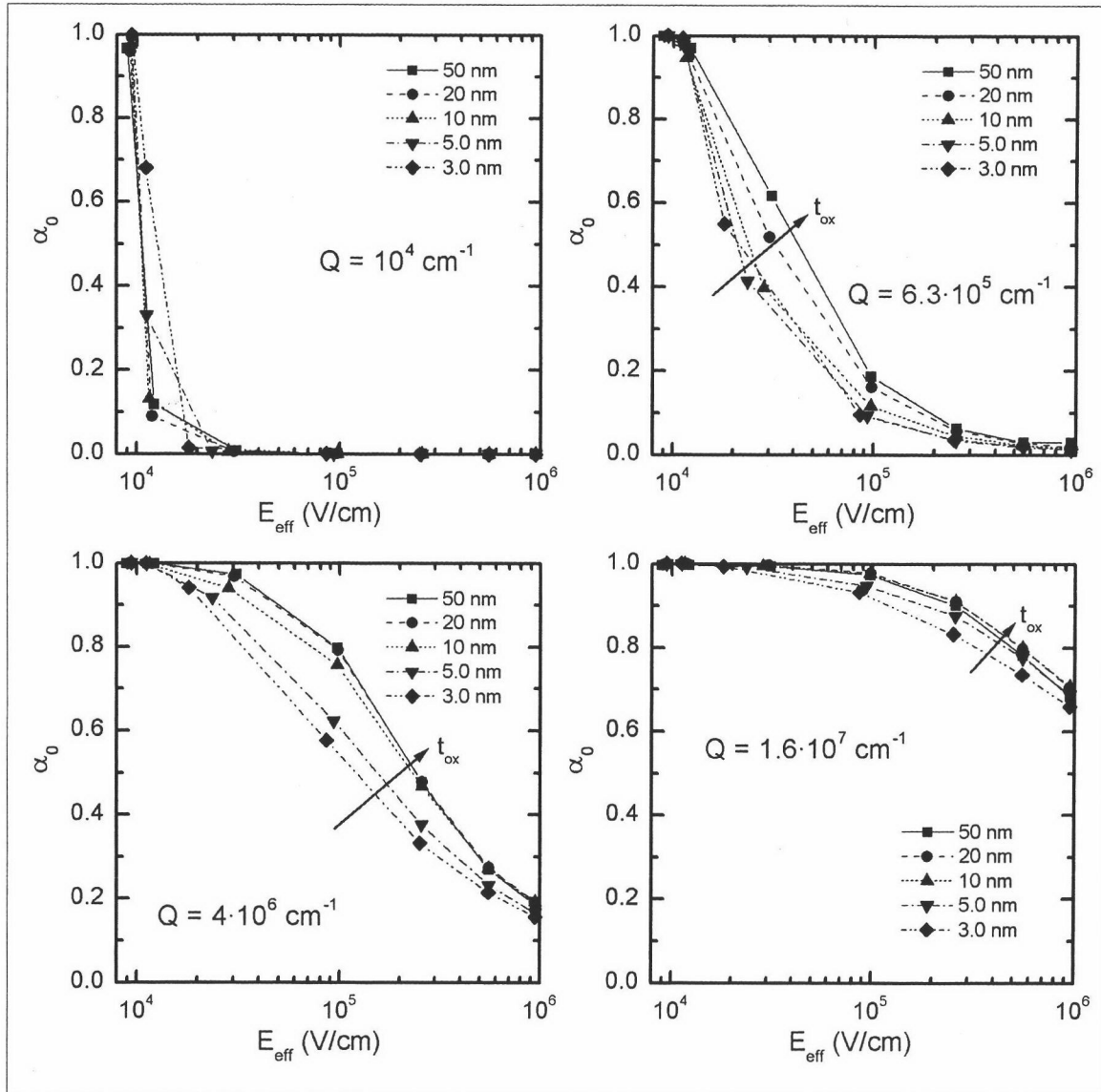
En la figura 4.24 se representa este coeficiente de apantallamiento, en función del campo eléctrico transversal, para cuatro valores del momento  $Q$ . Como se ha deducido anteriormente, el apantallamiento es más efectivo cuanto mayor es el campo transversal, pues mayor es entonces la carga en inversión.

Como puede apreciarse, cuanto mayor es el momento  $Q$ , menos efectivo es el apantallamiento a igualdad de campo eléctrico transversal. Se puede observar también que, en general, para un mismo valor de  $Q$  es más efectivo el apantallamiento cuanto menor es el espesor del sustrato.

Finalmente, como se puede apreciar en la figura 4.23, los elementos de matriz para la subbanda  $0'$  son prácticamente iguales que los de la subbanda fundamental, por lo que los coeficientes de apantallamiento  $\alpha_0$  y  $\alpha_{0'}$  también coincidirán. Esto se ha comprobado para varios valores de  $Q$ , pero se ha omitido la figura correspondiente para evitar repetición con la figura 4.24.

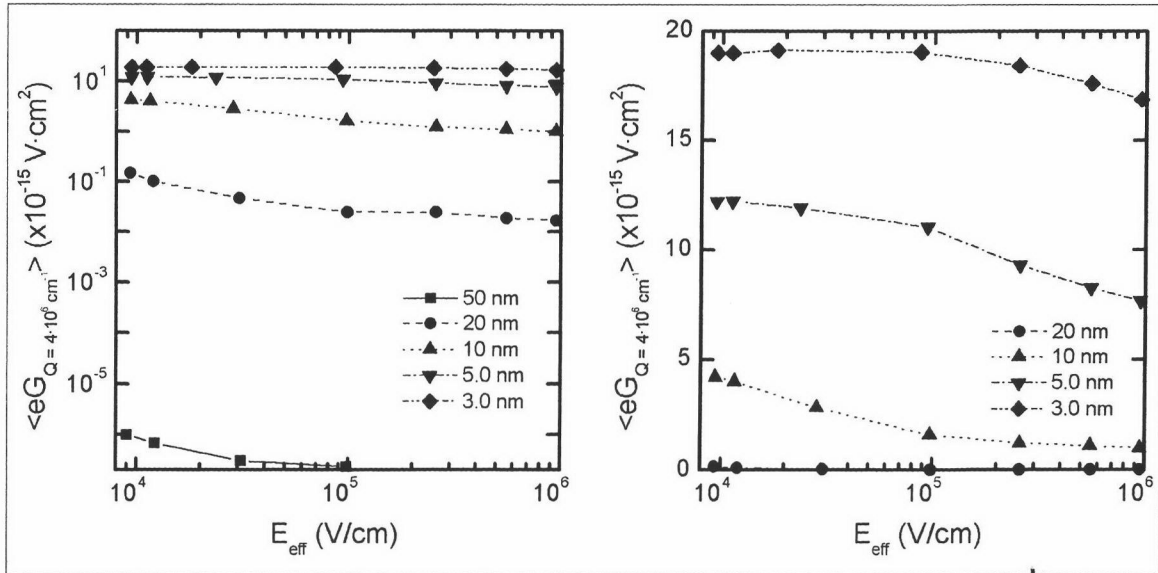
A continuación, estudiaremos el efecto producido por las cargas situadas en la interfaz inferior. Respecto al valor esperado de la función de Green, en la figura 4.25 se puede observar que la dependencia con el espesor del sustrato es mucho más fuerte que en el caso en el que la carga se sitúa en la interfaz superior (ver figura 4.22). Este resultado es lógico, puesto que el espesor de la capa de silicio en este caso influye directamente en la distancia entre las cargas perturbación y los electrones móviles de la capa de inversión.

Además, se aprecia que la tendencia al aumentar el campo eléctrico transversal es opuesta a la que se produce con la carga en la interfaz superior, pues disminuye



**Figura 4.24:** Parámetro de apantallamiento  $\alpha_0$  (ver definición en el texto) en función del campo eléctrico transversal, para cuatro valores de  $Q$ . El espesor de la capa de silicio se indica en la figura. Carga situada en la interfaz superior.



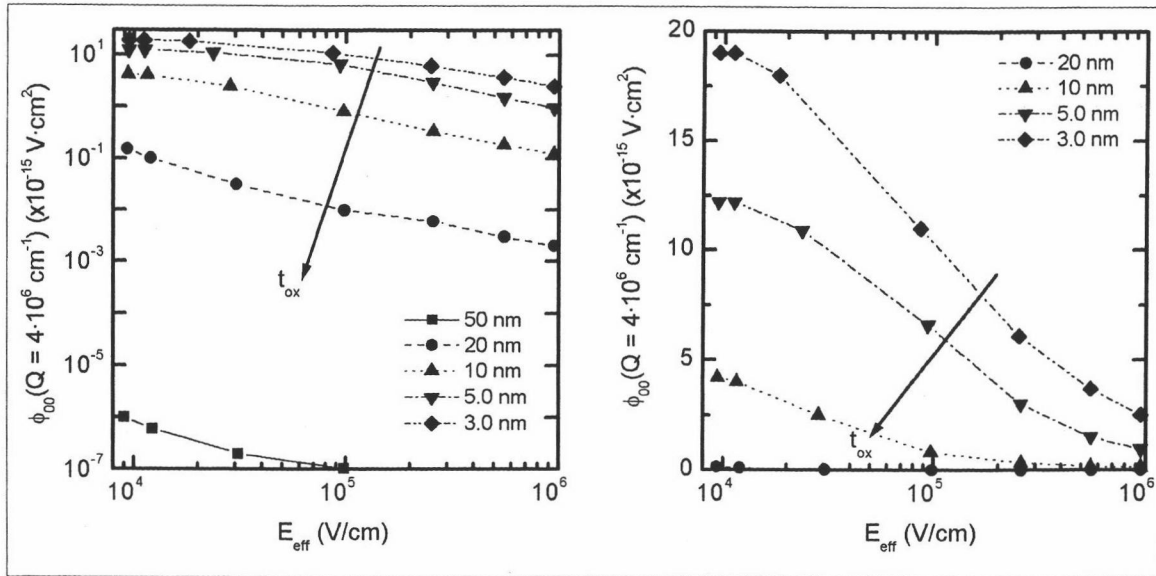


**Figura 4.25:** Valor esperado de la función de Green en la subbanda fundamental 0 ( $\int \xi_0(z)G_Q(z, L_2)\xi_0(z)dz$ ) con las cargas situadas en  $z_1 = L_2$  (interfaz inferior). Se indica el espesor de la capa de silicio.

(ligeramente) el potencial sin apantallamiento. Esto se debe a que al aumentar el campo, los electrones están más confinados (más alejados de la interfaz inferior y más próximos a la superior).

La figura 4.26 muestra los elementos de matriz, para las transiciones dentro de la subbanda 0. Se puede observar que para las muestras con substratos más gruesos las transiciones por dispersión coulombiana debida a las cargas situadas en la interfaz inferior tienen una probabilidad muy baja.

Sin embargo, en los casos con substratos más delgados los elementos de matriz son muy parecidos a los obtenidos con la carga en la interfaz superior (figura 4.23), como es lógico. Esto sucede también con los coeficientes de apantallamiento, como se muestra en la figura 4.27.



