

# 利用 FN 电流估计薄栅 MOS 结构栅氧化层的势垒转变区的宽度

毛凌锋 谭长华 许铭真

(北京大学微电子所, 北京 100871)

**摘要:** 通过数值求解整个势垒的薛定谔方程, 发现 FN 电流公式中的  $B$  因子强烈依赖势垒的转变区的宽度, 而  $C$  因子则弱依赖于势垒的转变区的宽度。给出了一种利用 WKB 近似所得的处理电子隧穿存在转变区势垒的过程, 并得到一个 FN 电流的分析表达式。它可用来估计薄栅 MOS 结构的栅氧化层的势垒转变区的宽度。在转变区的宽度小于  $1\text{nm}$  时, 它与数值求解薛定谔方程的结果吻合得很好, 表明该方法可以用来估计势垒转变区的宽度。实验的结果表明  $B$  因子随温度有较大的变化, 这个结果验证了该方法的部分预测结果。

**关键词:** FN 电流; MOS 结构; 栅氧化层

**PACC:** 7340GK; 7340RW

**中图分类号:** TN 402      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2001)02-0228-06

## 1 引言

早在 1922 年, Lilienfeld 就观测到了电子从冷金属的场致发射现象<sup>[1]</sup>。由于当时量子力学尚未建立, 因此没有得到合理解释。1923 年至 1927 年量子力学建立。在 1926 年, 薛定谔提出了他的著名的波动方程后, 1928 年 Fowler 和 Nordheim 借助电子隧穿原理解释在外场作用下电子从冷金属的发射现象<sup>[2]</sup>: 他们对三角形势垒求解薛定谔方程, 获得了高电场下, 电子从金属向真空的反射几率, 进而求得电流密度的表达式。此表达式具有如下的形式:

$$J = \frac{q}{2\pi\hbar} \times \frac{\mu^{1/2}}{(\chi + \mu)\chi^{1/2}} F^2 e^{-4\kappa\chi^{3/2}/3F} \quad (1)$$

其中  $F$  是外加电场强度;  $J$  是电流密度;  $q$  为电子电荷量;  $\hbar$  是 Planck 常数;  $\mu$  为费米能级;  $\chi$  是发射极势垒高度。而

$$\kappa^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \quad (2)$$

$m$  是电子质量。此后, Stratton<sup>[3]</sup>, Murphy 和 Good<sup>[4]</sup> 分别研究了电子从半导体、金属向绝缘体的发射过程。在 MOS 结构的载流子注入以及超大规模集成电路的可靠性研究中, 使用更多的是由 Lenzlinger 和 Snow<sup>[5]</sup> 以及 Weinberg<sup>[6]</sup> 所给出的公式。该公式的形式为:

$$J = BF^2 \exp(-C/F) \quad (3)$$

其中  $B$  和  $C$ , Weinberg 在文献[7]中给出的形式为:

$$\begin{aligned} B &= \frac{q^3 m}{16\pi^2 \hbar m_{ox}^* q\theta} \\ &= 1.54 \times 10^{-6} \times \frac{m}{m_{ox}^*} (\text{AV}^{-2}) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} C &= \frac{3}{4} \times \frac{(2m_{ox}^*)^{1/2}}{q\hbar} q\theta^{3/2} \\ &= 6.83 \times 10^7 \left[ \frac{m^*}{m} \right] q\theta^{3/2} (\text{cm/V}) \end{aligned} \quad (5)$$

其中  $m$ 、 $m_{ox}$  分别为自由空间中电子质量和  $\text{SiO}_2$  中电子的有效质量;  $\hbar$  是约化 Planck 常数;  $q\theta$  是阴极一侧势垒高度(单位是 eV);  $F$  是  $\text{SiO}_2$  中阴极附近

毛凌锋 1971 年出生, 目前在北京大学攻读博士学位, 现主要从事小尺寸 MOS 器件中的量子效应及器件物理和可靠性物理的研究。

许铭真 1939 年出生, 教授, 主要从事小尺寸 MOS 器件特性及其表征、半导体材料可靠性物理和器件可靠性物理的研究。

谭长华 1936 年出生, 教授, 主要从事小尺寸器件物理及可靠性物理的研究。

的电场强度.

