

栅氧化层介质经时击穿的逾渗模型^{*}

马仲发 庄奕琪 杜 磊 包军林 李伟华

(西安电子科技大学微电子研究所, 西安 710071)

(2002 年 8 月 7 日收到 2002 年 12 月 13 日收到修改稿)

在研究了 MOSFET 栅氧化层介质经时击穿物理机制的基础上, 提出了氧化层击穿的逾渗模型. 认为氧化层的击穿是 E' 心和氧空位等深能级缺陷产生与积累, 并最终形成电导逾渗通路的结果. 指出在电场作用下, 氧化层中产生深能级缺陷, 缺陷形成定域态, 定域态的体积与外加电场有关. 随着应力时间的增长, 氧化层中的缺陷浓度增大, 定域态之间的距离缩小. 当定域态之间的距离缩小到一个阈值时, 定域态之间通过相互交叠形成逾渗通路, 形成扩展态能级, 漏电流开始急剧增大, 氧化层击穿.

关键词: 栅氧化层, TDDB, 逾渗, 模型

PACC: 7360H, 7220J, 7155, 0500

1. 引 言

薄栅氧化层的可靠性是 MOS 集成电路最重要的可靠性问题之一^[1,2]. 通过改进工艺、原材料, 以及采用小面积样品, 尽量减小针孔等随机缺陷, 使栅氧化层的击穿场强达到了 11 MV/cm 的本征击穿场强. 在超薄 SiO₂ 层中, 击穿场强可高达 16.4—30 MV/cm^[3,4]. 但介质经时击穿(TDDB)问题, 却变得越来越重要了. 有关氧化层 TDDB 问题的研究很多, 其中最受重视的是氧化层的 TDDB 寿命. 在 20 世纪 70 年代后期, 根据实验数据, 有人提出了关于栅氧化层 TDDB 寿命拓展的经验公式^[5-7]

$$\ln(\text{TF}) \propto \frac{\Delta H_0^*}{k_B T} - \gamma E_{\text{ox}}, \quad (1)$$

式中 TF 为中期寿命, ΔH_0^* 为栅氧化层 TDDB 激活焓, T 为温度, k_B 为玻尔兹曼常数, γ 为电场加速因子, E_{ox} 为氧化层电场强度.

针对上述经验公式, 曾经提出了多种理论模型. 最具代表性的就有两种模型. 一种建立在偶极子与电场作用基础上的是 E 模型^[8], 认为氧化层的退化与击穿实际上是电场作用的结果, 由缺陷的产生和积累决定. 另一种模型是建立在电子 Fowler-Nordheim 隧穿注入基础上的 $1/E$ 模型^[9], 认为氧化层击穿是由空间电荷积累造成的, 并认为击穿所需

的总俘获空穴电荷量一定. 根据两种模型, 分别推导出氧化层寿命与电场强度的两种关系式.

E 模型

$$\ln(\text{TF}) \propto \frac{Q_1}{k_B T} - \gamma E_{\text{ox}}, \quad (2)$$

$1/E$ 模型

$$\ln(\text{TF}) \propto \frac{Q_2}{k_B T} - G(1/E_{\text{ox}}). \quad (3)$$

(2)(3) 式中 γ 和 G 分别为两种模型中的电场加速因子, Q_1 和 Q_2 是两个过程的激活能. 以上两种模型, 均能在一定电场强度范围内较好地拟合实验数据, 即 E 模型在低电场强度(不高于 9 MV/cm)范围与 TDDB 实验数据拟合较好, 而 $1/E$ 模型在高电场强度(高于 9 MV/cm)范围与 TDDB 实验数据拟合较好. 但两个模型都不能在整个电场强度范围对 TDDB 实验数据进行很好的拟合. 因此这两种模型之争一直在持续. 到目前为止, 关于栅氧化层 TDDB 过程中, 哪种缺陷是主导缺陷? 缺陷的产生和累积规律如何? 以及氧化层击穿是如何触发的? 这些问题一直还没有定论.