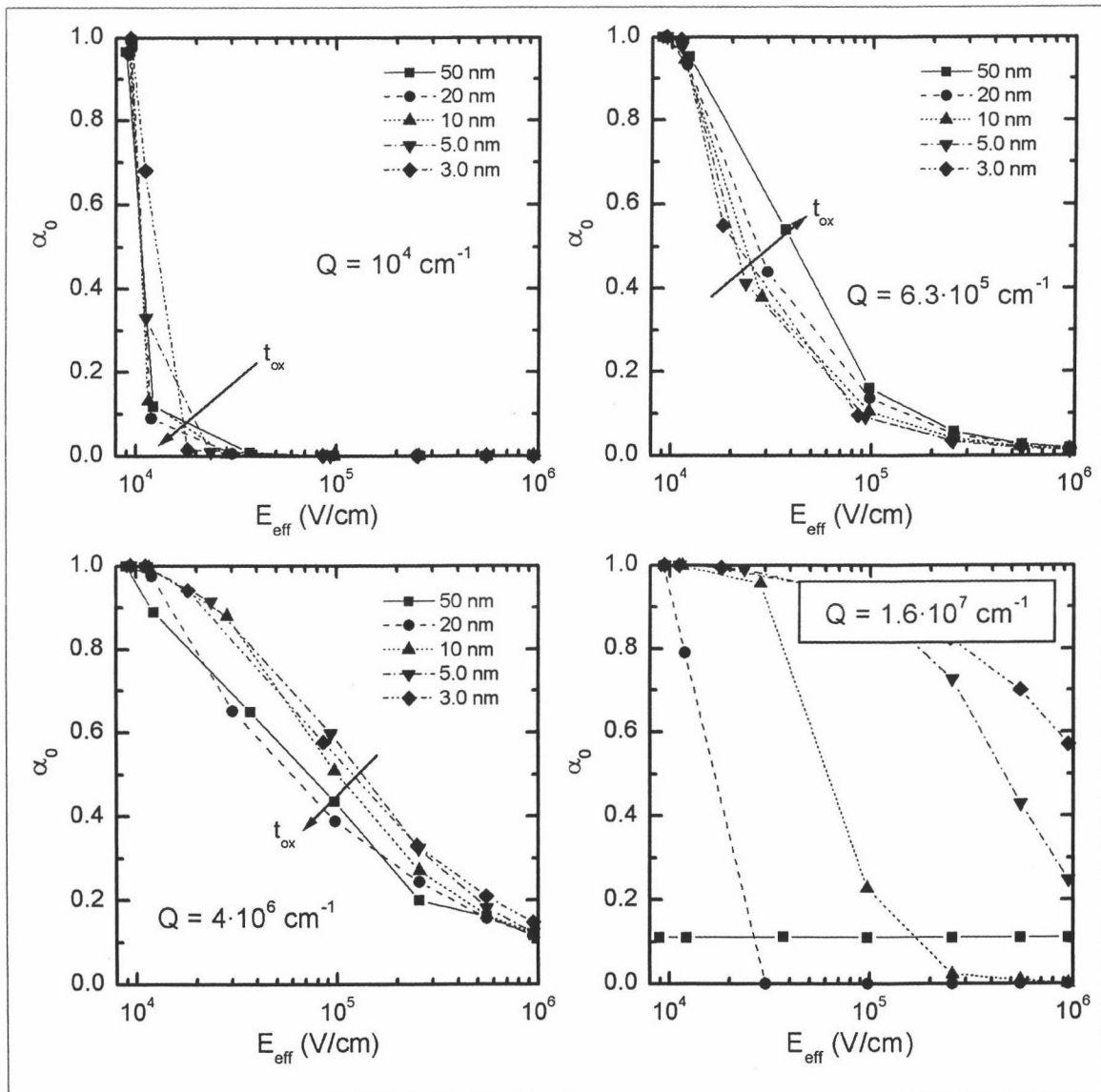
**Figura 4.26:** Elementos de matriz para las transiciones por dispersión coulombiana en la subbanda fundamental 0 ( $\phi_{00}(Q)$ ). Las cargas están situadas en  $z_1 = L_2$  (interfaz inferior). Se indica el espesor de la capa de silicio.

### 4.3.5. Efecto de la temperatura

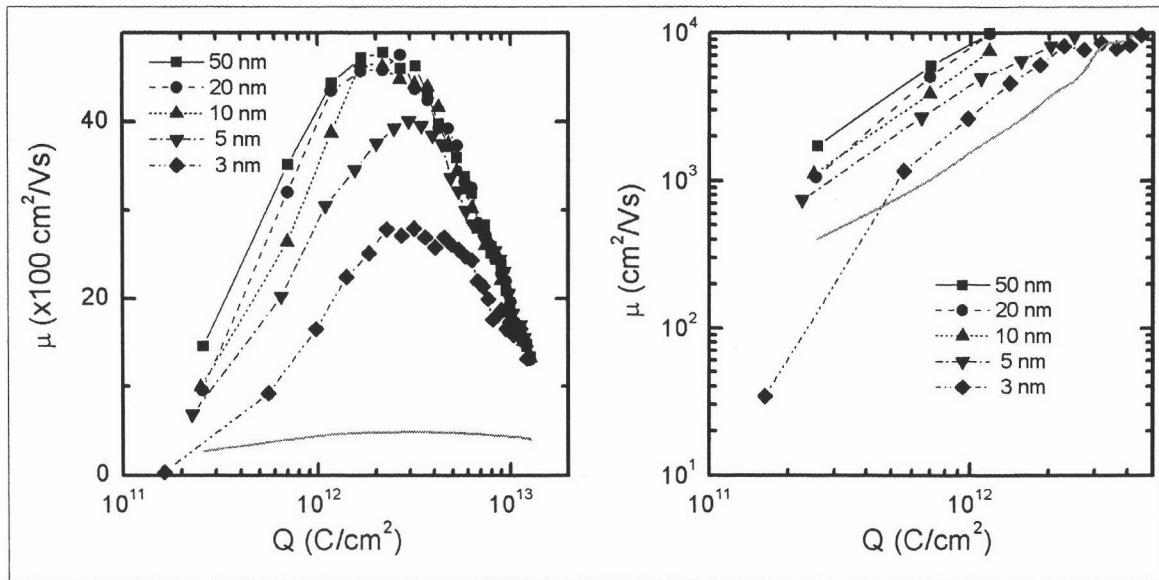
En los apartados anteriores, todas las simulaciones han sido realizadas suponiendo una temperatura igual a 300 K. A continuación vamos a mostrar los resultados obtenidos suponiendo un valor de 77 K con el fin de estudiar la influencia de la temperatura sobre la dispersión coulombiana y sobre la movilidad en general.

Las figuras 4.28 y 4.29 muestran las curvas de movilidad obtenidas para los mismos dispositivos que en las figuras 4.16 y 4.18, respectivamente, pero con la temperatura igual a 77 K. Como referencia se muestran las correspondientes curvas de movilidad para las muestras con  $t_{wSi} = 50$  nm y  $T = 300$  K. Se puede observar que la movilidad total es notablemente superior al reducir la temperatura. Este aumento de la movilidad es consecuencia de la disminución tanto de la dispersión coulombiana como de la causada por los fonones. Analicemos a continuación el primero de estos efectos, que es el más importante con bajas cargas de inversión.

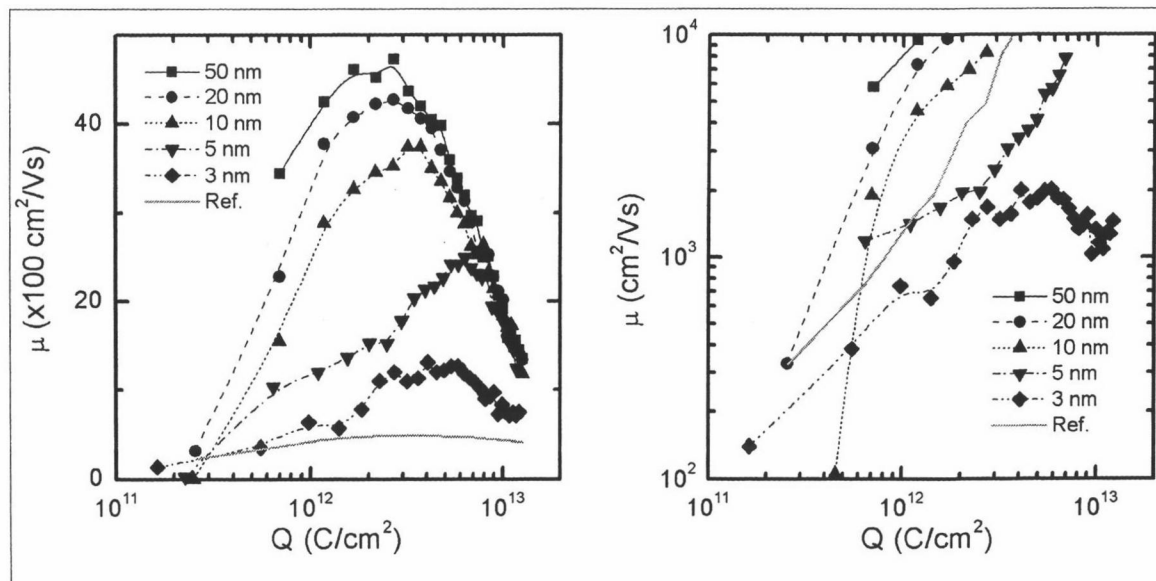
La disminución de la dispersión coulombiana se puede observar también en las



**Figura 4.27:** Parámetro de apantallamiento  $\alpha_0$  (ver definición en el texto) en función del campo eléctrico transversal, para cuatro valores de  $Q$ . El espesor de la capa de silico se indica en la figura. Carga situada en la interfaz inferior.



**Figura 4.28:** Curvas de movilidad para  $T = 77 \text{ K}$ . Han sido obtenidas incluyendo los tres mecanismos de dispersión, con  $t_{w\text{Si}}$  como parámetro. Se ha supuesto una densidad de carga de  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en ambas interfaces. Los parámetros de la rugosidad son:  $\Delta = 0.1 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces [GRLV<sup>+</sup>99]. La curva de la derecha muestra la movilidad coulombiana, obtenida mediante la regla de Matthiessen. Como referencia se muestran los resultados obtenidos con  $T = 300 \text{ K}$  y  $t_{w\text{Si}} = 50 \text{ nm}$  (fig. 4.16).



**Figura 4.29:** Curvas de movilidad para  $T = 77$  K. Han sido obtenidas incluyendo los tres mecanismos de dispersión, con  $t_{wSi}$  como parámetro. Se ha supuesto una densidad de carga de  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en la interfaz superior y de  $50 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  en la inferior. Los parámetros de la rugosidad son:  $\Delta = 0.1 \text{ nm}$ ,  $L = 1.5 \text{ nm}$  para ambas interfaces [GRLV<sup>+</sup>99]. La curva de la derecha muestra la movilidad coulombiana, obtenida mediante la regla de Matthiessen. Como referencia se muestran los resultados obtenidos con  $T = 300 \text{ K}$  y  $t_{wSi} = 50 \text{ nm}$  (fig. 4.18).

