



Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Τμήμα Φυσικής

Ανάπτυξη προτύπου (model) για την ηλεκτρική συμπεριφορά διατάξεων MOS που βασίζονται σε οξειδία υψηλής διηλεκτρικής σταθεράς

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΤΟΥ

ΙΩΣΗΦ Ι. ΑΝΔΡΟΥΛΙΔΑΚΗ

η οποία υποβάλλεται στο Τμήμα Φυσικής
ως μέρος των υποχρεώσεων για τη λήψη

Διδακτορικού Διπλώματος

στη Φυσική

ΙΩΑΝΝΙΝΑ, ΜΑΡΤΙΟΣ 2010

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Τμήμα Φυσικής

Ανάπτυξη προτύπου (model) για την ηλεκτρική συμπεριφορά διατάξεων MOS που βασίζονται σε οξειδία υψηλής διηλεκτρικής σταθεράς

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΤΟΥ

ΙΩΣΗΦ Ι. ΑΝΔΡΟΥΛΙΔΑΚΗ

Τριμελής Επιτροπή

1. **Ε. Ευαγγέλου,** Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων (Επιβλέπων)
2. **Δ. Τσαμάκης,** Καθηγητής, Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου
3. **Γ. Αλεξίου,** Καθηγητής, Τμήμα Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής Πολυτεχνικής Σχολής Πανεπιστημίου Πατρών

Επταμελής Επιτροπή

1. **Ε. Ευαγγέλου,** Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων
2. **Δ. Τσαμάκης,** Καθηγητής, Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου
3. **Γ. Αλεξίου,** Καθηγητής, Τμήμα Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής Πολυτεχνικής Σχολής Πανεπιστημίου Πατρών
4. **Α. Δημουλάς,** Διευθυντής Ερευνών, Εργαστήριο μοριακής επιταξίας (ΜΒΕ) και ανάλυσης επιφανειών Ινστιτούτου Επιστήμης Υλικών ΕΚΕΦΕ-Δ
5. **Π. Κόκκας,** Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων
6. **Ν. Κονοφάος,** Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανικών Πληροφοριακών και Επικοινωνιακών Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου
7. **Γ. Τσιατούχας,** Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

Στους γονείς μου,

Ευχαριστίες

Η παρούσα Διδακτορική Διατριβή εκπονήθηκε στο εργαστήριο Τηλεπικοινωνιών, Ηλεκτρονικών και Εφαρμογών του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Επιβλέπων ήταν ο Επίκουρος Καθηγητής κ. Ευάγγελος Ευαγγέλου τον οποίο και ευχαριστώ θερμά, όχι μόνο για την επιστημονική καθοδήγηση και υποστήριξη στα πλαίσια της εκπόνησης του Διδακτορικού αλλά και για την πλέον των 10 ετών γενικότερη γνωριμία και συνεργασία μας.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τον Καθηγητή της Σχολής Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου κ. Δημήτριο Τσαμάκη καθώς επίσης και τον Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Πατρών κ. Γεώργιο Αλεξίου. Οι παρατηρήσεις και οι υποδείξεις τους, ως μελών της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής υπήρξαν καθοριστικές για την ολοκλήρωση της Διατριβής.

Τις ευχαριστίες μου θα ήθελα επιπλέον να εκφράσω και στα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής: Α. Δημουλά (ΕΚΕΦΕ-Δ), Π. Κόκκα (Παν. Ιωαννίνων), Ν. Κονοφάο (Παν. Αιγαίου) και Γ. Τσιατούχα (Παν. Ιωαννίνων) τα οποία με βοήθησαν στην ορθή συγγραφή της παρούσας διατριβής με τις συμβουλές τους.

Την παραμονή μου στο Εργαστήριο έκαναν πιο ευχάριστη και πιο αποδοτική οι μεταπτυχιακοί συμφοιτητές μου και φίλοι τους οποίους ευχαριστώ για την παρέα τους εντός και εκτός του Εργαστηρίου.

Σημαντική ήταν και η οικονομική βοήθεια από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας Τεχνολογίας την οποία και ευχαριστώ. Πιο συγκεκριμένα, η Διατριβή εκπονήθηκε στα πλαίσια του υποέργου 155 του ΠΕΝΕΔ 2003 και συγχρηματοδοτήθηκε κατά: 75% της Δημόσιας Δαπάνης από την Ευρωπαϊκή Ένωση - Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο, 25% της Δημόσιας Δαπάνης από το Ελληνικό Δημόσιο - Υπουργείο Ανάπτυξης - Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας και από τον Ιδιωτικό Τομέα στο πλαίσιο του Μέτρου 8.3 του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα - Γ' Κοινωνικό Πλαίσιο Στήριξης.

Πίνακας Περιεχομένων

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ	9
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	13
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	15
1.1. ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥ – ΟΞΕΙΔΙΟΥ ΗΜΙΑΓΩΓΟΥ (MOS).....	15
1.1.1. Εισαγωγή.....	15
1.1.2. Μέθοδοι και Παράμετροι Χαρακτηρισμού των Διατάξεων MOS.....	16
1.1.3. Συμπεριφορά Χωρητικότητας – Δυναμικού (C – V) μιας δομής MOS	18
1.1.4. Η Ιδανική Δομή MOS.....	21
1.1.4.1. Χαρακτηριστική Καμπύλη Χωρητικότητας – Τάσης (C-V)	25
1.1.4.2. Χαρακτηριστική χωρητικότητας – τάσης για την ιδανική δίοδο MOS.....	26
1.1.5. Η πραγματική δίοδος MOS	29
1.1.5.1. Είδη φορτίων	30
1.1.5.1.1. Φορτία στο οξειδίο	30
1.1.5.1.2. Φορτία στη διεπιφάνεια του οξειδίου με τον ημιαγωγό	31
1.1.5.2. Καταστάσεις πόλωσης στην πραγματική δίοδο.....	35
1.1.5.2.1. Επίδραση εξωτερικά επιβαλλόμενης τάσης στο δυναμικό και το φορτίο	40
1.1.5.3. Χωρητική συμπεριφορά της διόδου MOS για σήμα χαμηλής συχνότητας	45
1.1.5.4. Διασπορά της συχνότητας στη συσσώρευση	50
1.1.5.5. Διασπορά της συχνότητας στην αναστροφή για Ge.....	51
1.1.6. Σειριακή αντίσταση των διόδων MOS.....	53
1.1.7. Ισοδύναμο ηλεκτρικό πάχος (Equivalent Oxide Thickness: EOT).....	54
1.1.8. Υπολογισμός των χαρακτηριστικών παραμέτρων των πυκνωτών MOS	55
1.1.8.1. Επιφάνεια πύλης και πάχος οξειδίου	56
1.1.8.2. Υπολογισμός του μέγιστου πάχους απογύμνωσης.....	57
1.1.8.3. Υπολογισμός της συγκέντρωσης προσμίξεων Nb.....	57
1.1.8.4. Υπολογισμός του μήκους Debye	59
1.1.8.5. Υπολογισμός της χωρητικότητας σε κατάσταση επιπέδων ζωνών.....	59
1.1.8.6. Υπολογισμός της τάσης σε κατάσταση επιπέδων ζωνών	59
1.1.8.7. Υπολογισμός του ολικού φορτίου της περιοχής απογύμνωσης	60
1.1.8.8. Υπολογισμός του συνολικού διεπιφανιακού φορτίου	60