根据逾渗理论, 我们认为氧化层击穿过程中, 氧空位和 E' 心才是主导缺陷^[8], 它们在 SiO₂ 禁带中形成定域态^[10], 定域态的体积与外加电场有关, 外加电场越大, 定域态体积也越大. 随着应力时间的增长, 氧化层中的缺陷浓度增大, 相邻定域态之间的平

^{*} 国家自然科学基金(批准号 69671003)资助的课题.

均距离缩小,当相邻定域态之间的距离缩小到一个阈值时,定域态之间通过相互交叠形成逾渗通路,在 SiO₂ 禁带形成扩展态能级,这时电子通过该扩展态能级导电,栅氧化层漏电流开始急剧增大,氧化层表现为击穿。

2. 栅氧化层 TDDB 的逾渗模型

2.1. 缺陷的产生机理

图 1 所示是 SiO₂ 的基本结构单元,其中, O—Si—O 键平均配位数为 4,键强度大,键角始终保持在 109°。两个相邻四面体的角上形成的 Si—O—Si 键平均配位数为 2,键强度较弱,键角在 120°到 180°之间变化^[11],自由态键角为 144°。电场作用下, SiO₂ 中将发生多种反应,在氧化层中产生多种缺陷。按其所处位置可以分为界面陷阱和氧化层体陷阱,而后者则又可按其在禁带中的位置,分为浅能级陷阱和深能级陷阱。在氧化层的退化过程中,对击穿有重要贡献的不是界面陷阱,也不是氧化层浅能级陷阱,而是氧化层中的深能级陷阱(E' 心和氧空位^[12])。它们的生成反应如(4) (5)式所示^[13,14],反应过程如图 2、图 3 所示。

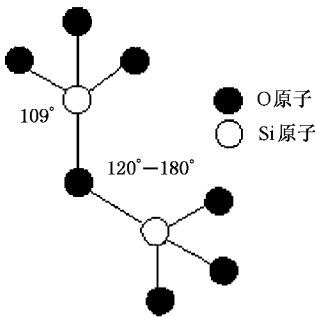


图 1 a-SiO₂ 中的局部四面体结构

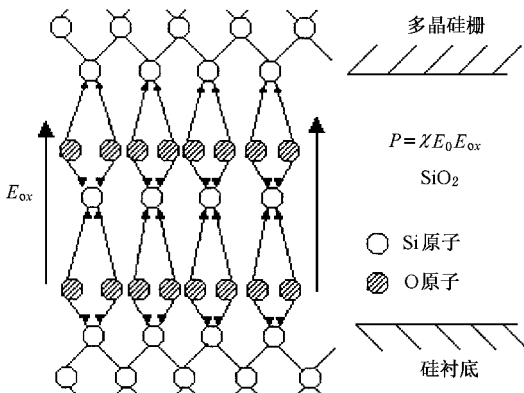


图 2 电场作用下 Si—O—Si 断键反应过程示意图

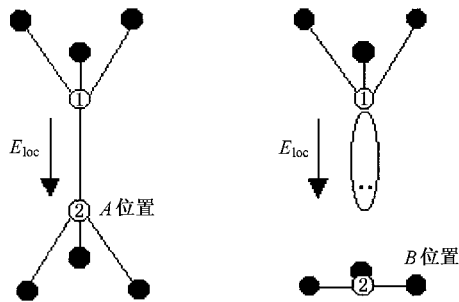
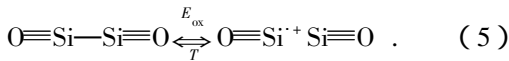
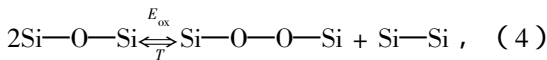