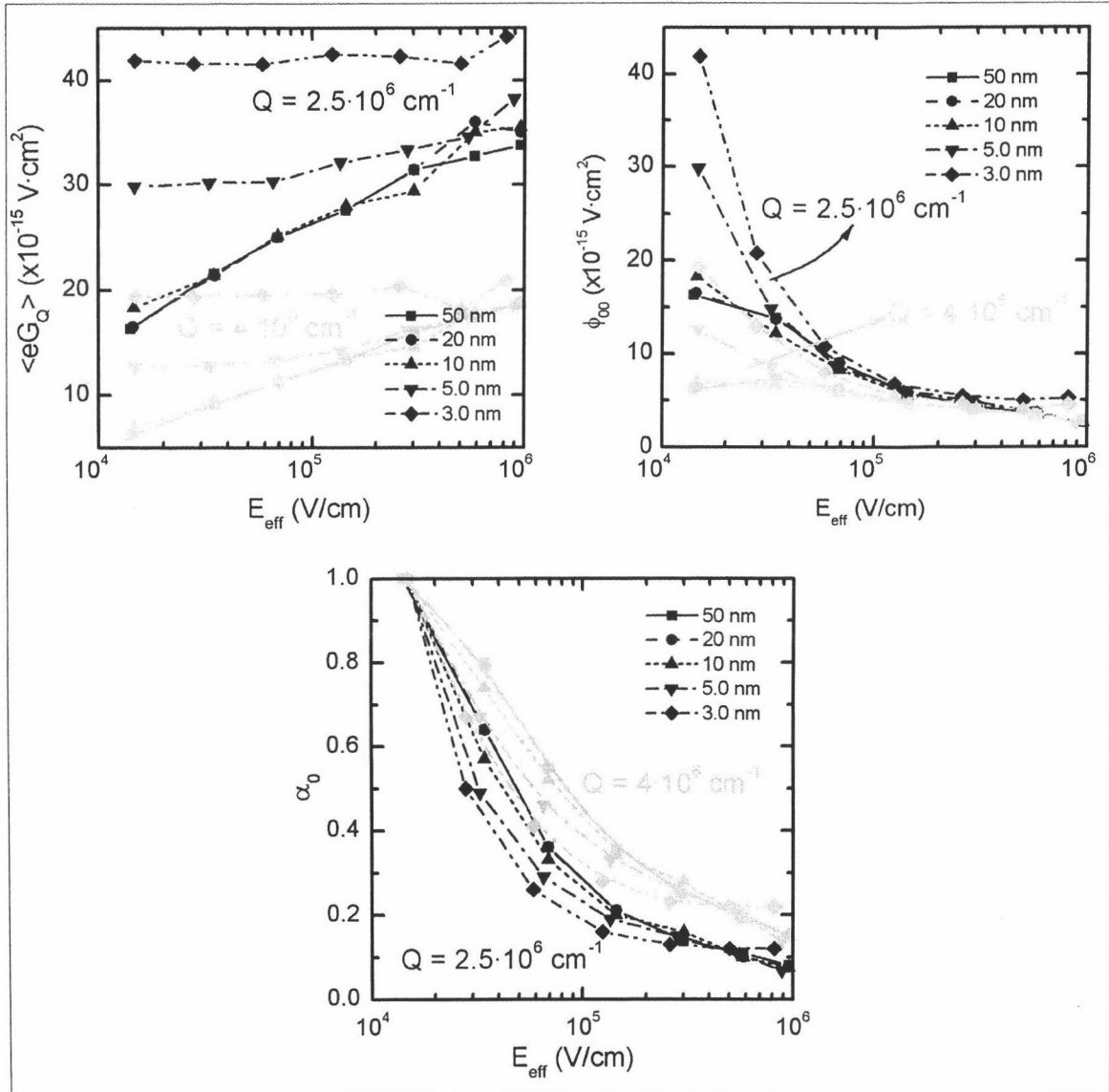
gráficas en las que se ha aislado la movilidad coulombiana mediante la aplicación de la regla de Matthiessen.

Puesto que el potencial creado por las cargas perturbación (dado por las correspondientes funciones de Green) en ausencia de apantallamiento es independiente de la temperatura, una variación en la dispersión coulombiana se puede deber solamente a las siguientes dos causas:

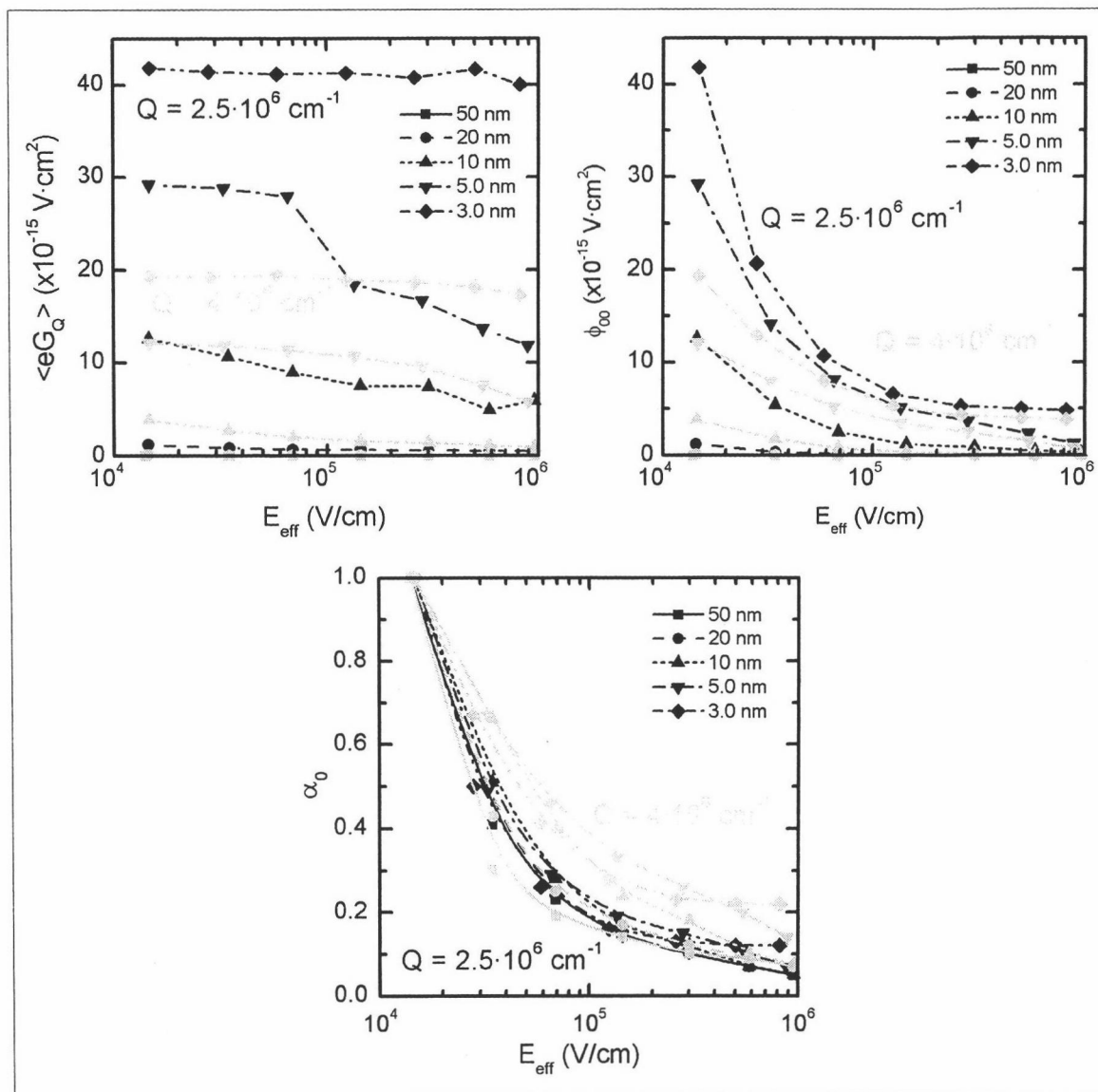
- la disminución de la temperatura conlleva una mayor cercanía de los electrones a la interfaz superior [GLVJT<sup>+</sup>94]. En efecto, al cambiar la temperatura cambia la población relativa de las subbandas, de forma que conforme se aumenta la temperatura las subbandas con más energía comienzan a poblarse a costa de la subbanda fundamental. Por consiguiente, las consecuencias de este fenómeno serían un aumento de la dispersión coulombiana (disminución de la movilidad coulombiana) al disminuir la temperatura.
- La diferente distribución de la carga provoca que el apantallamiento no sea igual de efectivo en todo el rango de temperaturas.

A su vez, la dependencia del efecto producido por el apantallamiento con la temperatura puede estar causada por dos hechos. Por un lado, cabe esperar que diferentes distribuciones de la carga en inversión provoquen diferente apantallamiento. Por otra parte, el apantallamiento no es igual de efectivo para todos los valores de  $Q$  (como se ha mostrado, para  $T = 300$  K, en las figuras 4.24 y 4.27) y al variar la temperatura es diferente el valor de  $Q$  medio intercambiado en las transiciones puesto que cambia la energía cinética media de los electrones.

Para ver la importancia de estos efectos, se ha representado el valor esperado de la función de Green, el elemento de matriz para las transiciones dentro de la subbanda fundamental y el factor de apantallamiento para esta subbanda (figuras 4.30 y 4.31). Como puede comprobarse en estas figuras, una disminución del valor de  $Q$  (relacionado con la energía media y con la temperatura) aumenta el valor esperado de las funciones de Green, pero también la eficacia del apantallamiento (además, para un mismo valor de  $Q$ , el apantallamiento es más efectivo a 77 K que a 300 K). Ambos



**Figura 4.30:** Valor esperado de la función de Green en la subbanda 0 ( $\langle eG_Q \rangle$ ), elementos de matriz para las transiciones dentro de esta subbanda ( $\phi_{00}$ ) y el correspondiente coeficiente de apantallamiento ( $\alpha_0$ ). Temperatura = 77 K. Las cargas están situadas en  $z_1 = 0$  (interfaz superior). Se indican  $Q$  y el espesor de la capa de silicio.



**Figura 4.31:** Valor esperado de la función de Green en la subbanda 0 ( $\langle eG_Q \rangle$ ), elementos de matriz para las transiciones dentro de esta subbanda ( $\phi_{00}$ ) y el correspondiente coeficiente de apantallamiento ( $\alpha_0$ ). Temperatura = 77 K. Las cargas están situadas en  $z_1 = L_2$  (interfaz inferior). Se indican  $Q$  y el espesor de la capa de silicio.



efectos se cancelan (excepto con bajos campos transversales), por lo que se obtienen valores muy parecidos de los elementos de matriz con los dos valores de  $Q$  mostrados.

Por tanto, el hecho de que las transiciones por dispersión culombiana sucedan con un valor de  $Q$  un poco más bajo provoca una mayor probabilidad de dispersión con bajos campos transversales, pero no afecta a partir de, aproximadamente,  $8 \times 10^4$  V/cm.

En cualquier caso, este efecto es contrario al observado en la mayoría de las muestras representadas en las figuras 4.28 y 4.29. Por consiguiente, no explica el aumento de la movilidad. Además, si comparamos los elementos de matriz con los obtenidos con  $T = 300$  K, vemos que son sólo ligeramente inferiores.

Por consiguiente, la temperatura apenas afecta a los elementos de matriz que determinan la dispersión culombiana. El aumento de la movilidad debe achacarse entonces a un mayor efecto de la modulación de las subbandas [TKT97]: al ser menor la temperatura, la separación de las subbandas es más efectiva porque los electrones tienden a concentrarse más en la subbanda fundamental. La mayor población relativa de la subbanda fundamental tiene dos consecuencias beneficiosas para la movilidad: por un lado, disminuye el número de estados libres finales a los cuales el electrón puede ir tras dispersarse, por lo que disminuye la probabilidad de dispersión. Por otro, los electrones tienen, por término medio, menor masa efectiva para la conducción.

## 4.4. Conclusiones

En este capítulo se ha desarrollado un modelo para el estudio de las transiciones por dispersión culombiana en estructuras SOI (o, en general, en heteroestructuras con tres capas de diferente material). Este modelo permite calcular el potencial de perturbación creado por una densidad arbitraria de carga externa e incluye, por tanto, las cargas imagen debidas a la presencia de las dos interfaces y el apantallamiento de la carga externa por la carga del canal de inversión.

Tras presentar el modelo, hemos demostrado la necesidad de uso para el cálculo de la movilidad en estructuras SOI con espesores de la capa de silicio por debajo de 50 nm, incluso con campos transversales intermedios (del orden de  $10^5$  V/cm).

Lógicamente, cuanto menor sea el espesor de la capa de silicio, mayor es la necesidad de emplear el nuevo modelo y mayores son las diferencias respecto del modelo que solo considera una sola interfaz.

Seguidamente, se han analizado las funciones de Green correspondientes a la ecuación diferencial que nos proporciona el potencial de perturbación. Se han extraído las siguientes conclusiones:

- Con dióxido de silicio como aislante, la perturbación introducida por las cargas externas es mayor cuanto menor es el espesor de la capa de silicio.
- La movilidad limitada por dispersión coulombiana sería mucho mayor si se empleasen aislantes de alta constante dieléctrica. Y lo que es más importante, la tendencia al disminuir el espesor de la capa de silicio es la opuesta a la observada usando dióxido de silicio, pues la movilidad aumenta.

Posteriormente, se han representado las curvas de movilidad para varias muestras, con diferentes espesores de la capa de silicio y de la densidad de carga en las interfaces. El resultado más importante de este apartado es que la dispersión coulombiana puede atenuar bastante (incluso hasta anularlo) el incremento de la movilidad debido a la disminución de la dispersión por fonones, que se sabe que ocurre con espesores de la capa de silicio en el rango 5-2 nm.