1.1.8.9.	Υπολογισμός του μόνιμου φορτίου του οξειδίου	60
1.1.8.10.	Υπολογισμός της τάσης κατωφλίου.....	61
1.1.9.	Οξείδια Υψηλής Διηλεκτρικής Σταθεράς (High-k)	61
1.2.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	63
2.	ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ ΈΛΕΓΧΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ.....	67
2.1.	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	67
2.1.1.	Ανάγκη Ανάπτυξης και Ελέγχου του Μοντέλου	67
2.2.	ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	69
2.2.1.	Βασικές Αρχές Δόμησης του Μοντέλου	69
2.2.2.	Περιγραφή του Μοντέλου για Διατάξεις Πύλης-Μετάλλου	71
2.2.2.1.	Αλγόριθμος για τον υπολογισμό της χωρητικότητας της πύλης σε καταστάσεις συσσώρευσης και ισχυρής απογύμνωσης.....	71
2.2.2.2.	Ενεργειακές στάθμες υποζωνών (subband) σε πεπερασμένα ημιτριγωνικά φρέατα.....	71
2.2.2.3.	Κατάληψη υποζωνών (subband) σταθμών σε κατάσταση συσσώρευσης και ισχυρής αναστροφής.....	75
2.2.2.4.	Φορτίο στρώματος απογύμνωσης σε ισχυρή αναστροφή.....	79
2.2.2.5.	Κάμψη των ζωνών σε κατάσταση απογύμνωσης και ασθενούς αναστροφής	80
2.2.2.6.	Δυναμικό πύλης, φορτίο και χωρητικότητα.....	80
2.2.2.7.	Μεταβάσεις μεταξύ ασθενούς - ισχυρής αναστροφής και συσσώρευσης - απογύμνωσης.....	81
2.2.3.	Αποτελέσματα C-V του μοντέλου για διατάξεις μεταλλικής πύλης.....	82
2.3.	ΣΥΝΟΨΗ	85
2.4.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	86
3.	ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ SCHRÖDINGER ΚΑΙ POISSON	91
3.1.	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	91
3.1.1.	Βασικές Εξισώσεις	93
3.2.	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ	95
3.2.1.	Διαμόρφωση της εξίσωσης Schrödinger	95
3.2.2.	Διαμόρφωση της εξίσωσης Poisson	98
3.3.	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	100
3.4.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	102
4.	ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΠΡΟΣΟΜΙΩΣΗΣ.....	103
4.1.	ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ MOS-SIM.....	103
4.2.	ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ MERLIN	104
4.2.1.	Εισαγωγή.....	104
4.2.1.1.	Προγραμματισμός σε Περιβάλλον Merlin	106
4.3.	ΔΙΑΣΥΝΔΕΣΗ MERLIN ΚΑΙ MOS-SIM	107
4.4.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	111

5.	ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ.....	113
5.1.	ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΕΣ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΚΑΙ ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ	113
5.1.1.	<i>MOS Ηλεκτρικός χαρακτηρισμός και πειραματική διάταξη.....</i>	<i>113</i>
5.1.1.1.	<i>Εισαγωγή.....</i>	<i>113</i>
5.1.1.2.	<i>Μετρήσεις Χωρητικότητας-Τάσης (C-V).....</i>	<i>116</i>
5.2.	ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΚΑΙ ΚΑΜΠΥΛΕΣ ΑΠΟΚΡΙΣΗΣ	119
5.2.1.	<i>Δείγμα 869 (Ge) non-annealed, 1 MHz</i>	<i>120</i>
5.2.2.	<i>Δείγμα 871 (Ge) annealed, 1 MHz.....</i>	<i>121</i>
5.2.3.	<i>Δείγμα 1048 (Si) annealed, 1 MHz.....</i>	<i>122</i>
	<i>Δείγμα 1048 (Si) non-annealed, 1 MHz</i>	<i>123</i>
5.2.4.	<i>Δείγμα 1075 (Si) annealed, 1 MHz.....</i>	<i>124</i>
5.2.5.	<i>Δείγμα 1075 (Si) non-annealed, 1 MHz.....</i>	<i>125</i>
5.2.6.	<i>Δείγμα 1079 (Si) annealed, 1 MHz.....</i>	<i>126</i>
5.2.7.	<i>Δείγμα 1079 (Si) non-annealed, 1 MHz.....</i>	<i>127</i>
5.2.8.	<i>Δείγμα 1079 (Si) annealed, 10 KHz</i>	<i>128</i>
5.2.9.	<i>Δείγμα 869 (Ge) annealed, 20 Hz.....</i>	<i>129</i>
5.2.10.	<i>Δείγμα 871 (Ge) annealed, 20 Hz.....</i>	<i>130</i>
5.3.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	131
6.	ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ.....	133
6.1.	ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΕΡΕΥΝΑ	133
6.2.	ΑΝΑΦΟΡΕΣ	138
7.	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	141
8.	ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΔΟΥΛΕΙΑ	143
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1: ΚΩΔΙΚΑΣ VISUAL C++	145
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2: ΚΩΔΙΚΑΣ FORTRAN.....	147
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 3: ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ LABVIEW.....	149