在上面的经典 FN 公式的推导过程中, 作了以下假设: 在发射极一侧, 电子系统可以用自由费米气描述; 氧化层的能带作用可以用单一的有效质量来描述; 电子的隧道穿透几率可以仅由垂直与金属/SiO<sub>2</sub> 界面的能量分量导出; 忽略镜像力作用. 当然也没有考虑转变区的影响. 本文将对存在转变区时, 重新推导 FN 公式.

## 2 存在转变区时的 FN 电流公式

下面我们利用 WKB 近似来推导存在转变区时的透射系数. 为简单起见不考虑表面的量子化, 推导如图 1 所示的结构的电子隧穿系数. 我们假定在金属/SiO<sub>2</sub> 界面的势能变化不是突变的, 而是存在一

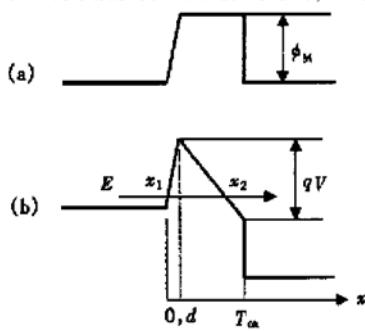


图 1 (a) 能带图, (b) 存在偏压时的能带图

FIG. 1 Energy Band Diagram Without (a)  
and with Applied Voltage (b)

个转变区, 其宽度为  $d$ , 同时假定电场在整个势垒(包括转变区)中是均匀的和电子的垂直方向的能量为  $E$ . 首先我们来考虑势能在转变区内的变化是线性的, 即

$$U(x) = \frac{\phi_M}{d}x - qFx \quad (0 \leq x \leq d) \quad (6)$$

$$U(x) = \phi_M - qFx \quad (d \leq x \leq T_{ox}) \quad (7)$$

式中  $T_{ox}$  为势垒的厚度. 根据 WKB 近似<sup>[8]</sup>, 可得到电子的隧穿系数为:

$$D(E) = \exp \left[ -2 \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \left| \int_{x_1}^d \sqrt{\frac{\phi_M - E}{d} - qF} \right. \right. \\ \times \sqrt{x} dx + \int_d^{x_2} \sqrt{(\phi_M - E - qF)x} dx \left. \right] \quad (8)$$

式中  $x_1$  和  $x_2$  是经典转向点, 通常入射电子的动能比较小, 因此为简单起见, 这里我们不妨假定经典

转向点  $x_1$  与势垒转变区的起始点(本文中我们始终是取该起始点为坐标原点)重合. 积分是沿着势垒变化的路径积分, 其中:

$$\int_0^d \left[ \frac{\phi_M - E}{d}x - qFx \right]^{1/2} dx \\ = 2 \left[ \frac{\phi_M - E}{d} - qF \right]^{1/2} d^{3/2}/3 \quad (9)$$

$$\int_d^{x_2} (\phi_M - E - qF)x^{1/2} dx \\ = 2(\phi_M - E - qFd)^{3/2}/3qF \quad (10)$$

假定  $\phi_M - E \gg qFd$ , 则可对方程(9)、(10)进行泰勒展开, 忽略其中的高阶小量可得到如下关系式:

$$\int_0^d \left[ \frac{\phi_M - E}{d}x - qFx \right]^{1/2} dx \approx 2(\phi_M - E)^{1/2}d/3 \quad (11)$$

$$\int_d^{x_2} (\phi_M - E - qF)x^{1/2} dx \\ \approx 2(\phi_M - E)^{3/2}/3qF - (\phi_M - E)^{1/2}d \quad (12)$$

由此, 可得到存在势垒转变区时, 电子隧穿系数的近似表达式为:

$$D(E) = \exp \left[ -\frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \left| -\frac{(\phi_M - E)^{1/2}d}{3} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2(\phi_M - E)^{3/2}}{3qF} \right| \right] \quad (13)$$

(13) 式可进一步改写为:

$$D(E) = \exp \left[ \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \times \frac{(\phi_M - E)^{1/2}d}{3} \right] D_{FN} \quad (14)$$

式中  $D_{FN}$  为金属/SiO<sub>2</sub> 界面的势能变化是突变时, 即无转变区时的电子隧穿系数:

$$D_{FN} = \exp \left[ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \times \frac{(\phi_M - E)^{3/2}}{qF} \right] \quad (15)$$