También se ha analizado el papel del apantallamiento de la carga externa por la carga móvil. Se ha comprobado que el apantallamiento modifica el potencial dado por las funciones de Green y hace que la dispersión coulombiana decrezca al aumentar el campo eléctrico transversal (y, por tanto, la carga en inversión). Se ha comprobado que, en general, el apantallamiento es más efectivo cuanto menor es el espesor de la capa de silicio.

Finalmente, se ha analizado la dependencia de la dispersión coulombiana con la temperatura. Se ha mostrado que los elementos de matriz son ligeramente inferiores con  $T = 77$  K que con  $T = 300$  K (excepto con muy bajos campos transversales, en donde los elementos de matriz son notablemente superiores). La razón de que sean muy parecidos es fruto de la compensación de dos efectos: por un lado, las funciones

de Green correspondientes a los valores de  $Q$  más significativos en las transiciones con  $T = 77$  K toman valores más altos que las correspondientes a las transiciones con  $T = 300$  K. Por otro lado, el apantallamiento es más efectivo con bajas temperaturas por estar los electrones más concentrados.

No obstante, hay un aumento muy significativo de la movilidad que no puede ser atribuido a esta pequeña disminución del valor de los elementos de matriz para la dispersión coulombiana. En realidad, el aumento de la movilidad es la acumulación de dos hechos, el anterior y la concentración de los electrones en la subbanda fundamental al disminuir la temperatura. Al estar los electrones con energías más próximas entre sí y ser la dispersión coulombiana un mecanismo elástico e intersubbanda (fundamentalmente), quedan menos estados libres para efectuar la transición. Además, la masa efectiva para la conducción es menor en la subbanda 0 (y en todas las de su valle) que en las subbandas prima.

# Capítulo 5

## Autocalentamiento

### 5.1. Introducción

En el capítulo anterior hemos estudiado el efecto del óxido inferior sobre la dispersión culombiana en estructuras SOI. La presencia de este aislante también tiene otra consecuencia sobre la operación del dispositivo: el autocalentamiento. Éste se debe a que la conductividad térmica del óxido es unos dos órdenes de magnitud menor que la del silicio [SCA<sup>+</sup>94]. Como consecuencia, el calor generado por la conducción de los portadores no puede disiparse tan eficazmente en una estructura SOI como en una estructura *bulk*, por lo que la temperatura en el canal se incrementa.

Este fenómeno tiene, lógicamente, consecuencias sobre el funcionamiento del dispositivo y sobre sus curvas características  $I_{ds} - V_{ds}$ . En primer lugar, el aumento de la temperatura provoca una mayor agitación de la red y, por tanto, una disminución de la movilidad [KMI<sup>+</sup>01]. Además, el hecho de que el efecto del autocalentamiento sea mayor cuanto mayor sea la potencia disipada en el dispositivo puede provocar, incluso, que se obtenga una resistencia diferencial negativa [MHME89], es decir, que disminuya la corriente de drenador al aumentar la tensión drenador-fuente. En segundo lugar, se ha observado la desaparición del efecto *kink* [MHME89], [JS95]. Este efecto se produce en los MOSFETs de tecnología SOI con el sustrato flotante como consecuencia del incremento de la tensión del sustrato provocado por la creación de huecos mediante ionización por impacto de electrones energéticos cerca del drenador.

Esto equivale a una disminución de la tensión umbral y provoca un aumento, relativamente brusco, de la corriente de drenador en las curvas  $I_{ds} - V_{ds}$ . Finalmente, también se ha observado recientemente un enriquecimiento de la corriente de sustrato en dispositivos SOI respecto a sus equivalentes *bulk* [SGSH02]. Este hecho es consecuencia de la mayor temperatura en el dispositivo, que provoca una mayor tasa de ionización.

El autocalentamiento no es exclusivo de estructuras SOI y también se ha observado en láminas de silicio crecidas sobre  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , debido a la menor conductividad térmica de este material [JR02] (aproximadamente 15 veces menor para el caso  $x = 0.2$ ).

Puesto que el autocalentamiento tiene su origen en la potencia disipada como consecuencia de la conducción de los electrones, su efecto no es igual de importante en todos los modos de operación del dispositivo. En concreto, en circuitos digitales la influencia del autocalentamiento es mucho menor que en circuitos analógicos, puesto que la corriente que circula por los dispositivos en el primer caso es nula la mayor parte del tiempo.

Experimentalmente se ha determinado que los valores de las constantes de tiempo térmicas características de transistores SOI están entre unas decenas de nanosegundos [Col02] y unos cientos de nanosegundos [JS95]. Esto provoca que, en los circuitos analógicos, se obtengan transconductancias dependientes de la frecuencia: a bajas frecuencias el autocalentamiento puede seguir la frecuencia de la señal, pero no a altas. Por otro lado, en los circuitos digitales en los que la corriente circule durante menos de unos pocos nanosegundos y las transiciones se produzcan temporalmente espaciadas, el efecto del autocalentamiento es despreciable.

De hecho, una de las técnicas existentes para determinar las curvas características de transistores de tecnología SOI no afectadas por el autocalentamiento consiste en realizar las medidas mediante señales de pulsos muy breves [JS95]. Otra técnica consiste en trazar la curva característica rápidamente (con un *slew rate* superior a 20 V/ $\mu\text{s}$ ), con el fin de no dar tiempo a que el dispositivo se caliente [Col02].

Para finalizar esta introducción, comentaremos que la determinación experimental de la temperatura alcanzada en el canal se suele realizar fundamentalmente mediante

dos métodos. El primero consiste en obtener curvas no afectadas por autocalentamiento para diversas temperaturas y ver cuál de ellas proporciona la misma corriente (para cierta tensión  $V_{ds}$ ) que la curva afectada por autocalentamiento. Se admite entonces que la temperatura del canal es la correspondiente a esta curva [JR02]. El otro procedimiento consiste en medir la resistencia (que, como es sabido, es dependiente de la temperatura) del contacto de puerta [SCA<sup>+</sup>94].

En este capítulo vamos a realizar una revisión de los modelos de autocalentamiento existentes en la bibliografía, con el fin de continuar la labor desarrollada en el presente trabajo con la inclusión del autocalentamiento en el estudio del transporte en estructuras SOI.

## 5.2. Modelado del autocalentamiento

La mayoría de los modelos usados para el estudio del autocalentamiento son macroscópicos. Es decir, emplean expresiones analíticas de la movilidad, dependientes de la temperatura, con el fin de obtener también expresiones analíticas de las características  $I_{ds} - V_{ds}$  que puedan usarse en simuladores de circuitos [CMK<sup>+</sup>95], [HJ98], [CI99], [RGLVCC00], [LTRW<sup>+</sup>01]. El incremento de la temperatura de la red  $\Delta T_l$  (necesario para calcular la movilidad) suele obtenerse modelando la dificultad que tiene el dispositivo para disipar la potencia generada en el canal por la corriente ( $P = I_{ds}V_{ds}$ ) mediante un único parámetro, la resistencia térmica de la estructura ( $R_{th}$ ). De este modo el incremento de temperatura es igual a:

$$\Delta T_l = R_{th}P. \quad (5.1)$$

En los dispositivos considerados, la resistencia térmica es la correspondiente al óxido inferior, pues constituye el mejor camino para la disipación de la potencia generada. La resistencia térmica de un material (en este caso; el dióxido de silicio) viene dada por:

$$R_{th}^{-1} = k_{ox} \frac{A}{t_{ox}}, \quad (5.2)$$

donde  $k_{ox}$  es la conductividad térmica del óxido,  $t_{ox}$  es su espesor y  $A$  es el área sobre la cual se genera la potencia. Esta expresión es válida siempre y cuando el problema

de la difusión del calor pueda tratarse unidimensionalmente, es decir, en el caso en el que la generación de potencia se produzca uniformemente sobre toda la superficie del material. En este caso,  $A$  es el área del dispositivo [MHME89].

No obstante, medidas experimentales de la resistencia térmica han mostrado que la dependencia con el espesor del dióxido de silicio inferior no es lineal, como sugiere la anterior expresión (5.2) [SCA<sup>+</sup>94]. Esto se debe a que no está disponible todo el área del dispositivo para disipar el calor, sino sólo la región correspondiente a una longitud característica, desde el foco en el que se genera el calor, en la cual el silicio tiende a recuperar la temperatura ambiente. Esta magnitud viene dada por:

$$l_{th} = \sqrt{\frac{k_{Si} t_{Si} t_{ox}}{k_{ox}}}, \quad (5.3)$$

donde  $k_{Si}$  es la conductividad térmica del silicio y  $t_{Si}$  es el espesor de la lámina de silicio. Por tanto, el calor se disipa a través de un área del óxido igual a  $W \times l_{th}$ , siendo  $W$  la anchura del dispositivo. Por tanto, la resistencia térmica correspondiente es:

$$R_{th} = \frac{1}{2W} \sqrt{\frac{t_{ox}}{k_{ox} k_{Si} t_{Si}}}. \quad (5.4)$$

Este valor está de acuerdo con diversas medidas experimentales, tanto en transistores SOI [SCA<sup>+</sup>94] como en transistores sobre  $Si_{1-x}Ge_x$  [JR02]. Además, ha sido empleada con éxito para calcular la corriente de drenador teniendo en cuenta el autocalentamiento [CMK<sup>+</sup>95], [RGLVCC00].

Aunque la corriente depende de la temperatura del canal y ésta de la temperatura, no es necesario llevar a cabo ningún proceso iterativo, sino que con este tipo de modelos puede obtenerse la corriente de drenador analíticamente bien mediante un desarrollo lineal de la corriente en función del incremento de temperatura [HJ98], [RGLVCC00] o bien mediante la ecuación de balance de la energía, mediante la cual se relaciona el campo de arrastre con la temperatura de la red y de los electrones [CMK<sup>+</sup>95].

Los modelos comentados anteriormente no estudian el autocalentamiento como un fenómeno distribuido, sino que asumen un incremento medio de la temperatura de la red. Si se quiere realizar un estudio más detallado, calculando la temperatura

en cada posición, se requiere el uso de simuladores bidimensionales y el empleo de la ecuación de flujo del calor [KMI<sup>+</sup>01], [LUGM99], [Ins98]:

$$\nabla \cdot (k \vec{\nabla} T_l) = \rho c \frac{\partial T_l}{\partial t} - H, \quad (5.5)$$

donde  $\rho$  es la densidad del material,  $c$  su calor específico y  $H$  es el calor generado por unidad de volumen y tiempo. Más adelante veremos cómo calcular el valor de  $H$ .

En cualquier caso, este tipo de simuladores hacen uso también de expresiones analíticas para obtener la movilidad, como los modelos analíticos anteriormente comentados. En ambos casos suelen emplearse dos tipos de expresiones para el cálculo de la movilidad. En el primer tipo, la temperatura de la red y la de los electrones es la misma, por lo que la movilidad depende de una temperatura única. Este es el caso de las simulaciones realizadas con el modelo de transporte de difusión y deriva, que no permite obtener la temperatura de los electrones, y de los modelos analíticos expuestos en las referencias [HJ98], [RGLVCC00]. En el segundo tipo, la movilidad depende tanto de la temperatura de la red como de la de los portadores. Para obtener ésta, debe hacerse uso de la ecuación de balance de la energía [CMK<sup>+</sup>95], empleando el modelo hidrodinámico para el estudio del transporte [Sch98].

El calor generado por la corriente se calcula según el modelo de transporte empleado por el simulador de dispositivos. Con un modelo de difusión y deriva, el calor viene dado por la expresión de Joule:

$$H = \vec{\nabla} \left( \frac{V}{q} \right) \cdot \vec{J}_n + \vec{\nabla} \left( \frac{V}{q} \right) \cdot \vec{J}_p, \quad (5.6)$$

mientras que en el modelo hidrodinámico se determina a través de los tiempos de relajación de la energía de los electrones ( $\tau_{e,n}$ ) y de los huecos ( $\tau_{e,p}$ ) mediante la siguiente ecuación:

$$H = \frac{3k_B}{2} \left( n \frac{T_n - T_l}{\tau_{e,n}} + p \frac{T_p - T_l}{\tau_{e,p}} \right). \quad (5.7)$$

En esta expresión,  $T_n$  es la temperatura de los electrones y  $T_p$  la de los huecos.