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η Παρούσα Διατριβή εκπονήθηκε στα πλαίσια του υποέργου 155 του ΠΕΝΕΔ 2003 στο πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών στις Σύγχρονες Ηλεκτρονικές Τεχνολογίες του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Στόχος ήταν να γραφτεί κατάλληλος κώδικας ο οποίος θα υπολογίζει τις χαρακτηριστικές χωρητικότητας – τάσης (C-V) διατάξεων MOS, ανεπτυγμένων σε υποστρώματα Πυριτίου και Γερμανίου τα οποία χρησιμοποιούν high-k διηλεκτρικά πύλης. Τα σημαντικά προβλήματα που θέλαμε να επιλύσουμε ήταν η δυνατότητα ενσωμάτωσης προγράμματος ελαχιστοποίησης παραμέτρων με αυτόματο τρόπο καθώς επίσης και να προσθέσουμε στοιχεία για τον υπολογισμό των C-V τα οποία να λαμβάνουν υπόψη το φαινόμενο του stretch-out. Αυτό έγινε δυνατό με κώδικα αυτοσυνεπούς επίλυσης των εξισώσεων Schrödinger – Poisson και διασύνδεσή του με κατάλληλο κώδικα με το λογισμικό ελαχιστοποίησης Merlin. Αξίζει να σημειωθεί ότι αντίθετα με τη χρονοβόρα χειροκίνητη προσαρμογή δεδομένων (fitting) η ελαχιστοποίηση των παραμέτρων λαμβάνει χώρα πολύ γρήγορα χωρίς να είναι απαραίτητος ο υπερβολικός περιορισμός (constrain) των μεταβλητών.

Το πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 2003 συγχρηματοδοτήθηκε κατά: 75% της Δημόσιας Δαπάνης από την Ευρωπαϊκή Ένωση - Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο, 25% της Δημόσιας Δαπάνης από το Ελληνικό Δημόσιο - Υπουργείο Ανάπτυξης - Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας και από τον Ιδιωτικό Τομέα στο πλαίσιο του Μέρους 8.3 του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα - Γ' Κοινοτικό Πλαίσιο Στήριξης.

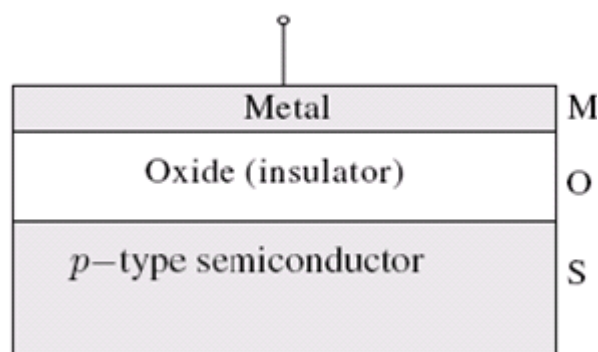
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1. Διατάξεις Μετάλλου – Οξειδίου Ημιαγωγού (MOS)

1.1.1. Εισαγωγή

Οι MOS είναι οι πιο σημαντικές δομές που χρησιμοποιούνται στα ολοκληρωμένα κυκλώματα όπως στους μικροεπεξεργαστές και τις ημιαγωγίμες μνήμες. Αποτελούν το δομικό λίθο διατάξεων όπως των τρανζιστορ επίδρασης πεδίου MOS (MOSFETs), των τρανζιστορ επίδρασης πεδίου μονωμένης πύλης (IGFETs) και διατάξεων συζευγμένου φορτίου (CCDs). Τα διαθέσιμα εμπορικά MOSFETs και CCDs κατασκευάζονται από Si/SiO₂ λόγω των καλών ιδιοτήτων που παρουσιάζει αυτός ο συνδυασμός. Για το λόγο αυτό, οι πιο πάνω δομές ονομάζονται και MOS (Metal – Oxide - Semiconductor).

Η δομή MOS φαίνεται στο επόμενο σχήμα. Αρχικά, ένα στρώμα οξειδίου (Oxide) αναπτύσσεται πάνω στον ημιαγωγό (semiconductor) και στη συνέχεια δημιουργούνται μεταλλικές επαφές (Metal) πάνω στο οξείδιο. Γενικά, ο μονωτής (insulator) μπορεί να είναι οποιοδήποτε υλικό μεγάλου ενεργειακού χάσματος. Ο κύριος σκοπός του οξειδίου είναι να μονώσει ηλεκτρικά τον ημιαγωγό από το μέταλλο.



Σχήμα 1.1: Η διατομή ενός πυκνωτή MOS. Το οξείδιο μπορεί να αναπτυχθεί πάνω στον ημιαγωγό με διάφορες τεχνικές.

1.1.2. Μέθοδοι και Παράμετροι Χαρακτηρισμού των Διατάξεων MOS

Ο ηλεκτρικός χαρακτηρισμός είναι ευρέως διαδεδομένος λόγω της σπουδαιότητας των αποτελεσμάτων του αλλά και της απλότητας των πειραματικών διατάξεων σε σύγκριση με άλλες μεθόδους. Οι παράμετροι που μελετώνται με μεθόδους ηλεκτρικού χαρακτηρισμού είναι:

- Ειδική αντίσταση
- Συγκέντρωση φορέων
- Ευκινησία φορέων
- Χρόνος ζωής φορέων
- Αντίσταση επαφών
- Φραγμοί Δυναμικού
- Ενεργό μήκος και πλάτος καναλιού
- Συγκέντρωση φορτίων σε μονωτές
- Συγκέντρωση διεπιφανειακών καταστάσεων
- Βαθιές στάθμες ατελειών

Ειδικότερα οι παράμετροι χαρακτηρισμού των διατάξεων MOS και οι μέθοδοι που αξιοποιούνται για να προσδιορισθούν και σχετίζονται με τα θέματα που πραγματεύεται η παρούσα διατριβή είναι οι εξής:

- Ευκινησία φορέων
 - Φαινόμενο Hall
 - Χαρακτηριστική Ρεύματος - Τάσης
- Χρόνος Ζωής φορέων
 - Πτώση Φωτοαγωγιμότητας

- Pulsed MOS Capacitor
- Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης
- Σειριακή Αντίσταση
 - Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης
 - Χαρακτηριστική Ρεύματος - Τάσης
- Ενεργό μήκος και πλάτος καναλιού
 - Χαρακτηριστική Ρεύματος - Τάσης
 - Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης
- Πάχος μονωτή
 - Ελλειψομετρία
 - Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης

Φορτία Μονωτή

- Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης
- Bias - Temperature stress
- Triangular voltage sweep
- Πυκνότητα διεπιφανειακών καταστάσεων
 - Χαρακτηριστική Χωρητικότητας - Τάσης
 - Χαρακτηριστική Αγωγιμότητας - Τάσης
 - Charge Pumping
 - MOSFET subthreshold current-voltage
 - DLTS