前面我们已假定  $\phi_M - E \gg qFd$ , 因此  $\phi_M \gg W$  也成立, 所以(14)式第一项中电子能量的作用, 可得到如下表达式:

$$D(E) = D_{FN} \exp \left[ \frac{2d\sqrt{2m^*\phi_M}}{3\hbar} \right] \quad (16)$$

根据经典 FN 电流公式的推导过程, 我们可得到存在转变区时的隧穿电流密度为:

$$J = J_{FN} \exp \left[ \frac{2d\sqrt{2m^*\phi_M}}{3\hbar} \right] = B_1 \exp \left[ -\frac{C}{F} \right] \quad (17)$$

式中:

$$B_1 = B \exp \left[ \frac{2d\sqrt{2m^*\phi_M}}{3\hbar} \right] \quad (18)$$

由于在上面的推导中, 大多采取一级近似, 因此不妨在(18)式中加入一个修正因子  $\alpha$ .

$$B_1 = B \exp \left| \alpha \frac{2d \sqrt{2m^* \phi_1}}{3\hbar} \right| \quad (19)$$

这里,  $B$  是无转变区时, 经典 FN 电流公式中的因子, 它的表达式为(4)式. 从(18)式我们可看出对于存在势垒转变区时,  $B$  因子将随转变区的宽度变化而剧烈变化. 我们试举一例, 以文献[9]中的结构为例: 电子的有效质量为  $m^* = 0.85m$ , 势垒的高度为  $\phi = 3.5\text{eV}$ . 而 Maserjian 等人<sup>[5]</sup>观察实验得到的  $B$  因子是利用 WKB 近似得到的值的 7 倍. 若修正因子  $\alpha$  为 1, 则由式(19)我们可知只要转变区的宽度为  $0.33\text{nm}$ , 则存在转变区时的  $B$  因子将是不存在转变区时的值的 7 倍.

如果势能变化在转变区内是抛物线型的变化趋势, 如下式所示:

$$U(x) = \frac{\phi_1}{d^2 x^2} - eFx \quad (0 \leq x \leq d) \quad (20)$$

根据前面完全相同的推导步骤, 可得到:

$$D(E) = D_{FN} \exp \left| \frac{d \sqrt{2m^* \phi}}{\hbar} \right| \quad (21)$$

考虑到由在推导过程中的一级近似, 与前面类似, 引入修正因子  $\alpha$ , 则可得到隧穿电流密度为:

$$J = J_{FN} \exp \left| \alpha \frac{d \sqrt{2m^* \phi}}{\hbar} \right| = B_1 \exp \left| - \frac{C}{F} \right| \quad (22)$$

仍然以文献[9]中的结构为例, 若修正因子  $\alpha$  为 1, 由式(22)对势能在转变区以抛物线形式变化时, 转变区的宽度为  $0.22\text{nm}$  就有存在转变区时的  $B$  因子将是不存在转变区时的值的 7 倍的结果. 这两个值与 Maserjian 等人在后面得到的转变区宽度的值  $0.26\text{nm}$  非常接近<sup>[10]</sup>. 这暗示我们或许可用这种方法来研究转变区内的势能变化. 为了验证这种方法的可行性, 下面我们将介绍数值求解薛定谔方程的一个方法. 并将数值求解的结果和这种方法的结果进行比较.

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + S_j) \exp[-i(k_{j+1} - k_j)] & (1 - S_j) \exp[-i(k_{j+1} + k_j)] \\ (1 - S_j) \exp[i(k_{j+1} + k_j)] & (1 + S_j) \exp[i(k_{j+1} - k_j)] \end{bmatrix} \quad (28)$$

式中:

$$S_j = \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \times \frac{k_j}{k_{j+1}} \quad (29)$$

### 3 数值求解薛定谔方程

对于一个任意形状势垒的电子隧穿系数, 可利用平面波函数方法求解<sup>[11]</sup>, 即将势垒离散化为  $N$  个矩形势垒片断, 利用阶梯状函数来近似势垒和有效质量, 如图 2 所示.