Para comprobar el efecto del autocalentamiento hemos empleado el simulador MINIMOS-NT con el fin de obtener las curvas de corriente de drenador incluyendo o no el autocalentamiento en los cálculos. Se han simulado tanto MOSFETs SOI como

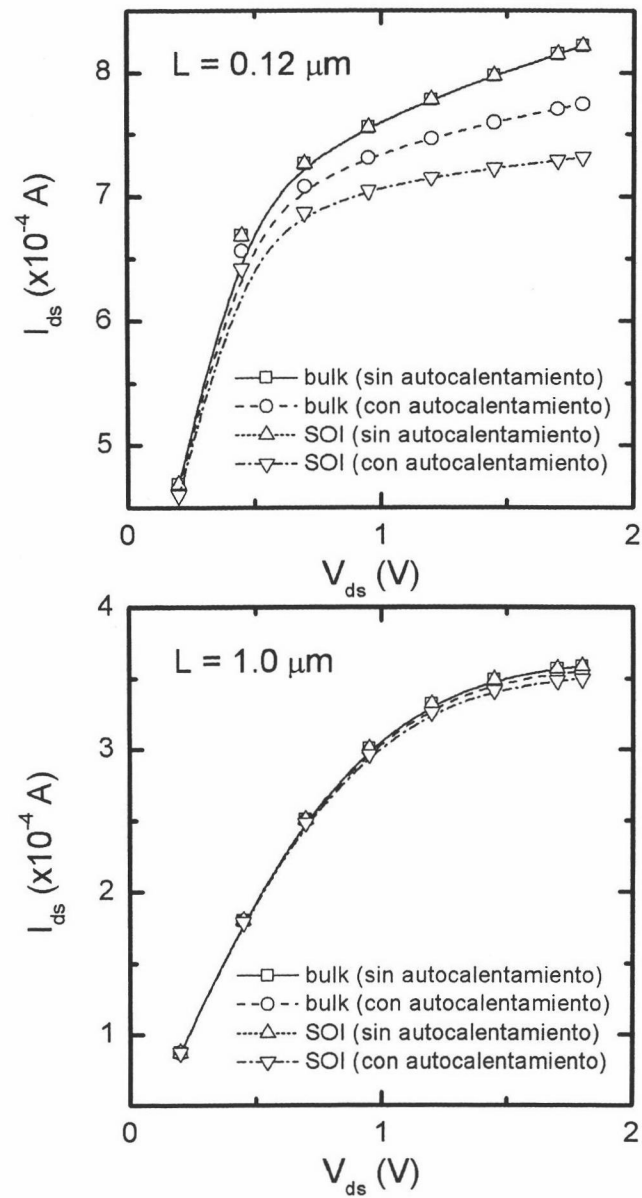


transistores con los mismos parámetros pero sin óxido enterrado (transistores *bulk*). Los parámetros de los dispositivos simulados son:  $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (concentración de impurezas aceptadoras),  $t_{\text{Si}} = 60 \text{ nm}$  (espesor de la capa de silicio),  $t_{\text{oxf}} = 9 \text{ nm}$  (espesor del óxido superior),  $t_{\text{ox}} = 360 \text{ nm}$  (espesor del óxido enterrado) y  $W = 1 \text{ }\mu\text{m}$  (anchura del dispositivo).

Los resultados obtenidos se muestran en la figura 5.1. La gráfica superior corresponde a transistores con una longitud del canal muy corta ( $0.12 \text{ }\mu\text{m}$ ). Como puede observarse, el efecto del autocalentamiento es considerable, especialmente en el transistor SOI. En los dos casos se obtiene exactamente la misma corriente cuando no se incluye el autocalentamiento.

Cuando el canal es más largo, el efecto del autocalentamiento disminuye. En la figura inferior se muestra que con una longitud del canal igual a  $1 \text{ }\mu\text{m}$  apenas hay calentamiento del dispositivo. Esto se debe a que hay menos potencia disipada (la corriente de drenador es menor), pero también a que se produce en un área mayor, por lo que puede ser disipada con mayor facilidad (la resistencia térmica del óxido es inversamente proporcional al área considerada).

Por otro lado, a pesar de que todos los modelos que se han comentado emplean expresiones analíticas de la movilidad y de que proporcionan buenos resultados, nosotros creemos que resulta conveniente realizar también estudios desde el punto de vista microscópico, mediante el método de Monte Carlo, con el fin de explicar los parámetros macroscópicos empleados en los modelos para circuitos. Por ejemplo, miembros de nuestro grupo de investigación han desarrollado un modelo analítico que incluye los efectos del autocalentamiento y del sobredisparo de la velocidad [RGLVCC00]. Ajustando curvas experimentales han obtenido que el parámetro que da cuenta del sobredisparo ( $\lambda_a$ ) es menor en dispositivos SOI que en dispositivos *bulk*. La explicación sugerida es que la mayor temperatura de la red provoca que haya un mayor número de fonones, lo cual facilita que se alcance antes la relajación de la energía de los electrones ante un cambio súbito del campo eléctrico, disminuyendo por tanto los efectos del sobredisparo. No obstante, creemos que se requieren simulaciones microscópicas para demostrar y cuantificar este fenómeno.



**Figura 5.1:** Curvas  $I_{ds} - V_{ds}$  de un MOS convencional y su equivalente en tecnología SOI obtenidas incluyendo o no el autocalentamiento en las simulaciones. Se han calculado para dos longitudes de puerta distintas.

En un simulador de Monte Carlo, la potencia transferida a la red puede ser directamente calculada a partir de la energía perdida por término medio por un electrón ( $\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \rangle_{ph}$ ) mediante los mecanismos inelásticos de dispersión (fonones):

$$H = n \left\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right\rangle_{ph}, \quad (5.8)$$

donde  $\varepsilon$  es la energía del electrón y  $n$  la concentración de electrones.

En una primera aproximación, válida para canales largos o tensiones de drenador pequeñas, se puede suponer que el calor se produce por igual a lo largo del canal y tratar, por tanto, el problema como unidimensional. En este caso, podemos obtener el incremento de temperatura de la red a partir de la siguiente condición:

$$n \left\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \right\rangle_{ph} = R_{th}^{-1} \Delta T, \quad (5.9)$$

que establece que el calor evacuado a través de la resistencia térmica del sistema coincide con el generado mediante la dispersión de los electrones. Por tanto, el incremento de temperatura en el sistema se calcularía mediante un proceso iterativo. Partiendo de cierta temperatura, se calcula la potencia entregada a la red y se ve si es igual a la evacuada. Si es mayor, se incrementa la temperatura en la siguiente iteración mientras que se disminuye si es menor hasta conseguir la situación de equilibrio descrita por la ecuación (5.9). El siguiente paso debe ser obtener la difusión del calor en la estructura bidimensional para poder determinar la distribución de temperatura también en dispositivos de canal corto y con cualquier tensión de drenador.

# Capítulo 6

## Resumen y conclusiones

En el presente trabajo se han estudiado dos fenómenos de gran importancia en los dispositivos MOS actuales: la corriente de fuga a través del óxido de puerta y la dispersión culombiana en MOSFETs de tecnología SOI. Ambos se han modelado para su posterior inclusión en simuladores de dispositivos. En concreto, en el simulador de dispositivos MINIMOS-NT se ha implementado un módulo para el cálculo de la corriente SILC (corriente asistida por las trampas creadas en el óxido mediante estrés eléctrico) que permite realizar simulaciones estacionarias y transitorias, mientras que el modelo de dispersión culombiana ha sido empleado en el simulador de Monte Carlo previamente desarrollado por nuestro grupo de investigación.

A continuación resumimos el trabajo realizado, así como las conclusiones que pueden extraerse de nuestro estudio.

### Corriente por túnel directo

- Se ha estudiado la corriente por túnel directo a través de óxidos de puerta aplicando el método de Bardeen. El modelo obtenido es válido tanto para el caso de electrones confinados (gas 2D) como para electrones no ligados (gas 3D), por lo que puede ser aplicado con cualquier rango de tensiones de puerta.
- Se han ajustado resultados experimentales correspondientes a muestras con diferente espesor del óxido de puerta y procedentes de diversos auto-

---

res. Esto es posible sin usar ningún parámetro de ajuste dependiente del espesor del óxido siempre y cuando se incluya la contribución de la energía imagen y se emplee un valor de la masa efectiva en la barrera dependiente de la energía.

- Si no se incluye la energía imagen, la altura de la barrera debe variar-se ligeramente para ajustar muestras con diferente espesor del óxido de puerta.
- Se ha observado que, para el caso de las muestras con espesores por debajo de 2.5 nm, se reproducen mejor los resultados experimentales si sólomente se incluye la corriente procedente de los valles perpendiculares al plano (100). Este hecho puede estar relacionado con la conservación del momento paralelo, que hace que la altura de la barrera sea mayor para los electrones que efectúan la transición desde los valles transversales, y está de acuerdo con un modelo microscópico de ligaduras fuertes, según el cual la ruptura de la conservación del momento paralelo se produce para óxidos por encima de un espesor crítico que sitúan entre 1 y 3 nm

### Corriente asistida por trampas

- Se han desarrollado dos modelos teóricos para el estudio de la corriente túnel asistida por trampas. Uno da cuenta de las transiciones efectuadas de forma elástica y el otro de las que se realizan inelásticamente. Ambos mecanismos han sido considerados como procesos en dos pasos.
- En el caso de las transiciones elásticas, éstas tienen lugar por la presencia de un pequeño pozo de potencial (y del correspondiente nivel resonante) en el interior de la barrera del óxido. Para el cálculo de las probabilidades de captura y emisión de un electrón por parte de las trampas se ha aplicado también el método de Bardeen, adaptándolo en lo necesario.
- Se han comparado los resultados del modelo obtenido con datos experimentales y con los obtenidos mediante el método de la matriz de transferencia,

en el caso particular de una doble barrera simétrica. En ambos casos se ha obtenido buen acuerdo.

- Los datos experimentales ajustados corresponden a óxidos de puerta con espesores entre 2.91 y 3.61 nm en el rango de tensiones para las cuales la corriente por túnel directo no es suficiente para explicar toda la corriente de pérdidas.
- Para el ajuste de estos datos se ha tenido que suponer una distribución energética de las trampas que coincide, aproximadamente, con la correspondiente a las vacantes de oxígeno, propuestas por algunos autores como las causantes de la corriente de pérdidas en óxidos vírgenes (no sometidos a estrés).
- En cuanto a la corriente por túnel inelástico, la perturbación causante de las transiciones es la parte no adiabática del hamiltoniano del cristal, que acopla el movimiento de los electrones y de la red. La captura y la emisión se producen entonces mediante procesos no radiativos con emisión (y absorción) de varios fonones.
- Basándose en primeros principios, se han obtenido las probabilidades de transición correspondientes a este mecanismo y se han aplicado, en primer lugar, para el cálculo de la corriente en régimen estacionario. Los únicos parámetros de ajuste del modelo son propiedades de las trampas: posición energética, semidesplazamiento de Stokes y concentración.
- Se han ajustado resultados experimentales, procedentes de diversas referencias, con el modelo desarrollado y se ha analizado la dependencia de la corriente con los parámetros de las trampas y con la temperatura.
- Se han obtenido y analizado gráficas de la energía perdida por los electrones por término medio en función de la polarización, identificándose las distintas regiones de estas curvas con el régimen y posición de las trampas que principalmente contribuyen a la corriente. En concreto, se ha encontrado una relación entre el flanco de bajada de estas curvas y la entrada en régimen de Fowler-Nordheim de la corriente asistida por trampas.

- 
- Se ha desarrollado una aproximación analítica para el cálculo de las probabilidades de transición mediante túnel asistido por trampas inelásticamente y se ha comprobado que proporciona resultados muy parecidos a los del modelo numérico. El modelo analítico ha sido implementado en el simulador de dispositivos MINIMOS-NT. Con este programa y el modelo incorporado se han realizado simulaciones estacionarias y transitorias de estructuras MOS. También se ha obtenido la curva de descarga de una celda de memoria EEPROM causada por la corriente de pérdidas.