Στη συνέχεια της παρούσας ενότητας θα αναλύσουμε τη λειτουργία της πιο απλής

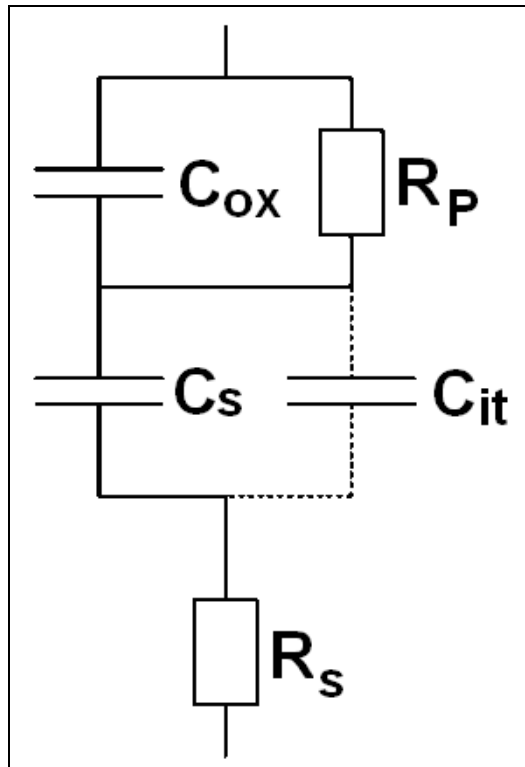
δομής MOS, τον πυκνωτή MOS. Η αντίληψη της λειτουργία της διάταξης αυτής είναι θεμελιακή για την περαιτέρω διερεύνηση των πολυπλοκότερων δομών MOS.

Την περιγραφή του MOS πυκνωτή ακολουθεί, η λεπτομερής θεωρητική ανάλυση μιας από τις βασικότερες πειραματικές μεθόδους μελέτης που χρησιμοποιούνται στον χαρακτηρισμό των υμενίων πυριτίου και επιλέχθηκε ως μέθοδος και στην εργασία που παρουσιάζεται. Αυτή είναι η χαρακτηριστική Χωρητικότητας – Τάσης.

1.1.3. Συμπεριφορά Χωρητικότητας – Δυναμικού (C – V) μιας δομής MOS

Η συμπεριφορά χωρητικότητας-δυναμικού μιας διάταξης MOS μπορεί να περιγραφεί με τη χρήση ισοδύναμου κυκλώματος που παρουσιάζεται στο σχήμα 1.2 [1.1] όπου C_{ox} είναι η χωρητικότητα του οξειδίου, C_s η χωρητικότητα του υποστρώματος, C_{it} η χωρητικότητα της διεπιφάνειας, R_s η αντίσταση σε σειρά και

$\frac{1}{R_p}$ η παράλληλη αγωγιμότητα.



Σχήμα 1.2: Ισοδύναμο κύκλωμα μιας MOS κατασκευής που περιλαμβάνει τη χωρητικότητα του οξειδίου (C_{ox}), τη χωρητικότητα του υποστρώματος (C_s), τη χωρητικότητα της διεπιφάνειας (C_{it}), την αντίσταση σε σειρά (R_s) και την παράλληλη αγωγιμότητα ($\frac{1}{R_p}$).

Η χωρητικότητα ενός πυκνωτή MOS δίνεται από τη σχέση

$$C = \frac{dQ_g}{dV_g} \quad (1.1)$$

όπου Q_g είναι το φορτίο στην πύλη και V_g η τάση στην πύλη. Βασιζόμενη στην ουδετερότητα του φορτίου $Q_g = -(Q_s + Q_{it})$ όπου Q_s το φορτίο υποστρώματος και Q_{it} το παγιδευμένο διεπιφανειακό φορτίο. Σύμφωνα με αυτό δεν υπάρχει παγιδευμένο φορτίο στο διηλεκτρικό. Το δυναμικό πύλης διανέμεται μερικώς

διαμέσου του διηλεκτρικού και μερικώς διαμέσου του υποστρώματος που είναι ημιαγωγός. Έτσι προκύπτει

$$V_g = V_{FB} + V_{OX} + \phi_s, \quad (1.2)$$

όπου V_{FB} είναι το δυναμικό επίπεδης ζώνης (flatband), V_{ox} η πτώση δυναμικού στο οξειδίο και ϕ_s το δυναμικό της επιφάνειας του ημιαγωγού οπότε η εξίσωση 1.1 γράφεται ως εξής

$$C = \frac{dQ_s + dQ_{it}}{dV_{OX} + d\phi_s} \quad (1.3)$$

Η ολική χωρητικότητα πύλης μπορεί να γραφεί ως

$$C = \frac{1}{\frac{1}{C_{OX}} + \frac{1}{C_s + C_{it}}} \quad (1.4)$$

Η χαμηλής συχνότητας χωρητικότητα του υποστρώματος δίνεται από τη σχέση [1.22]

$$C_{S,lf} = \hat{U}_s \frac{\epsilon_s \epsilon_0}{2L_{Di}} \frac{[e^{U_F}(1 - e^{-U_s}) + e^{-U_F}(e^{U_s} - 1)]}{F(U_s, U_F)} \quad (1.5)$$

όπου το αδιάστατο επιφανειακό ηλεκτρικό πεδίο F ορίζεται ως

$$F(U_s, U_F) = \sqrt{e^{U_F}(e^{-U_s} + U_s - 1) + e^{-U_F}(e^{U_s} - U_s - 1)} \quad (1.6)$$

όπου U_s και U_F είναι τα κανονικοποιημένα δυναμικά οριζόμενα ως $U_s = q\phi_s/kT$ και $U_F = q\phi_F/kT$. Το δυναμικό Fermi υπολογίζεται από τη σχέση $\phi_F = (kT/q) \ln(N_A/n_i)$ όπου N_A είναι η συγκέντρωση των δεκτών και n_i η ενδογενής συγκέντρωση στο υπόστρωμα. Το σύμβολο \hat{U}_s αποδίδεται στο δυναμικό επιφάνειας και δίνεται από

$$\hat{U}_s = \frac{|U_s|}{U_s} \quad (1.7)$$

όπου $\hat{U}_S = 1$ για $U_S > 0$ και $\hat{U}_S = -1$ για $U_S < 0$. Το εξωτερικό μήκος Debye L_{Di} ορίζεται ως

$$L_{Di} = \sqrt{\frac{\epsilon_S \epsilon_0 kT}{2q^2 n_i}} \quad (1.8)$$

και περιγράφει τη μέγιστη απόσταση στην οποία ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να επηρεαστεί από το ηλεκτρικό πεδίο ενός θετικού ιόντος.