图 3 电场作用下 Si—Si 断键反应过程示意图



(4)式的反应产生氧空位,它的激活能为

$$\Delta H^{*} = \Delta H_0^{*} - aE_{\text{ox}}, \quad (6)$$

式中 ΔH_0^{*} 为无电场下的激活能, a 为有效电偶极矩。研究表明, SiO₂ 中应变的 Si—O 键起空穴陷阱的作用,可以俘获氧化层中的空穴。而且,一旦 Si—O 键俘获了一个空穴,就成了带正电的荷电中心。而空穴在其附近(小于 0.5 nm)所产生的电场非常大(高于 15 MV/cm)这时断键所需要的激活能 ΔH^{*} 将变得很小^[14]。这样该反应将大大加速。在高场强情况下,由于氧化层中的空穴流密度相对较大,因此(4)式的反应主要由俘获空穴催化断键过程所主导。相反,在低电场情况下,由于氧化层中的空穴密度相对较小,这时(4)式的反应由电场与偶极子作用所主导。

(5)式的反应产生 E' 心,它的激活能为

$$\Delta H = \Delta H_0 - p \cdot E_{\text{loc}}, \quad (7)$$

式中 ΔH_0 为无电场下的激活能, p 为 Si—O 键的有效偶极矩, E_{loc} 为氧化层中的局部电场。由于 Si—Si 键(即氧空位)为电子陷阱,一旦俘获了电子并吸收了电子放出的能量, Si—Si 键断键所需要的能量也大大降低,因此这时俘获电子对该反应也起着催化作用^[14]。同样,在高电场情况下,通过 F-N 隧穿效应注入氧化层的电子浓度很大,这一反应过程就会由俘获电子催化 Si—Si 键断键机制所主导。在低电场情况下,注入氧化层的电子浓度不大,则这一反应过程主要由电场增强的 Si—Si 键断键机制所主导。

根据以上反应,氧化层中的 O 空位和 E' 心的浓度可表示为

$$\frac{dn_j(x,y,z,t)}{dt} = -k_j \cdot n_j(x,y,z,t), \quad (8)$$

式中 $n_j(t)$ 为第 j 种缺陷的浓度, k_j 为断键过程的反应速率常数. k_j 的表达式如下:

$$k_j = \nu_j^0 \exp\left(-\frac{(\Delta H_0)_j - a \cdot E_{ox}}{k_B T}\right), \quad (9)$$

这里 ν_j^0 为反应前应变键与晶格相互作用的频率, $(\Delta H_0)_j$ 为无电场作用下的第 j 种断键形成所需要的激活能. 是否存在载流子催化过程, 会使 $(\Delta H_0)_j$ 的值相差很大. 因此缺陷产生将由外加电场和注入氧化层中的载流子浓度两种因素中的相对强者所控制.

2.2. 陷阱形成能态

在氧化层中, 会生成多种缺陷类型, 如: 应变的 Si—O, Si—Si 键和 Si 的悬挂键等. 它们在氧化层中形成定域态. 其中, 应变的 Si—O 键在 SiO₂ 禁带中靠近价带顶的地方形成浅能级, 起空穴陷阱的作用. Si—Si 键(即氧空位)起电子陷阱的作用. 而 E' 心在 SiO₂ 禁带中央接近费米能级的地方形成深能级陷阱, 既可以作为电子陷阱, 也可以作为空穴陷阱. 它对栅氧化层的击穿起着重要的作用. 无定形 SiO₂ 的能带结构如图 4 所示. 这里我们假定这些定域态在 SiO₂ 禁带中随机均匀分布. 其中短线表示缺陷形成的定域态. 在电场作用下, 电子通过隧穿效应或者热激发在这些陷阱能级之间定向迁移形成电导, 过程如图 5 所示.