### Dispersión coulombiana en estructuras SOI

- Se ha desarrollado un nuevo modelo para el cálculo de la dispersión coulombiana en estructuras SOI. Este tiene en cuenta la presencia de las dos interfaces Si-SiO<sub>2</sub>.
- Se han comparado los resultados obtenidos con el nuevo modelo con otros calculados con un modelo de una sola interfaz, que no tiene en cuenta el espesor finito de la capa de silicio. Se ha comprobado que las diferencias entre los resultados de ambos modelos son mayores cuanto menor es el espesor de la capa de silicio y cuanto menor es el campo transversal efectivo.
- Se ha calculado el potencial introducido por las cargas origen de la perturbación (que sería el potencial perturbación final en ausencia de apantallamiento) y se ha obtenido su dependencia con el espesor de la lámina de silicio, con la constante dieléctrica del aislante de puerta y con  $Q$ , que es el módulo de la diferencia de los momentos electrónicos inicial y final.
- Se han calculado curvas de movilidad frente a campo eléctrico transversal efectivo para muestras con diferentes espesores de la lámina de silicio y con diferente densidad de carga en las interfaces. Se ha comprobado la importancia de la dispersión coulombiana aun con campos transversales efectivos intermedios, especialmente cuando la lámina de silicio es muy delgada.

- Posteriormente se ha analizado la dependencia de los elementos de matriz que determinan las probabilidades de transición con el espesor del silicio y con el campo transversal. Con muestras con un espesor por encima de 10 nm, se ha obtenido que los elementos de matriz correspondientes a las transiciones provocadas por cargas situadas en la interfaz superior presentan un máximo con campos transversales intermedios, consecuencia del efecto contrapuesto sobre la movilidad de dos fenómenos: cuanto mayor es el campo transversal, mayor es el apantallamiento de las cargas fijas por las móviles pero más próximos están los electrones de la interfaz. Para muestras con espesores inferiores, los elementos de matriz disminuyen siempre al aumentar el campo eléctrico transversal, pues aumenta la carga en inversión y el apantallamiento. Lo mismo sucede, para todos los espesores, con los elementos de matriz correspondientes a la interfaz inferior.
- Se ha estudiado la influencia del apantallamiento de las cargas fijas por la carga en inversión, que disminuye la perturbación introducida por las primeras. Se ha comprobado que el apantallamiento es tanto más efectivo cuanto menor sea  $Q$  y cuanto menor sea el espesor de la capa de silicio.
- Finalmente, se ha comprobado que la temperatura apenas afecta al valor de los elementos de matriz que determinan la dispersión coulombiana. Sin embargo, al disminuir la temperatura se ha obtenido un importante aumento de la movilidad en general, pero también de la limitada por efecto coulombiano. Este hecho se atribuye a la concentración de los electrones en la subbanda fundamental. Esto tiene dos consecuencias beneficiosas para la movilidad: disminuye la masa efectiva para la conducción y disminuye el número de estados finales disponibles después de un proceso de dispersión.

### Autocalentamiento

- Se han revisado los efectos producidos por el autocalentamiento sobre la corriente de drenador en transistores MOSFET de tecnología SOI, así como



---

los modelos existentes para su estudio.

- Usando expresiones analíticas para el cálculo de la movilidad de los portadores, se han obtenido curvas de la corriente de drenador en función de la tensión drenador-fuente mediante un simulador de dispositivos bidimensional (MINIMOS-NT).
- Se ha comprobado que la importancia del autocalentamiento crece al disminuir la longitud del canal.

# Bibliografía

- [AFS82] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern. Electronic properties of 2D systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54(2), 1982.
- [AGG93] E. Anemogiannis, E.N. Glytsis, and T.K. Gaylord. Bound and Quasi-bound State Calculations for Biased/Unbiased Semiconductor Quantum Heterostructures. *IEEE J. Quantum Electr.*, 29(11):2731–2740, 1993.
- [AGG97] E. Anemogiannis, E.N. Glytsis, and T.K. Gaylord. Quasi-Bound States Determination Using a Perturbed Wavenumbers Method in a Large Quantum Box. *IEEE J. Quantum Electr.*, 33(5):742–752, 1997.
- [AI87] Y. Ando and T. Itoh. Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers. *J. Appl. Phys.*, 61(4):1497–1502, 1987.
- [And76] T. Ando. Density-functional calculation of sub-band structure in accumulation and inversion layers. *Phys. Rev. B*, 13(8):3468–3477, 1976.
- [ASH+93] S. Aritome, R. Shirota, G. Hemink, T. Endoh, and F. Masuoka. Reliability Issues of Flash Memory Cells. *Proc. IEEE*, 81(5):776–788, 1993.
- [Bar61] J. Bardeen. Tunneling from a Many-Particles Point of View. *Phys. Rev. Lett.*, 6(57), 1961.

- 
- [BGR<sup>+</sup>84] G. Binnig, N. García, H. Rohrer, J.M. Soler, and F. Flores. Electron-metal-surface interaction potencial with vacuum tunneling: Observation of the image force. *Phys. Rev. B*, 30(8):4816–4818, 1984.
- [Boh02] M. Bohr. Intel’s 90 nm Technology: Moore’s Law and More. Technical report, Intel Corporation, <http://www.intel.com/research/silicon>, 2002.
- [BS99a] P. E. Blöchl and J. H. Stathis. Hydrogen electrochemistry and stress-induced leakage current in silica. *Phys. Rev. Lett.*, 83(2):372–375, 1999.
- [BS99b] P.E. Blöchl and J.H. Stathis. Aspects of defects in silica related to dielectric breakdown of gate oxides in MOSFETs. *Physica B*, (273-274):1022–1026, 1999.
- [BWS96] B. Brar, G.D. Wilk, and A. C. Seabaugh. Direct extraction of the electron tunneling effective mass in ultrathin SiO<sub>2</sub>. *Appl. Phys. Lett.*, 69(18):2728–2730, 1996.
- [C<sup>+</sup>02] R. Chau et al. Advanced Depleted-Substrate Transistors: Single-Gate, Double-Gate and Tri-Gate. Technical report, Intel Corporation, <http://www.intel.com/research/silicon>, 2002.
- [Cap00] P. Cappelletti. *Flash Memories*. Kluwer Academic Publishers, 2000.
- [Cas00] E. Cassan. On the reduction of direct tunneling leakage through ultrathin gate oxides by one-dimensional schrödinger-poisson solver. *J. Appl. Phys.*, 87(11):7931–7939, 2000.
- [CC00] Pedro Cartujo-Cassinello. *Simulación Y Modelado de Transistores MOS de Doble Puerta*. PhD thesis, Universidad de Granada, 2000.
- [CGP01] R. Clerc, G. Ghibaudo, and G. Pananakakis. Bardeen’s approach for tunneling evaluation in MOS structures. *Proceedings of the European Workshop on Ultimate Integration of Silicon (ULIS’2001)*, 2001.
-

- [CGP02] R. Clerc, G. Ghibaudo, and G. Pananakakis. Bardeen's approach for tunneling evaluation in MOS structures. *Solid-St. Electr.*, 46:1039–1044, 2002.
- [CI99] A. Caviglia and A.A. Iliadis. A Large-Signal SOI MOSFET Model Including Dynamic Self-Heating Based on Small-Signal Model Parameters. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 46(4):762–768, 1999.
- [CMK<sup>+</sup>95] Y.G. Chen, S.Y. Ma, J.B. Kuo, Z. Yu, and R.W. Dutton. An Analytical Drain Current Model Considering Both Electron and Lattice Temperatures Simultaneously for Deep Submicron Ultrathin SOI NMOS Devices with Self-Heating. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 42(5):899–906, 1995.
- [Col02] J.P. Colinge. *Silicon on insulator technology: materials to VLSI*. Kluwer Academic Publishers, 2 edition, 2002.
- [CPM95] J. Choi, Y. Park, and H. Min. Electron mobility behaviour in extremely thin SOI MOSFETs. *IEEE Electr. Dev. Lett.*, 16(11):527–529, 1995.
- [CS01] J. Cai and C.T. Sah. Gate tunneling currents in ultrathin oxide metal-oxide-silicon transistors. *J. Appl. Phys.*, 89(4):2272–2285, 2001.
- [CSGP02] R. Clerc, A. Spinelli, G. Ghibaudo, and G. Pananakakis. Theory of direct tunneling current in metal-oxide-semiconductor structures. *J. Appl. Phys.*, 91(3):1400–1409, 2002.
- [CZ98] K. S. Chan and R. Q. Zhang. A Novel Approach to a Tunneling Lifetime Calculation: The Projected Green's Function Method. *IEEE J. Quantum Electr.*, 34(11):2179–2187, 1998.
- [DC95] D.J. DiMaria and E. Cartier. Mechanism for stress-induced leakage currents in thin silicon dioxide films. *J. Appl. Phys.*, 78(6):3883–3894, 1995.

- 
- [DS89] D.J. DiMaria and J.W. Stasiak. Trap creation in silicon dioxide produced by hot electrons. *J. Appl. Phys.*, 65(6):2342–2356, 1989.
- [DSV81] S. Das Sarma and B. Vinter. Temperature-dependent many-body effects on the electronic properties of space-charge layers. *Phys. Rev. B*, 23(12):6832, 1981.
- [DVM<sup>+</sup>95] M. Depas, B. Vermeire, P.W. Mertens, R.L. Van Meirhaeghe, and M.M. Heyns. Determination of tunneling parameters in ultra-thin oxide layer poly-Si/SiO<sub>2</sub>/Si structures. *Solid-State Electron.*, 38(8):1465–1471, 1995.
- [EMC<sup>+</sup>01] D. Esseni, M. Mastrapasqua, G.K. Celler, C. Fiegna, L. Selmi, and E. Sangiorgi. Low Field Electron and Hole Mobility of SOI Transistors Fabricated on Ultrathin Silicon Films for Deep Submicrometer Technology Application. *IEEE Trans. Electr. Dev.*, 48(12):2842–2850, 2001.
- [F<sup>+</sup>01] D.J. Frank et al. Device scaling limits of si MOSFETs and their application dependencies. *Proc. IEEE*, 89(3):259–288, 2001.
- [Fer95] D.K. Ferry. *Quantum Mechanics: An Introduction for Device Physicists and Electrical Engineers*. Institute of Physics Publishing, 1995.
- [Fis94] M.V. Fischetti. Comments on "Oxide-Field Dependence of Electron Injection from Silicon Into Silicon Dioxide". *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 41(9):1680–1681, 1994.
- [FL93] M.V. Fischetti and S.E. Laux. Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers. *Phys. Rev. B*, 48(4):2244–2274, 1993.
- [FNC01] M.V. Fischetti, D.A. Neumayer, and E.A. Cartier. Effective electron mobility in si inversion layers in metal-oxide-semiconductor systems with a high- $\kappa$  insulator: The role of remote phonon scattering. *J. Appl. Phys.*, 90(9):4587–4608, 2001.
-

- [FRZF90] W.B. Fowler, J.K. Rudra, M.E. Zvanut, and F.J. Feigl. Hysteresis and Franck-Condon relaxation in insulator-semiconductor tunneling. *Phys. Rev. B*, 41(12):8313–8317, 1990.
- [GAB<sup>+</sup>99] A. Ghetti, M.A. Alam, J. Bude, D. Monroe, E. Sangiorgi, and H. Vaidya. Analysis of trap-assisted conduction mechanisms through silicon dioxide films using quantum yield. In *IEDM Tech. Dig.*, page 723, 1999.
- [GAB<sup>+</sup>00] A. Ghetti, M. Alam, J. Bude, D. Monroe, E. Sangiorgi, and H. Vaidya. Stress induced leakage current analysis via quantum yield experiments. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 47(7):1341–1348, 2000.
- [GF01] F. Gámiz and M.V. Fischetti. Monte carlo simulation of double-gate silicon-on-insulator inversion layers: The role of volume inversion. *J. Appl. Phys.*, 89(10):5478–5487, 2001.
- [GGV95] G. Gildenblat, B. Gelmont, and S. Vatannia. Resonant behaviour, symmetry, and singularity of the transfer matrix in asymmetric tunneling structures. *J. Appl. Phys.*, 77(12):6327–6331, 1995.
- [GJMRCC02] F. Gámiz, F. Jiménez-Molinos, J.B. Roldán, and P. Cartujo-Cassinello. Coulomb scattering model for ultrathin silicon-on-insulator inversion Layers. *Appl. Phys. Lett.*, 80(20):3835, 2002.
- [GLVJT<sup>+</sup>94] F. Gámiz, J.A. López-Villanueva, J.A. Jiménez-Tejada, I. Melchor, and A. Palma. A comprehensive model for coulomb scattering in inversion layers. *J. Appl. Phys.*, 75(2):924–934, 1994.
- [GMC88] B. Gu, M. Mangiantini, and C. Coluzza. Analysis of mechanism for resonant tunneling via localized states in thin SiO<sub>2</sub> films. *J. Appl. Phys.*, 64(12):6867–6870, 1988.
- [God97] A. Godoy. *Estudio del Ruido de Baja Frecuencia en Transistores de Efecto Campo*. PhD thesis, Universidad de Granada, 1997.