1.1.4. Η Ιδανική Δομή MOS

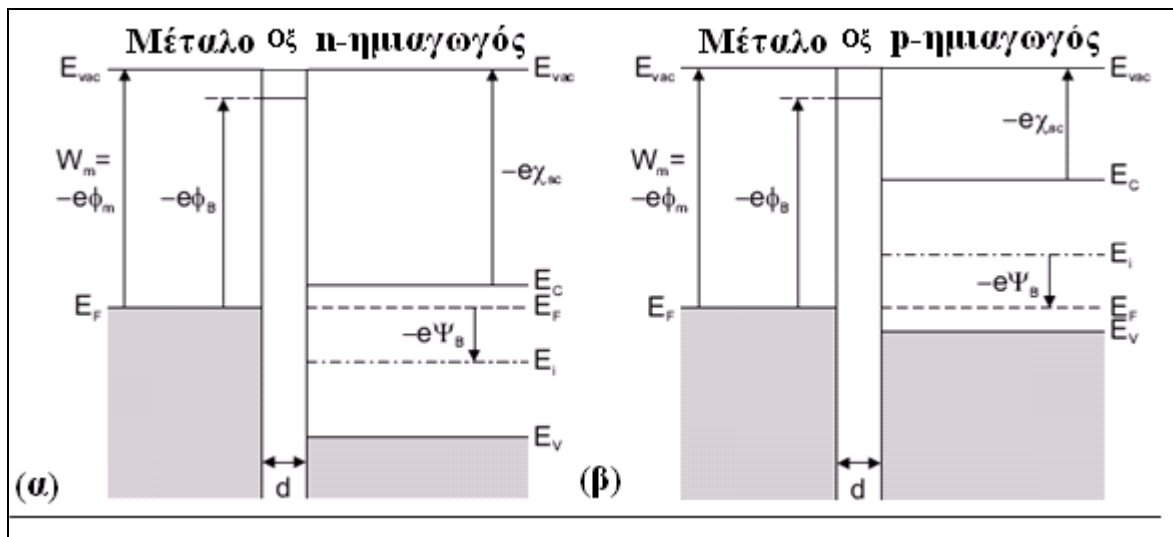
Το ενεργειακό διάγραμμα των ιδανικών δομών MOS φαίνεται στο επόμενο σχήμα. Μια δομή MOS χαρακτηρίζεται **ιδανική** όταν ικανοποιεί τις παρακάτω προϋποθέσεις:

- χωρίς εξωτερική πόλωση (συνθήκη επίπεδης ζώνης: flat band), η ενεργειακή διαφορά Φ_{ms} μεταξύ του έργου εξόδου του μετάλλου και του ημιαγωγού

$$\Phi_{ms} = \Phi_m - \left(\chi_s - \frac{E_g}{2} \pm \Psi_B \right) \quad (1.9)$$

είναι μηδέν. Τα πρόσημα '+' και '-' αναφέρονται σε p και n-τύπου ημιαγωγό αντίστοιχα. Ψ_B είναι η διαφορά μεταξύ της ενδογενούς (E_i) και της ενέργειας Fermi (E_F).

- τα μόνα φορτία που υπάρχουν, είναι αυτά που βρίσκονται στον ημιαγωγό και αυτά (αντίθετου προσήμου) που βρίσκονται στην επιφάνεια του μετάλλου κοντά στον μονωτή (δηλαδή, δεν υπάρχουν παγιδευμένα φορτία στο εσωτερικό του οξειδίου)
- δεν υπάρχει ροή ρεύματος dc μεταξύ του ημιαγωγού και του μετάλλου (η αγωγιμότητα του μονωτή είναι μηδενική).



Σχήμα 1.3: Ενεργειακό διάγραμμα ιδανικής διόδου MOS για (α) n-τύπου και (β) p-τύπου ημιαγωγό σε μηδενική πόλωση. Το πάχος του μονωτή συμβολίζεται με d .

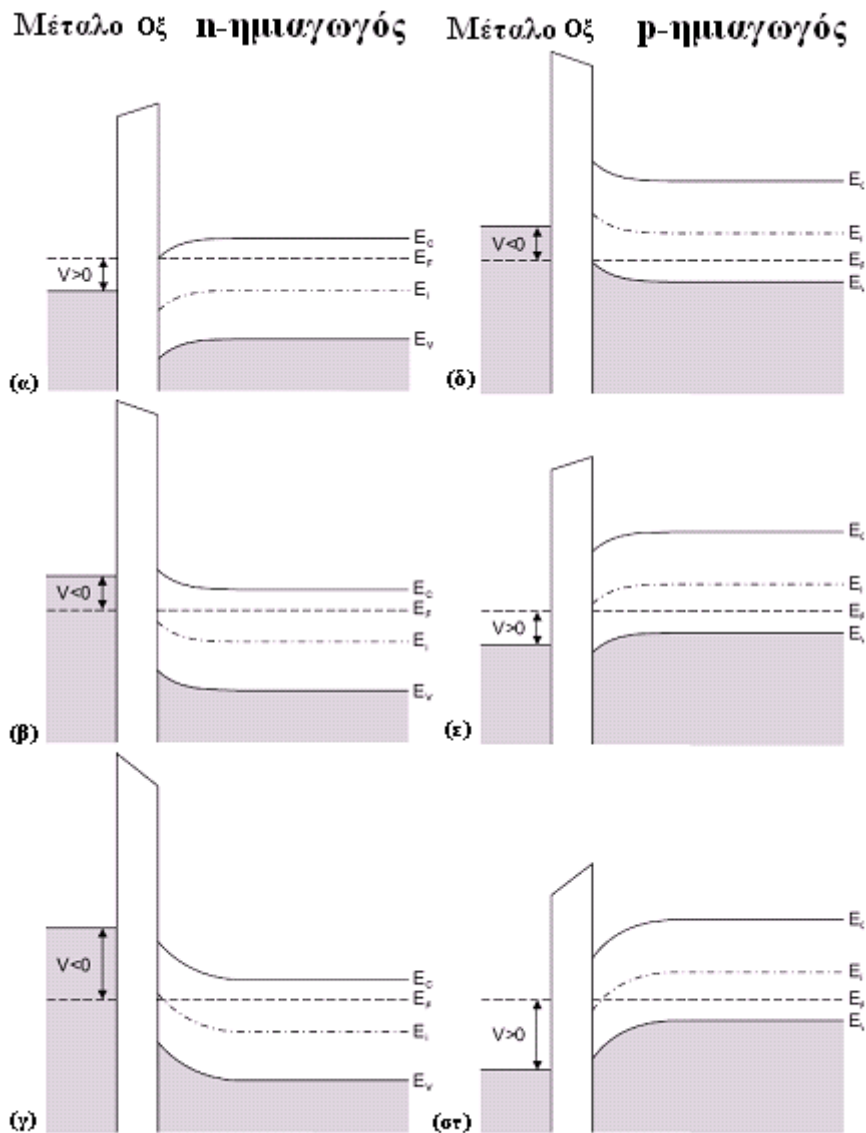
Όταν εφαρμοστεί τάση στα άκρα μιας ιδανικής διόδου MOS μπορούν να δημιουργηθούν τρεις διαφορετικές καταστάσεις φορτίου (συσσώρευση, απογύμνωση και αναστροφή φορέων) στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Αυτές φαίνονται στο σχήμα 1.4.