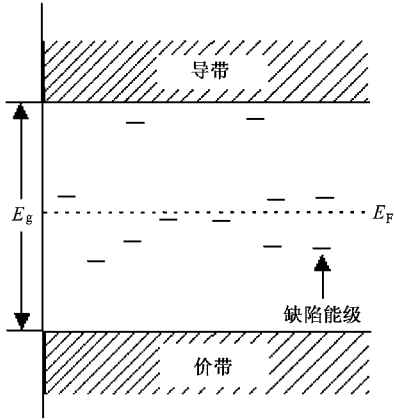


图 4 无定形 SiO₂ 的能带图(短横线表示缺陷形成的定域态)

2.3. 定域态的扩展化

定域态与扩展态之间的转变与逾渗之间的关系已经讨论很多年了^[15]. Anderson 于 1958 年在其“某

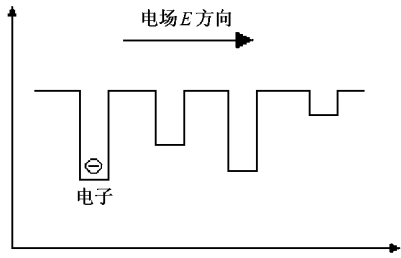


图 5 电场作用下, 电子在定域态之间定向跳跃

些无序点阵中不存在扩散”的论文^[16]中, 首先提出了波函数定域化的概念. 指出在氧化层中的一些陷阱上, 电子的波函数 ψ_E 是定域化的. 电子的波函数随着距离 r 的增加很快地衰减. 这种被定域化的电子态波函数的形式如下:

$$\psi(r) = \sum_m A_m \phi(r - R_m) \exp(-ar), \quad (10)$$

即

$$\psi_E \propto \exp(-ar). \quad (11)$$

在无定形 SiO₂ 中, 低场强下的定域态可以用图 6 来描述. 图中圆圈代表定域态的范围. 宏观上, 它们随机均匀分布. 由于波函数的玻尔半径比晶格常数大, 圆圈所覆盖的陷阱能级的波函数可以相互覆盖. 当陷阱密度足够大, 这些波函数之间的交叠程度就会很大, 这时将出现一个逾渗通路. 与之相对应, 在禁带中会出现一个扩展的陷阱能级. 对氧化层的漏电流的增加起主导作用. 电子在定域态之间跳跃, 在不同方向上的概率近似相同. 但在高场强下, 电子在不同方向上跳跃的概率将会差别很大. 这时定域态的形状可以用椭圆来形象地描述, 如图 7 所示. 与图 6 中的圆相比, 在图 7 中定域态具有更大的面积. 这时, 圆心变为椭圆的一个焦点. 电场越大, 椭圆的面积也越大. 而且电子沿着各个方向跳跃的概率不同, 沿着电场方向跳跃的概率最大. 最终, 椭圆之间将会产生足够的交叠, 从而形成一个逾渗通路. 即当定域态浓度较低时, 高电场情况下出现扩展态的概率要远大于低电场情况下的概率. 在 SiO₂ 中, 电场强度有可能很大(高于 6 MV/cm), 这时电子在定域态之间迁移的概率将大大增大. 因此, 可以肯定在电场作用下 SiO₂ 的能带结构有可能发生变化.

与逾渗理论中的逾渗阈值^[17]相对应, 我们可以认为, 当电子在定域态之间的迁移概率 p 达到一定值时, 如: $p = 0.1 \sim 1$, 这两个定域态就已经连通了. 当相邻定域态之间都连通时, 介质表现为击穿.