- 
- [GP94] F.J. Gámiz Pérez. *Estudio de las propiedades de transporte de electrones en láminas de inversión semiconductoras por el método de Monte Carlo*. PhD thesis, Universidad de Granada, 1994.
- [GRLV<sup>+</sup>99] F. Gámiz, J.B. Roldán, J.A. López-Villanueva, P. Cartujo-Cassinello, and J.E. Carceller. Surface roughness at the Si-SiO<sub>2</sub> interfaces in fully depleted silicon-on-insulator layers. *J. Appl. Phys.*, 86:6854–6863, 1999.
- [GRLV<sup>+</sup>01a] F. Gámiz, J.B. Roldán, J.A. López-Villanueva, P. Cartujo-Cassinello, J.E. Carceller, P. Cartujo, and F. Jiménez-Molinos. Electron transport in silicon-on-insulator devices. *Sol. St. Electron.*, 45:613–620, 2001.
- [GRLV<sup>+</sup>01b] F. Gámiz, J.B. Roldán, J.A. López-Villanueva, F. Jiménez-Molinos, and J.E. Carceller. Electron transport in ultrathin double-gate SOI devices. *Microelectronic Eng.*, 59:423–427, 2001.
- [GSSK99] A. Ghetti, E. Sangiorgi, T.W. Sorsch, and I. Kizilyalli. The role of native traps on the tunneling characteristics of ultra-thin (1.5-3 nm) oxides. *Microelectron. Eng.*, 48(1-4):31–34, 1999.
- [Har61] W.A. Harrison. Tunneling from an independent-particle point of view. *Phys. Rev.*, 123(1):85–89, 1961.
- [Heb97] K.J. Hebert. Fowler-Nordheim tunneling current oscillations at metal/oxide/Si interfaces. *J. Appl. Phys.*, 82(1):291–296, 1997.
- [Hes88] K. Hess. *Advanced Theory of Semiconductors Devices*. Prentice Hall, 1988.
- [HJ98] M.C. Hu and S.L. Jang. An Analytical Fully-Depleted SOI MOSFET Model Considering the Effects of Self-Heating and Source-Drain Resistance. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 45(4):797–801, 1998.
- [HK64] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.*, 136:B864, 1964.
-

- [HS95] M. Herrmann and A. Schenk. Field and high-temperature dependence of the long term charge loss in erasable programmable read only memories: Measurements and modeling. *J. Appl. Phys.*, 77(9):4522–4540, 1995.
- [HW78] A. Hartstein and Z.A. Weinberg. On the nature of the image force in quantum mechanics with application to photon assisted tunneling and photoemission. *J. Phys. C*, 11:L469–L473, 1978.
- [HW79] A. Hartstein and Z.A. Weinberg. Unified theory of internal photoemission and photon-assisted tunneling. *Phys. Rev. B*, 20(4):1335–1338, 1979.
- [HY85] S. Horiguchi and H. Yoshino. Evaluation of interface potential barrier heights between ultrathin silicon oxides and silicon. *J. Appl. Phys.*, 58(4):1597–1600, 1985.
- [Ins98] Institute for Microelectronics, TU Vienna. *MINIMOS-NT*, 1998.
- [ISL<sup>+</sup>01] D. Ielmini, A. S. Spinelli, A. L. Lacaita, A. Martinelli, and G. Ghidini. A recombination and trap-assisted tunneling model for stress-induced leakage current. *Solid St. Electron.*, 45:1361–1369, 2001.
- [ISRL00a] D. Ielmini, A.S. Spinelli, M.A. Rigamonti, and A.L. Lacaita. Modeling of SILC based on electron and hole tunneling - part I: Transient effects. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 47(6):1258–1265, 2000.
- [ISRL00b] D. Ielmini, A.S. Spinelli, M.A. Rigamonti, and A.L. Lacaita. Modeling of SILC based on electron and hole tunneling - part II: Steady-state. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 47(6):1266–1272, 2000.
- [JM00] F. Jiménez-Molinos. Simulación de la Corriente Túnel en Estructuras MIS. Master's thesis, Universidad de Granada, 2000.



- 
- [JMGP<sup>+</sup>01] F. Jiménez-Molinos, F. Gámiz, A. Palma, P. Cartujo, and J.A. López-Villanueva. Direct and assisted tunnel current through gate oxides. In *Conferencia de Dispositivos Electrónicos 2001 (CDE-2001)*, 2001.
- [JMGP<sup>+</sup>02] F. Jiménez-Molinos, F. Gámiz, A. Palma, P. Cartujo, and J.A. López-Villanueva. Direct and trap-assisted elastic tunneling through ultrathin gate oxides. *J. Appl. Phys.*, 91(8):5116–5124, 2002.
- [JMGP<sup>+</sup>01] F. Jiménez-Molinos, A. Palma, F. Gámiz, J. Banqueri, and J.A. López-Villanueva. Physical model for trap-assisted inelastic tunneling in metal-oxide-semiconductor structures. *J. Appl. Phys.*, 90(7):3396–3404, 2001.
- [JR02] K.A. Jenkins and K. Rim. Measurement of the Effect of Self-Heating in Strained-Silicon MOSFETs. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 23(6):360–362, 2002.
- [JS95] K.A. Jenkins and J. Y. C. Sun. Measurement of I-V Curves of Silicon-on-Insulator (SOI) MOSFET's Without Self-Heating. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 16(4):145–147, 1995.
- [KBC<sup>+</sup>92] S. Keeney, R. Bez, D. Cantarelli, F. Piccinin, A. Mathewson, L. Ravazi, and C. Lombardi. Complete transient simulation of flash EEPROM devices. *IEEE Trans. Electron Devices*, 39(12):2750–2757, 1992.
- [KH80] M. Kleefstra and G.C. Herman. Influence of the image force on the band gap in semiconductors and insulators. *J. Appl. Phys.*, 51(9):4923–4926, 1980.
- [KMI<sup>+</sup>01] S. Kawanaka, K. Matsuzawa, K. Inoh, Y. Katsumata, M. Yoshimi, and H. Ishiuchi. Study of self-heating influence on device performance of 0.1  $\mu\text{m}$  SOI MOSFETs including velocity overshoot. In *Electrochemical Society Proceedings*, volume 2001-3, 2001.
-

- [KMMH00] Khairurrijal, W. Mizubayashi, S. Miyazaki, and M. Hirose. Analytic model of direct tunnel current through ultrathin gate oxides. *J. Appl. Phys.*, 87(6):3000–3005, 2000.
- [KO96] M. Kimura and T. Ohmi. Conduction mechanism and origin of stress-induced leakage current in thin silicon dioxide films. *J. Appl. Phys.*, 80(11):6360–6369, 1996.
- [KTT02] J. Koga, S. Takagi, and A. Toriumi. Influences of buried-oxide interface on inversion-layer mobility in ultra-thin SOI MOSFETs. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 49(6):1042–1048, 2002.
- [LBTW97] S.H. Lo, D.A Buchanan, Y. Taur, and W. Wang. Quantum-Mechanical Modeling of Electron Tunneling Current from the Inversion Layer of Ultra-Thin-Oxide nMOSFETs. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 18(5):209–211, mayo 1997.
- [LBY99] S.H. Lo, D.A. Buchanan, and Y.Taur. Modeling and characterization of quantization, polysilicon depletion, and direct tunneling effects in MOSFETs with ultrathin oxides. *IBM J. Res. Develop.*, 43(3):327–337, 1999.
- [LCS99] R. Ludeke, E. Cartier, and A. Schenk. Determination of the energy-dependent conduction band mass in SiO<sub>2</sub>. *App. Phys. Lett.*, 75(10):1407–1409, 1999.
- [LEM00] M. Lenski, T. Endoh, and F. Masuoka. Analytical modeling of stress-induced leakage currents in 5.1-9.6 nm thick silicon-dioxide films based on two-step inelastic trap-assisted tunneling. *J. Appl. Phys.*, 88(9):5238–5245, 2000.
- [Li94] Ming-Fu Li. *Modern semiconductor quantum physics*. World Scientific, 1994.

- 
- [LL74] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Curso de Física Teórica*, volume 2. Reverte, 1974.
- [LS69] M. Lenzlinger and E. Snow. Fowler-Nordheim Tunneling Into Thermally Grown SiO<sub>2</sub>. *J. Appl. Phys.*, 40(1):278–283, 1969.
- [LTRW<sup>+</sup>01] M.S. Lee, B.M. Tenbroek, W. Redman-White, J. Benson, and M.J. Uren. A Physically Based Compact Model of Partially Depleted SOI MOSFETs for Analog Circuit Simulation. *IEEE J. Solid-St. Circuits*, 36(1):110–121, 2001.
- [LUGM99] H.T. Lim, F. Udrea, D.M. Garner, and W.I. Milne. Modeling of self-heating effect in thin SOI and Partial SOI LDMOS power devices. *Solid-St. Electr.*, 43:1267–1280, 1999.
- [LV91] J.A. López Villanueva. *Degradación Del Sistema SiO<sub>2</sub> Producida Por Inyección Fowler-Nordheim*. PhD thesis, Universidad de Granada, 1991.
- [LVG99] J.A. López-Villanueva and V. Gasparian. Local Larmor clock approach to the escape time. *Phys. Lett. A*, (260):286–293, 1999.
- [LVJTC<sup>+</sup>91] J.A. López-Villanueva, J.A. Jiménez-Tejada, P. Cartujo, J. Bausells, and J.E. Carceller. Analysis of the Effects of Constant-Current Fowler-Nordheim-Tunneling Injection with Charge Trapping Inside the Potential Barrier. *J. Appl. Phys.*, 70(7):3712–3720, 1991.
- [LVMCC93] J.A. López-Villanueva, I. Melchor, P. Cartujo, and J.E. Carceller. Modified schrödinger equation including nonparabolicity for the study of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B.*, 48(3):1626–1631, 1993.
- [Mad78] O. Madelung. *Introduction to Solid-State Theory*. Springer Verlag, 1978.
- [Mas88] J. Maserjian. Historical perspective on tunneling in SiO<sub>2</sub>. pages 497–507, 1988.
-

- [MC02] G. Marcyk and R. Chau. New Transistors for 2005 and Beyond. Technical report, Intel Corporation, <http://www.intel.com/research/silicon>, 2002.
- [MF97] I. Melchor Ferrer. *Estudio de sistemas electrónicos en potenciales unidimensionales. Aplicación a la estructura metal-aislante-semiconductor*. PhD thesis, Universidad de Granada, 1997.
- [MH92] R. Moazzami and C. Hu. Stress-induced current in thin silicon dioxide films. In *IEDM Technical Digest*, pages 139–142, 1992.
- [MHME89] L.J. McDaid, S. Hall, P.H. Mellor, and W. Eccleston. Physical Origin of Negative Differential Resistance in SOI Transistors. *Electr. Lett.*, 25(13):827–828, 1989.
- [MOY+96] H.S. Momose, M. Ono, T. Yoshitomi, T. Ohguro, S. Nakamura, M. Saito, and H. Iwai. 1.5 nm Direct-Tunneling Gate Oxide Si MOSFETs. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 43(8):1233–1241, 1996.
- [MZ82] J. Maserjian and N. Zamani. Behaviour of the si/sio<sub>2</sub> interface observed by fowler-nordheim tunneling. *J. Appl. Phys.*, 53:559–567, 1982.
- [OF99] S. Okhonin and P. Fazan. Two-band tunneling currents in metal-oxide-semiconductor capacitors at the transition from direct to Fowler-Nordheim tunneling regime. *App. Phys. Lett.*, 74(6):842–843, mayo 1999.
- [ONR88] P. Olivo, T.N. Nguyen, and B. Riccó. High-field-induced degradation in ultra-thin-SiO<sub>2</sub> films. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 35(12):2259–2267, 1988.
- [Pal95] A. Palma. *Estudio de la Captura Térmica Por Defectos En Si Y GaAs*. PhD thesis, Universidad de Granada, 1995.
- [PG01] J.D. Plummer and P.B. Griffin. Material and process limits in silicon VLSI technology. *Proc. IEEE*, 89(3):240–258, 2001.