Στην περίπτωση του p-τύπου ημιαγωγού, όταν εφαρμοστεί αρνητική τάση στην πύλη, η ζώνη σθένους κάμπτεται προς τα πάνω και πλησιάζει προς την ενέργεια Fermi (σχήμα 1.4(δ)). Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την εκθετική αύξηση των φορέων πλειονότητας (οπές) στη διεπιφάνεια του ημιαγωγού – οξειδίου. Αυτή είναι η κατάσταση **συσσώρευσης** φορέων.

Όταν εφαρμοστεί μικρή θετική τάση στο μέταλλο, η ζώνη σθένους κάμπτεται προς τα κάτω και απομακρύνεται από την ενέργεια Fermi (σχήμα 1.4(ε)). Σε αυτή την περίπτωση, μειώνεται η συγκέντρωση των οπών ενώ αυξάνεται η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων. Ωστόσο, και οι δύο συγκεντρώσεις είναι μικρές. Η κατάσταση αυτή ονομάζεται **απογύμνωση** φορέων.

Τέλος, όταν εφαρμοστεί μια μεγάλη θετική τάση στην πύλη, η ζώνη σθένους κάμπτεται ακόμα περισσότερο προς τα πάνω με αποτέλεσμα η ενέργεια Fermi να

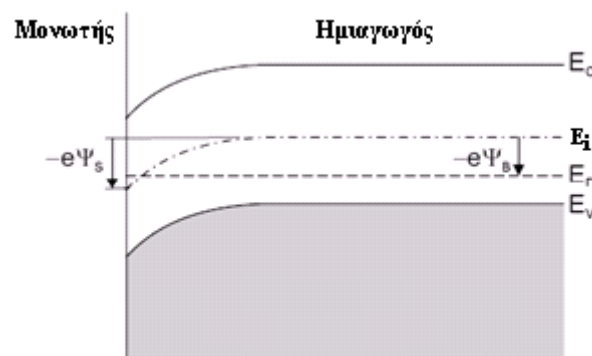
βρίσκεται πιο πάνω από την ενέργεια Fermi του ενδογενούς ημιαγωγού (σχήμα 1.4(στ)). Οι φορείς μειονότητας (ηλεκτρόνια) αυξάνονται εκθετικά δημιουργώντας ένα στρώμα **αναστροφής** στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Στην περίπτωση του n τύπου ημιαγωγού, η κατάσταση είναι ανάλογη (σχήμα 1.4(α)-(γ)).



Σχήμα 1.4: Ενεργειακό διάγραμμα ιδανικής διόδου MOS για (α,β,γ) n-τύπου και (δ,ε,στ) p-τύπου ημιαγωγό για πόλωση $V \neq 0$ για τις περιπτώσεις (α,δ) συσσώρευσης (β,ε) απογύμνωσης και (γ,στ) αναστροφής φορέων.

Μια σημαντική παράμετρος για τις δομές MOS είναι το δυναμικό Ψ (σχήμα 1.5, για p-τύπου ημιαγωγό). Το δυναμικό αυτό μετριέται σε σχέση με την ενδογενή ενέργεια Fermi και μας δείχνει σε ποια κατάσταση φορτίου βρίσκεται η επιφάνεια του ημιαγωγού στις δομές MOS. Στην επιφάνεια του ημιαγωγού, το δυναμικό αυτό ονομάζεται **επιφανειακό δυναμικό** και συμβολίζεται με Ψ_s . Ανάλογα με την τιμή του Ψ_s η επιφάνεια του ημιαγωγού μπορεί να βρίσκεται στις εξής καταστάσεις (για p-τύπου ημιαγωγό):

- (i) $\Psi_s < 0$, συσσώρευση οπών (κάμψη των ζωνών προς τα πάνω)
- (ii) $\Psi_s = 0$, συνθήκη επιπεδότητας ζωνών
- (iii) $\Psi_B > \Psi_s > 0$, απογύμνωση των οπών (προς τα πάνω κάμψη των ζωνών)
- (iv) $\Psi_s = \Psi_B$, η συγκέντρωση των οπών στην επιφάνεια του ημιαγωγού είναι ίση με τη συγκέντρωση των ηλεκτρονίων και ίση με την ενδογενή συγκέντρωση φορέων του ημιαγωγού και
- (v) $\Psi_s > \Psi_B$, αναστροφή (αύξηση ηλεκτρονίων, προς τα πάνω κάμψη των ζωνών)