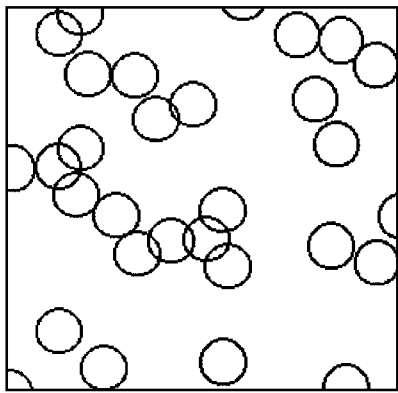


图 6 低场强下定域态的形状和分布

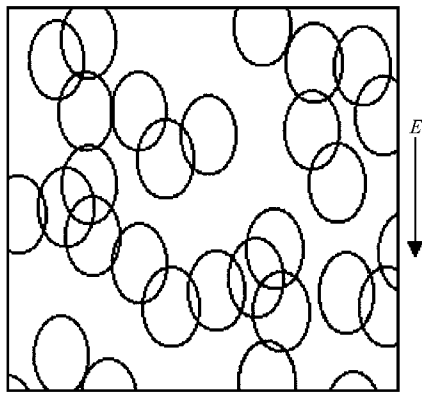


图 7 强电场下定域态的形状和分布

3. 讨 论

通过以上的机理分析,我们可以看出,氧化层的击穿过程实际上是氧化层中的深能级陷阱 E' 心和氧空位等建立和发展的过程。 Si/SiO_2 界面陷阱由于其所处位置的原因对电导的逾渗没有太大贡献,而 SiO_2 禁带中的浅能级缺陷由于与衬底 Si (或者栅多晶 Si) 的导带(或者价带)以及深能级缺陷之间交换电子(或空穴)相对较难,同样不可能对电导逾渗起作用,对栅氧化层的击穿没有太大贡献。这一点在文献 [18] 中已经从实验上进行了验证。

氧化层击穿的主导缺陷类型的确定非常有意义,可以进一步确定氧化层击穿的机理。终结长期以来栅氧化层 TDDB 模型领域的 E 和 $1/E$ 模型之争^[9,10]。图 8 所示为 E 模型和 $1/E$ 模型与 TDDB 实验数据的对比^[12]。可以看出,在低场强下 E 模型与实验数据拟合较好,而 $1/E$ 模型估计的中期寿命 TF

的值偏大;在高场强下, $1/E$ 模型与实验数据拟合较好; E 模型估计的中期寿命偏小。

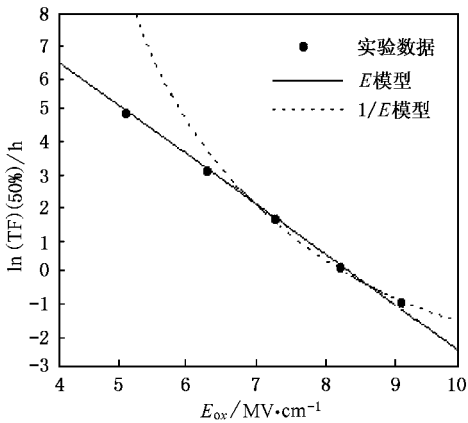


图 8 E 模型和 $1/E$ 模型与 TDDB 实验数据的对比

根据逾渗理论,我们可以作出这样的解释:低场情况下,通过 F-N 注入氧化层中的电子浓度很低,电子的能量也不是很大,因此不管是通过碰撞电离还是阳极注入,氧化层中的空穴浓度都非常小,因此定域态的产生速率主要受电场与偶极子作用机制所主导,这正是 E 模型所假设的陷阱产生机制,因此它也得到了与实验数据拟合较好的效果。

在高电场情况下,通过 F-N 注入氧化层中的电子浓度很高,电子的能量也比较大,因此通过碰撞电离或者阳极注入机制,出现在氧化层中的空穴浓度比较大,这时(4)式和(5)式的反应主要是由空穴催化和电子催化机制所主导。由于击穿时的临界陷阱浓度一定,因此所需起催化作用的空穴总电量也就是一个定值。 $1/E$ 模型用注入电量作为击穿的评价参数,在强电场情况下可以得出较好的结果,就不难理解了。

在氧化层 TDDB 过程中,随着应力的持续,氧化层中的定域态浓度不断增大,相邻定域态之间的距离不断缩短。高电场情况下,由于定域态的面积大,因此在较低的定域态浓度时就能形成逾渗通路,发生氧化层击穿。而在较低电场下,定域态的面积较小,要在较高的定域态浓度才能发生电导逾渗。因此我们可以推测,低电场情况下,介质 TDDB 击穿时的临界缺陷浓度比高电场情况下要高,即氧化层击穿触发时的临界缺陷浓度与击穿电场有关,电场高则临界缺陷浓度小,反之,电场低则临界缺陷浓度大。这个推论与 Okada 等的实验结果^[19]相符。

4. 结 论

根据 MOSFET 栅氧化层 TDDB 的逾渗模型,我们发现,栅氧化层 TDDB 的主导缺陷类型为应力期间氧化层中产生的 E' 心、氧空位等深能级缺陷.这些深能级缺陷在氧化层禁带中形成定域态.随着应

力时间的持续,定域态浓度不断增大.当定域态浓度达到一定程度,即定域态之间的距离减小到一个临界值时,电子在定域态之间的迁移概率急剧增大.这时定域态发生交叠,在氧化层禁带中出现缺陷扩展能级.扩展能级形成以后,氧化层应力导致漏电流 (SILC) 开始急剧增大,击穿开始触发.