- 
- [PGJT<sup>+</sup>97] A. Palma, A. Godoy, J.A. Jiménez-Tejada, J.E. Carceller, and J.A. López-Villanueva. Quantum two-dimensional calculation of time constants of random telegraph signals in metal-oxide-semiconductor structures. *Phys. Rev. B*, 56(15):9565–9574, 1997.
- [PLVC96] A. Palma, J.A. López-Villanueva, and J.E. Carceller. Electric Field Dependence of the Electron Capture Cross Section of Neutral Traps in SiO<sub>2</sub>. *J. Electrochem. Soc.*, 143(8):2687–2690, 1996.
- [Pri92] P.J. Price. Resonant tunneling via an accumulation layer. *Phys. Rev. B*, 45(16):9042–9045, 1992.
- [PS83] A. Puri and W.L. Schaich. Comparison of image-potential theories. *Phys. Rev. B*, 28(4):1781–1784, 1983.
- [RGL98] B. Riccò, G. Gozzi, and M. Lanzoni. Modeling and simulation of stress-induced leakage current in ultrathin SiO<sub>2</sub> films. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 45(7):1554–1560, 1998.
- [RGLVCC00] J.B. Roldán, F. Gámiz, J.A. López-Villanueva, and P. Cartujo-Cassinello. Deep Submicrometer SOI MOSFET Drain Current Model Including Series Resistance, Self-Heating and Velocity Overshoot Effects. *IEEE Elect. Dev. Lett.*, 21(5):239–241, 2000.
- [Rid78] B.K. Ridley. Multiphonon, non-radiative transition rate for electrons in semiconductors and insulators. *J. Phys. C*, 11:2323–2341, 1978.
- [Rid80] B.K. Ridley. The photoionisation cross section of deep-level impurities in semiconductors. *J. Phys. C*, 13:2015–2026, 1980.
- [Rid82] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors*. Oxford University Press, 1982.
- [RMC96] J.R. Reitz, F.J. Milford, and R.W. Christy. *Fundamento de la teoría electromagnética*. Addison-Wesley Iberoamericana, 4<sup>a</sup> edition, 1996.
-

- [roa00] International technology roadmap for semiconductors. 2000.
- [RR97] E. Rosenbaum and L.F Register. Mechanism of stress-induced leakage current in MOS capacitors. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 44(2):317–323, 1997.
- [RRY99] L.F Register, E. Rosenbaum, and K. Yang. Analytic model for direct tunneling current in polycrystalline silicon-gate metal-oxide-semiconductor devices. *App. Phys. Lett.*, 74(3):457–459, 1999.
- [RTB96] F. Rana, S. Tiwari, and D.A. Buchanan. Self-consistent modeling of accumulation layers and tunneling currents through very thin oxides. *Appl. Phys. Lett.*, 69(8):1104–1106, agosto 1996.
- [SAE+97] K. Sakakibara, N. Ajika, K. Eikyu, K. Ishikawa, and H. Miyoshi. A quantitative analysis of time-decay reproducible stress-induced leakage current in SiO<sub>2</sub> films. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 44(6):1002–1008, 1997.
- [SCA+94] L.T. Su, J.E. Chung, D.A. Antoniadis, K.E. Goodson, and M.I. Flik. Measurement and Modeling of Self-Heating in SOI NMOSFETs. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 41(1):69–75, 1994.
- [Sch98] A. Schenk. *Advanced Physical Models for Silicon Device Simulation*. Springer-Verlag, 1998.
- [SDS84] F. Stern and S. Das Sarma. Electron Energy Levels in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As Heterojunctions. *Phys. Rev. B*, 30(2):840–848, 1984.
- [SFTH00] M. Städele, B. Fischer, B.R. Tuttle, and K. Hess. Influence of Defects on Elastic Gate Tunneling Currents Through Ultrathin SiO<sub>2</sub> gate oxides: predictions from microscopic models. *Superlattices Microstruct.*, 28(5/6):517–524, 2000.
- [SFTH02] M. Städele, B. Fischer, B.R. Tuttle, and K. Hess. Resonant Electron Tunneling Through Defects in Ultrathin SiO<sub>2</sub> Gate Oxides in MOSFETs. *Solid-State Electr.*, 46:1027–1032, 2002.

- 
- [SGSH02] P. Su, K.I. Goto, T. Sugii, and C. Hu. Enhanced Substrate Current in SOI MOSFETs. *IEEE Electr. Dev. Lett.*, 23(5):282–284, 2002.
- [SH67] F. Stern and W.E. Howard. Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit. *Phys. Rev.*, 163:816–835, 1967.
- [SH97] A. Schenk and G. Heiser. Modeling and simulation of tunneling through ultra-thin gate dielectrics. *J. Appl. Phys.*, 81(12):7900–7908, 1997.
- [SH99] M. Shoji and S. Horiguchi. Electronic structures and phonon-limited electron mobility of double-gate silicon-on-insulator si inversion layers. *J. Appl. Phys.*, 85(5):2722–2731, 1999.
- [Sha75] K.V. Shalimova. *Física de los semiconductores*. Ed. Mir, 1975.
- [SHF84] J.G. Simmons, F.L. Hsueh, and L. Faraone. Two-carrier conduction in MOS tunnel-oxides II-theory. *Solid-State Electron.*, 27:1131, 1984.
- [SS86] E. Suzuki and D.K. Schroder. Carrier conduction in ultrathin nitrided oxide films. *J. Appl. Phys.*, 60(10):3616–3621, 1986.
- [Ste77] F. Stern. Effect of a thin transition layer at a Si-SiO<sub>2</sub> interface on electron mobility and energy levels. *Solid-St. Comm.*, 21:163–166, 1977.
- [Ste78] F. Stern. Image potencial near a gradual interface between two dielectrics. *Phys.Rev.B*, 17(12):5009–5015, 1978.
- [STH01] M. Städele, B.R. Tuttle, and K. Hess. Tunneling Through Ultrathin SiO<sub>2</sub> Gate Oxides from Microscopic Models. *J. Appl. Phys.*, 89(1):348–363, 2001.
- [SWJ+98] W-K. Shih, E.X. Wang, S. Jallepalli, F. Leon, C.M. Maziar, and A.F. Taschjr. Modeling gate leakage current in nMOS structures due to
-

- tunneling through an ultra-thin oxide. *Solid-St. Electr.*, 42(6):997–1006, 1998.
- [Sze81] S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley and Sons, 1981.
- [T<sup>+</sup>98] S. Thompson et al. MOS scaling: Transistor challenges for the 21 st century. *Intel Technology Journal Q3'98*, 1998.
- [T<sup>+</sup>01] S. Thompson et al. An Enhanced 130 nm Generation Logic Technology Featuring 60 nm Transistors Optimized for High Performance and Low Power at 0.7 - 1.4 V. In *IEDM Tech. Digest.*, pages 257–260, 2001.
- [TBC<sup>+</sup>97] Y. Taur, D.A. Buchanan, W. Chen, D.J. Frank, K.E. Ismail, S. Lo, G.A. Sai-Halasz, R.G. Viswanathan, H.C. Wann, and S.J. Wind. CMOS scaling into the nanometer regime. *Proc. IEEE*, 85(4):486–504, 1997.
- [TKSO95] A. Toriumi, J. Koga, H. Satake, and A. Ohata. Performance and reliability concerns of ultra-thin SOI and ultra-thin gate oxide MOSFETs. In *IEDM-95 Tech. Digest.*, pages 847–468, 1995.
- [TKT97] S. Takagi, J. Koga, and A. Toriumi. Subband Structure Engineering for Performance Enhancement of Si MOSFETs. In *IEDM Tech. Dig.*, pages 219–222, 1997.
- [TYT99a] S. Takagi, N. Yasuda, and A. Toriumi. A New I-V Model for Stress-Induced Leakage Current Including Inelastic Tunneling. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 46(2):348–354, 1999.
- [TYT99b] S. Takagi, N. Yasuda, and A. Toriumi. Experimental evidence of inelastic tunneling in stress-induced leakage current. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 46(2):335–341, 1999.
- [VBG98] D. Vuillaume, A. Bravaix, and D. Goguenheim. Hot-Carrier Injections in SiO<sub>2</sub>. *Microelectron. Reliab.*, 38(1):7–22, 1998.



- [Wei82] Z.A. Weinberg. On tunneling in metal-oxide-silicon structures. *J. Appl. Phys.*, 53(7):5052–5056, 1982.
- [Wet00] A. Wettstein. *Quantum Effects in MOS Devices*. PhD thesis, ETH Zürich, 2000.
- [WH76] Z.A. Weinberg and A. Hartstein. Photon assisted tunneling from aluminium into silicon dioxide. *Solid State Communications*, 20:179–182, 1976.
- [WH83] Z.A. Weinberg and A. Hartstein. Effect of Silicon Orientation and Hydrogen Anneal on Tunneling from Si Into SiO<sub>2</sub>. *J. Appl. Phys.*, 54(5):2517–2521, 1983.
- [WKWV94] J. Wang, N. Kistler, J. Woo, and C.R. Viswanathan. Mobility-field behaviour of fully depleted SOI MOSFETs. *IEEE Electr. Dev. Lett.*, 15(4):117–119, 1994.
- [WSSF97] A. Wettstein, A. Schenk, A. Scholze, and W. Fichtner. The influence of localized states on gate tunnel currents - modeling and simulation. *SISPAD*, pages 101–104, 1997.
- [WV87] T. Weil and B. Vinter. Equivalence between resonant tunneling and sequential tunneling in double-barrier diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 50(18):1281–1283, 1987.
- [WZLH98] T. Wang, N-K. Zous, J-L. Lai, and C. Huang. Hot Hole Stress Induced Leakage Current (SILC) Transient in Tunnel Oxides. *IEEE Elect. Dev. Lett.*, 19(11):411–413, 1998.
- [YHHW99] N. Yang, W.K. Henson, J.R. Hauser, and J.J. Wortman. Modeling Study of Ultrathin Gate Oxides Using Direct Tunneling Current and Capacitance-Voltage Measurements in MOS Devices. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 46(7):1464–1470, 1999.

- [YOMK97] A. Yokozawa, A. Oshiyama, Y. Miyamoto, and S. Kumashiro. Oxygen Vacancy with Large Lattice Distorsion as an Origin of Leakage Currents in SiO<sub>2</sub>. In *IEDM Tech. Dig.*, pages 703–706, 1997.
- [ZTN94] J.H. Zheng, H.S. Tan, and S.C Ng. Theory of non-radiative capture of carriers by multiphonon processes for deep centres in semiconductors. *J. Phys.-Condens Matter.*, 6(9):1695, 1994.



Biblioteca Universitaria de Granada



01052464

*A Milagros, a mis padres y a mis hermanos*