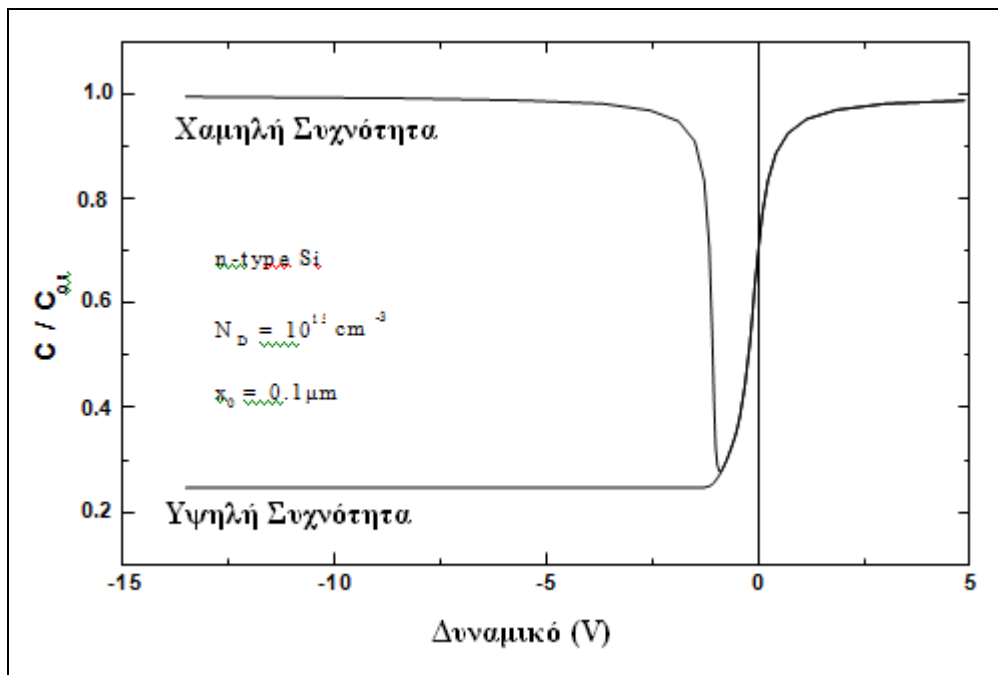


Σχήμα 1.5: Ενεργειακό διάγραμμα ζωνών στην επιφάνεια του p-τύπου ημιαγωγού σε μια δομή MOS. Η συσσώρευση πραγματοποιείται για $\Psi_s < 0$, η απογύμνωση για $\Psi_s > 0$ και η αναστροφή για $\Psi_s > \Psi_B > 0$.

1.1.4.1. Χαρακτηριστική Καμπύλη Χωρητικότητας – Τάσης (C-V)

Στον πυκνωτή MOS οποιοδήποτε dc ρεύμα «μπλοκάρεται» από το οξειδίο και συνεπώς το μόνο μέγεθος που χαρακτηρίζει την λειτουργία του είναι η χωρητικότητα του. Το διάγραμμα της χαρακτηριστικής χωρητικότητας-τάσης είναι ο «καθρέπτης» της διάταξης, αρκεί και μόνο το σχήμα της για να βγάλει συμπεράσματα για την ποιότητα και τα βασικά χαρακτηριστικά της διάταξης ένας έμπειρος ερευνητής.

Ο τρόπος με τον οποίο μετράται η χωρητικότητα μιας διάταξης, σε πρώτη προσέγγιση, σχετίζεται με την μεταβολή του φορτίου ΔQ που επιφέρει μία μεταβολή ΔV της τάσης πόλωσης που εφαρμόζεται στην πύλη του πυκνωτή, ενώ το υπόστρωμα είναι γειωμένο. Η μέτρηση της χωρητικότητας γίνεται από ειδικά όργανα όπως οι *γέφυρες χωρητικότητας (Capacitance bridge)*. Η γέφυρα εφαρμόζει την εξωτερική τάση dc πόλωσης ενώ ταυτόχρονα προσθέτει πάνω σε αυτήν και ένα μικρού πλάτους (15mV rms) εναλλασσόμενο σήμα (ac test signal). Στην συνέχεια καταγράφει το εναλλασσόμενο ρεύμα που διαρρέει την διάταξη. Το πλάτος ή η ενεργός τιμή του ac σήματος τάσης πρέπει να είναι μικρή καθώς θέλουμε να έχουμε γραμμική απόκριση του ac ρεύματος που δημιουργείται. Διαφορετικά θα έχουμε την επίδραση φαινομένων εναλλασσόμενου πεδίου από τον μονωτή. Η συχνότητα του δοκιμαστικού σήματος είναι καθοριστική για την συμπεριφορά του πυκνωτή. Αν αυτή είναι υψηλή, συνήθως 1MHz, τότε η καμπύλη CV διαφέρει από αυτήν που πετυχαίνουμε με μικρή συχνότητα, π.χ. 10Hz. Στο σχήμα 1.6 που ακολουθεί προβάλλεται η μορφή τους για n-τύπου ημιαγωγό.



Σχήμα 1.6: Θεωρητικές καμπύλες Χωρητικότητας-Τάσης χαμηλής και υψηλής συχνότητας, ιδανικού πυκνωτή MOS.

1.1.4.2. Χαρακτηριστική χωρητικότητας – τάσης για την ιδανική δίοδο MOS

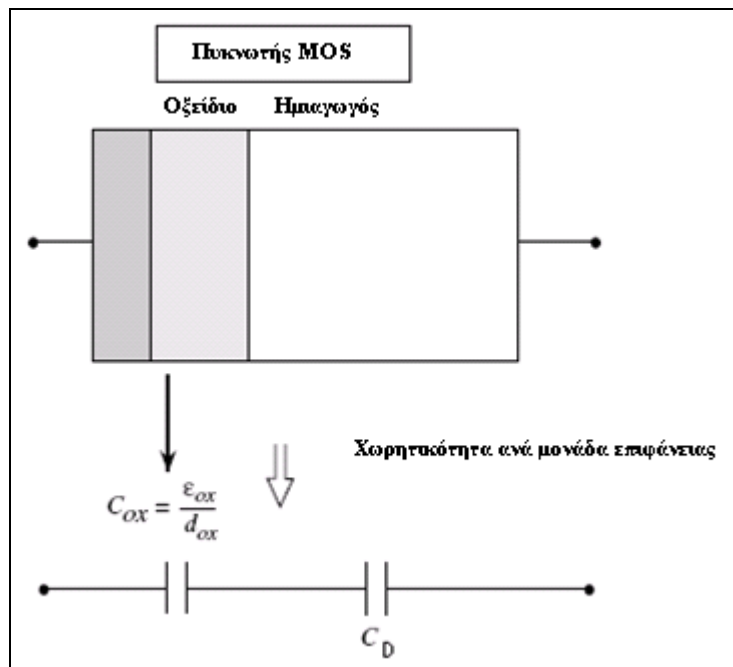
Η χωρητικότητα της **ιδανικής** διόδου MOS είναι ίση με το συνδυασμό σε σειρά της χωρητικότητας του οξειδίου και της χωρητικότητας του ημιαγωγού C_D (σχήμα 1.7).