-
- [1] Zhuang Y Q 1996 *Microelectronic Devices Application Reliability Technology* (Beijing :Electronic Industry Press) p68 (in Chinese)
[庄奕琪 1996 微电子器件应用可靠性技术(电子工业出版社)第 68 页]
- [2] Liu H X , Hao Y 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1163 (in Chinese) [刘红侠、郝 跃 2000 物理学报 **49** 1163]
- [3] Harari E 1978 *J. Appl. Phys.* **49** 2478
- [4] Liu H X , Fang J P , Hao Y 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1172 (in Chinese) [刘红侠、方建平、郝 跃 2001 物理学报 **50** 1172]
- [5] Anolick E , Nelson G 1979 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (San Francisco :IEEE) p8
- [6] Crook D 1979 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (San Francisco :IEEE) p1
- [7] Berman A 1981 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (Orlando :IEEE) p204
- [8] McPherson J W , Balgee D A 1985 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (Orlando :IEEE) p1
- [9] Chen I C , Holland S , Hu C 1985 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (Orlando :IEEE) p24
- [10] Chen K S 1987 *Introduction of Amorphous Semiconductor Physics* (Beijing : Science Press) p53 (in Chinese) [陈坤生 1987 非晶态半导体物理引论(北京 :科学出版社)第 53 页]
- [11] Helms C , Poindexter E 1994 *Rep. Prog. Phys.* **57** 791
- [12] McPherson J W , Khamankar R B 2000 *Semicond. Sci. Technol.* **15** 462
- [13] McPherson J W , Reddy V K , Mogul H C 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 25
- [14] Chioko K 1996 *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** 1540
- [15] Deutscher G , Zallen R , Adler J 1983 *Annals of the Israel Society* **5** 367
- [16] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [17] Zallen R 1983 *The Physics of Amorphous Solids* (Newton :Wiley-Inter-Science Publication) p115
- [18] Chen Y 1998 *Ph. D. Dissertation* (Ann Arbor :University of Maryland) p42
- [19] Cheung K P , Liu C T , Chang C P *et al* 1999 *IEEE International Reliability Physics Symposium* (San Diego :IEEE) p158

A physical-based percolation model for gate oxide TDDB^{*}

Ma Zhong-Fa Zhuang Yi-Qi Du Lei Bao Jun-Lin Li Wei-Hua

(*Institute of Microelectronics , Xidian University , Xi'an 710071 , China*)

(Received 7 August 2002 ; revised manuscript received 13 December 2002)

Abstract

Based on the physical mechanism of gate oxide TDDB , a percolation model for gate oxide degradation was brought forward , in which the occurrence and build up of deep energy-level defects , such as E' center and oxygen vacancy were considered to be the right cause of oxide breakdown . It was pointed out that , during TDDB the stressed defects were produced in the oxide , which form local states in oxide forbidden gap . And the volume of these local states is directly proportional to the external electric field , especially when the field strength is high enough . With the by-pass of stressing time , the concentration of defects in the oxide grew continually . As an effect , the distance between neighboring local states become shorter . So , hopping or tunneling probabilities of electrons between these local states increase swiftly . As a result , a conduction path will form when the distance between neighboring local states reaches a critical value . At the same time , in terms of energy band theory , an extended energy level will form in the oxide forbidden gap . Accompanied by a rapid increase of SILC , the gate oxide undergoes breakdown .

Keywords : gate oxide , TDDB , percolation , model

PACC : 7360H , 7220J , 7155 , 0500

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.69671003) .