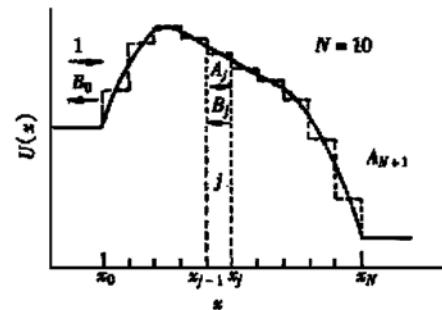


图 2 用阶梯函数近似势垒  $U(x)$

FIG. 2 Potential Barrier Approximate by Step Function

对于区间  $x_{j-1} < x < x_j$  内, 势垒和有效质量可以近似表示成如下形式:

$$U(x) = U_j = [x_{j-1} + x_j]/2 \quad (23)$$

$$m^*(x) = m_j^* = m^*(x_{j-1} + x_j)/2 \quad (24)$$

因此, 在第  $j$  个区间的波函数  $\Psi_i(x)$  具有平面波函数的形式, 为:

$$\Psi_i(x) = A_j \exp(i k_j x) + B_j \exp(-i k_j x) \quad (25)$$

其中

$$k_j = \sqrt{2m_j^*(E - U_j)}/\hbar \quad (26)$$

由  $x_j$  处的边界条件, 容易导出  $A_j, B_j$  与  $A_{j+1}, B_{j+1}$  之间的关系:

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} \quad (27)$$

其中  $M_j$  是一个  $2 \times 2$  的复数矩阵, 它有四种形式, 其具体形式依赖于第  $j$  个区段( $x_{j-1} < x < x_j$ )和第  $j+1$  个区段( $x_j < x < x_{j+1}$ )的形状:

因此, 根据边界条件, 可以得到整个势垒上的传输方程:

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = M_0 \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M_0 M_1 \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \cdots = M \begin{bmatrix} A_{K+1} \\ B_{K+1} \end{bmatrix} \quad (30)$$

式中  $M$  是  $2 \times 2$  的复数矩阵:

$$M = \prod_0^N M_i \quad (31)$$

由于势垒右侧只有出射波, 故  $b_{N+1} = 0$ , 且不妨设  $a_{N+1} = 1$ , 透射系数  $T$  定义为透射波的几率流密度与入射波的几率流密度之比, 因此:

$$T = \frac{m_{N+1}^*}{m_0} \times \frac{k_0}{k_{N+1}} \times \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (32)$$

假定电子的透射几率仅仅依赖于电子垂直于势垒的波矢(相当于电子的纵向能量为  $E_x$ ), 而与波矢的横向分量无关, 则隧穿电流密度为:

$$J(E_x) dE_x = \frac{q m_0^*}{\pi^2 \hbar^3} T(E_x) \times \int_{E_x}^{\infty} [f_0(E) - f_{N+1}(E)] dE dE_x \quad (33)$$

式中  $f_0$  和  $f_{N+1}$  分别为电子在金属和半导体一侧的分布函数.

## 4 分析和讨论

由前面的(14)和(17)式知, 实际上仅需比较存在转变区时电子的透射系数和不存在转变区时的透射系数间的差别, 然后即可根据 FN 电流公式的推导步骤, 推导出  $B$  因子的相应变化. 图 3 显示了数

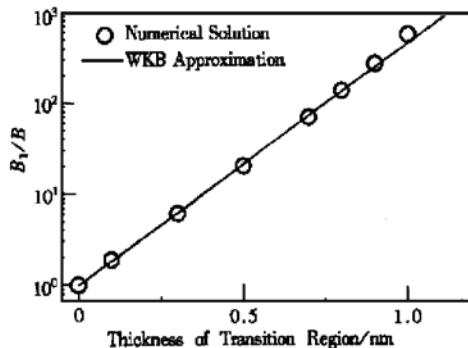


图 3 数值求解不同宽度转变区  $B$  因子的值相对于无转变区的值的比率和 WKB 近似下结果的比较

FIG. 3 Factor  $B$  Versus Thickness of Transition Region

值求解不同宽度的转变区的  $B$  因子的值相对于无转变区的值的比率以及采用 WKB 近似得到的结

果, 从图中可看出  $B$  因子确实随转变区的宽度变化而剧烈变化. 这里的  $B$  因子是指当电子隧穿没有转变区势垒的 FN 电流经典表达式中的  $B$  因子, 它仅与势垒的高度和电子的有效质量相关;  $B_1$  因子是指当电子隧穿不同宽度转变区势垒的 FN 电流经典表达式中的  $B$  因子, 它不仅仅与势垒的高度和电子的有效质量相关, 而且与转变区的宽度相关. 采用了修正因子的 WKB 近似的结果很好地符合数值求解薛定谔方程得到的结果. 表明可以用改进后的 FN 公式来评价势垒在界面转变区的宽度. 在计算中所使用的参数如下: 棚氧化层厚度  $T_{ox} = 6\text{nm}$ , 电子的有效质量  $m^* = 0.5m_0$ , 势垒高度  $\Phi_b = 3.15\text{eV}$  时, 修正因子  $\alpha = 1.4$ , 在数值计算中, 我们对势垒等分成为 10000 份矩形势垒. 图 4 显示了数值求解不同宽度的转变区得到的  $C$  因子相对于无转变区的值的变化, 从图中可看出对于  $1\text{nm}$  宽的转变区,  $C$  因子的变化不到 2%. 因此可认为在转变区厚度小于  $1\text{nm}$  时,  $C$  因子近似为常数. 这里的  $C$  因子是指当电子隧穿没有转变区势垒的 FN 电流经典表达式中的  $C$  因子, 它仅与势垒的高度和电子的有效质量相关;  $C_1$  因子是指当电子隧穿不同宽度转变区势垒的 FN 电流经典表达式中的  $C$  因子, 它与势垒的高度和电子的有效质量相关, 与转变区的宽度弱相关.

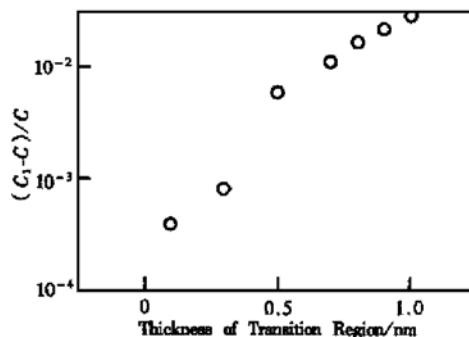


图 4 数值求解得到的不同转变区宽度下的  $C$  因子相对于无转变区的值的变化

FIG. 4 Factor  $C$  Versus Thickness of Transition Region

由于很难做到让转变区连续变化, 从前面的推导过程中, 可以注意到若我们能够改变入射时在界面的经典转向点位置, 则  $B$  因子也应产生明显变化. 此时, 由于经典转向点  $x_1$  不再与势垒转变区的起始点重合, 因此方程(9)应该变为

$$\int_1^{\frac{d}{l}} \left[ \frac{\Phi_0 - E}{d} x - qFx \right]^{1/2} dx = \frac{2}{3} \left[ \frac{\Phi_0 - E}{d} - qF \right]^{1/2} [ d^{3/2} - x_1^{3/2} ] \quad (34)$$

由此方程(17)将变为:

$$J = B_1 \exp \left[ - \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \left[ \frac{2}{3} \left[ \frac{\Phi_0 - E}{d} - qF \right]^{1/2} x_1^{3/2} \right] \right] \exp \left[ - \frac{C}{F} \right] \quad (35)$$

由方程(35), 我们可看出经典转向点  $x_1$  向氧化层中移动, 从而经典 FN 电流中的  $B$  因子将明显减小.

从图 1 可看出如果入射的电子能量发生变化, 则会引起经典转向点的位置变化, 从而会相应地引起  $B$  因子的变化. 故我们对样品采取改变温度进行电流-电压测量. 我们测试的样品为非 LDD 的 P 型 MOSFET, 利用常规 MOS 工艺制成. 其栅氧化层厚度约为 10nm. 图 5 给出了变温测量得到的  $B$  因子相对于室温时相对变化. 从图中我们发现温度仅仅增加 50K,  $B$  因子就几乎减小 2 个量级. 由此我们推断经典转向点随温度升高, 向氧化层靠近, 这部分证实了方程(35)可用来研究势垒转变区的结论. 如果我们假定这主要是由于热运动能的增加, 促使经典转向点向氧化层靠近. 则由热学的知识, 可知在温度为  $T$  的热平衡状态下, 物质分子在每一个自由度都具有相同的平均动能, 其大小为  $k_B T/2$ . 因此在我们实验条件下, 温度引起的能量变化仅仅为 4.3meV. 假设这是主要原因的话, 则说明转变区内的势能变化将是一种类似  $\delta$  函数的变化. 只有在非常接近氧化层时, 势能才会有较大的变化.

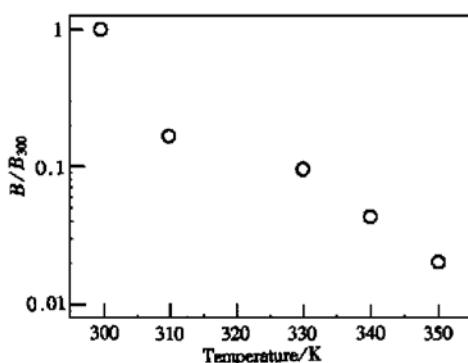


图 5 不同温度下  $B$  因子相对于室温下的值的相对变化

FIG. 5 Factor  $B$  Versus Temperature

由于  $B$  因子的变化还受到其它因素的影响, 并且方程(17)和(22)由于近似带来的不确定性, 目前的分析表达式仅仅对势垒转变区小于 1nm 时适用.

在此范围对势垒转变区估算的最大相对误差为 10% (这里的误差指理论误差, 来源于和数值计算结果相比较).

## 5 结论

本文通过数值求解整个势垒的薛定谔方程, 发现 FN 电流公式中的  $B$  因子强烈依赖势垒转变区的宽度, 而  $C$  因子则弱依赖于势垒转变区的宽度. 文中还给出了一种利用 WKB 近似所得的处理电子隧穿存在转变区势垒的过程, 并得到一个 FN 电流的分析表达式, 它可用来估计薄栅 MOS 结构的栅氧化层的势垒转变区的宽度. 并将其与数值求解薛定谔方程获得的结果进行比较, 发现在转变区的宽度小于 1nm 时, 它与数值求解薛定谔方程的结果吻合得很好. 表明该方法可以用来估计势垒转变区的宽度. 实验的结果表明温度仅仅增加 50K,  $B$  因子就几乎减小 2 个量级. 这个结果相当于入射处的经典转向点随温度升高, 向氧化层靠近. 转变区内的势能变化将可能是一种类似  $\delta$  函数的变化.

## 参考文献

- [1] J. E. Lilienfeld, Z. Physik, 1922, **23**: 66.
- [2] R. H. Fowler and L. Nordheim, Roy. Soc. Proc., 1928, **A119**: 173.
- [3] R. Stratton, Proc. Phys. Soc., 1955, **B68**: 746.
- [4] E. L. Murphy and R. H. Good, Phys. Rev., 1956, **102**: 1464.
- [5] M. Lenzlinger and E. H. Snow, J. Appl. Phys., 1969, **40**: 278.
- [6] Z. A. Weinberg, Solid State Electron., 1977, **20**: 11.
- [7] Z. A. Weinberg, J. Appl. Phys., 1982, **53**: 5052.
- [8] D. Bohm, Quantum Theory, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1963.
- [9] J. Maserjian, J. V. Sci. Technol., 1974, **11**: 996.
- [10] J. Maserjian and N. Zamani, J. Appl. Phys., 1982, **53**: 559.
- [11] Yuji Ando and Tomohiro Itoh, J. Appl. Phys., 1987, **61**: 1497.

## Estimate of Width of Transition Region of Barrier for Thin Film Insulator MOS Structure Using Fowler-Nordheim Tunneling Current

MAO Ling-feng, TAN Chang-hua and XU Ming-zhen

(Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871, China)

**Abstract:** According to the numerical solution to the Schrodinger equation, factor  $B$  is observed to depend strongly on the width of transition region of barrier, while factor  $C$  is almost independent of the width. An analytic expression about FN tunneling current has been obtained using the WKB approximation, as well as the barrier that includes a transition region, which can be applied to estimate the width of barrier transition region for the gate oxides of thin MOS structures. The result obtained being compared with that from the numerical solution to Schrodinger equation, it is found that they agree with each other very well when the width of barrier transition region is less than 1nm. It indicates this method may be used to estimate the width of barrier transition region. The experimental result also shows that  $B$  factor changes greatly with the temperature, which can partly prove the method.

**Key words:** FN current; MOS structure; gate oxide

**PACC:** 7340GK, 7340RW

**Article number:** 0253-4177(2001)02-0228-06

---

MAO Ling-feng, born in 1971, Ph. D candidate of Peking University, is engaged in study on quantum effect and device physics in small scale MOS and its reliability.

TAN Chang-hua, born in 1936, professor of Peking University, is engaged in study on device physics in small scale and its reliability.

XU Ming-zhen, born in 1939, professor of Peking University, is engaged in study on device physics in small scale and its reliability.

Received 30 December 1999, revised manuscript received 14 June 2000

© 2001 The Chinese Institute of Electronics