Η πρώτη δίνεται από τη σχέση $C_{ox} = \epsilon_{ox} \epsilon_0 / d_{ox}$ και δεν μεταβάλλεται με την τάση. Αντίθετα, η χωρητικότητα του ημιαγωγού εξαρτάται από την εφαρμοζόμενη τάση. Έτσι, η συνολική χωρητικότητα της διόδου δίνεται από τη σχέση

$$C = \frac{C_{ox} C_D}{C_{ox} + C_D} \quad (1.12)$$

Αρχικά, υποτίθεται ότι εφαρμόζεται σήμα ac χαμηλής συχνότητας στη δίοδο MOS. Για αρνητικές τάσεις, η δίοδος MOS για p-τύπου ημιαγωγό βρίσκεται στην περιοχή της συσσώρευσης. Σε αυτή την περιοχή, η χωρητικότητα του ημιαγωγού C_D είναι μεγάλη. Η συγκέντρωση των οπών είναι εκθετική συνάρτηση του δυναμικού Ψ στην περιοχή της συσσώρευσης. Επομένως, η πυκνότητα φορτίου αυξάνει πολύ γρήγορα κοντά στην επιφάνεια και το περισσότερο φορτίο συσσώρευσης συγκεντρώνεται στην επιφάνεια. Άρα η μόνη χωρητικότητα η οποία παίζει ρόλο στη συνολική χωρητικότητα (σχέση 1.12) είναι αυτή του οξειδίου (σχήμα 1.8).

Καθώς εφαρμόζονται μικρές θετικές τάσεις, δημιουργείται η περιοχή της απογύμνωσης φορέων η οποία έχει μικρή χωρητικότητα με αποτέλεσμα να παίζει και αυτή ρόλο στη συνολική χωρητικότητα. Η χωρητικότητα της περιοχής της απογύμνωσης δίνεται από τον τύπο $C_d = \epsilon_s/x_d$ όπου x_d είναι το εύρος της περιοχής απογύμνωσης. Το x_d είναι πεπερασμένο και έτσι η χωρητικότητα της περιοχής απογύμνωσης παίζει ρόλο στη συνολική χωρητικότητα της δομής. Ο συνδυασμός των χωρητικοτήτων οξειδίου και περιοχής απογύμνωσης ελαττώνει την συνολική χωρητικότητα. Για μεγάλες θετικές τάσεις, η επιφάνεια του ημιαγωγού έχει αναστραφεί (μεγάλη συγκέντρωση ηλεκτρονίων) και έτσι μικρές μεταβολές της τάσης δημιουργούν μεγάλες μεταβολές στη συγκέντρωση των ηλεκτρονίων. Η χωρητικότητα του ημιαγωγού είναι μεγάλη (το φορτίο αναστροφής είναι επιφανειακό όπως και το φορτίο συσσώρευσης) και άρα το οξείδιο καθορίζει τη συνολική χωρητικότητα της δομής.



Σχήμα 1.7: Απλό ισοδύναμο κύκλωμα χωρητικότητας για τη δίοδο MOS.

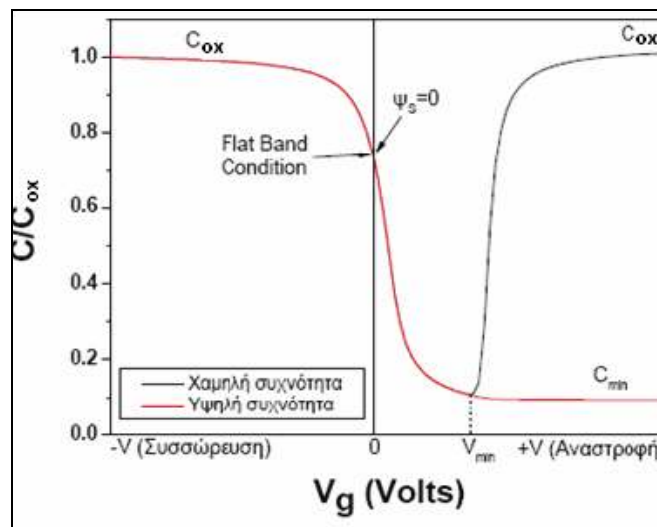
Στην περίπτωση εφαρμογής σήματος υψηλής συχνότητας, η χωρητική συμπεριφορά της διόδου στην περιοχή της συσσώρευσης και στην περιοχή της απογύμνωσης είναι ίδια με αυτή της εφαρμογής σήματος χαμηλής συχνότητας. Η μόνη διαφορά είναι στη χωρητική συμπεριφορά στην περιοχή της αναστροφής. Κατά την εφαρμογή σήματος υψηλής συχνότητας στην περιοχή της αναστροφής, οι ρυθμοί γέννησης – επανασύνδεσης των φορέων μειονότητας είναι μικροί και έτσι δεν μπορούν να ακολουθήσουν το εξωτερικό υψίσυχνο σήμα. Συνεπώς, οι p-τύπου δομές MOS δεν παρουσιάζουν την αύξηση της χωρητικότητας για μεγάλες θετικές τάσεις κατά την εφαρμογή σήματος υψηλής συχνότητας (δεξιό τμήμα του σχήματος 1.8).

Κατά την εφαρμογή τάσης V στη δίοδο MOS, θα υπάρξει πτώση τάσης τόσο στο οξειδίο όσο και στον ημιαγωγό. Έτσι,

$$V = V_{ox} + \Psi_s \quad (1.13)$$

με την πτώση τάσης στο οξειδίο να δίνεται από τη σχέση $V_{ox} = E_{ox}d_{ox} = |Q_s|d_{ox}/\epsilon_{ox}$. Μια σημαντική ποσότητα για τις δομές MOS είναι η τάση κατωφλίου V_T η οποία είναι η τάση στην οποία αρχίζει η ισχυρή αναστροφή. Έτσι, αυτή δίνεται από τη σχέση

$$V_T(\text{strong_inversion}) = \frac{Q_s}{C_{ox}} + 2\psi_B \quad (1.14)$$



Σχήμα 1.8: Χαρακτηριστικές καμπύλες χωρητικότητας – τάσης (C-V) για ιδανική p-τύπου δίοδο MOS για εφαρμογή σήματος υψηλής και χαμηλής συχνότητας.

1.1.5. Η πραγματική δίοδος MOS

Η συμπεριφορά της **πραγματικής** διόδου MOS είναι διαφορετική από αυτή της ιδανικής που περιγράφεται ως τώρα. Φορτία στο οξειδίο, παγίδες στη διεπιφάνεια οξειδίου και ημιαγωγού, σειριακή αντίσταση και διαφορές στα έργα εξόδου μεταξύ του μετάλλου και του ημιαγωγού μπορούν να επηρεάσουν τα ιδανικά χαρακτηριστικά των δομών MOS.

1.1.5.1. Είδη φορτίων

Στη συνέχεια αναφέρονται τα διαφορετικά είδη φορτίων που δύνανται να αναπτυχθούν:

1.1.5.1.1. Φορτία στο οξειδίο

Τα φορτία που βρίσκονται μέσα στο οξειδίο ταξινομούνται στις εξής κατηγορίες:

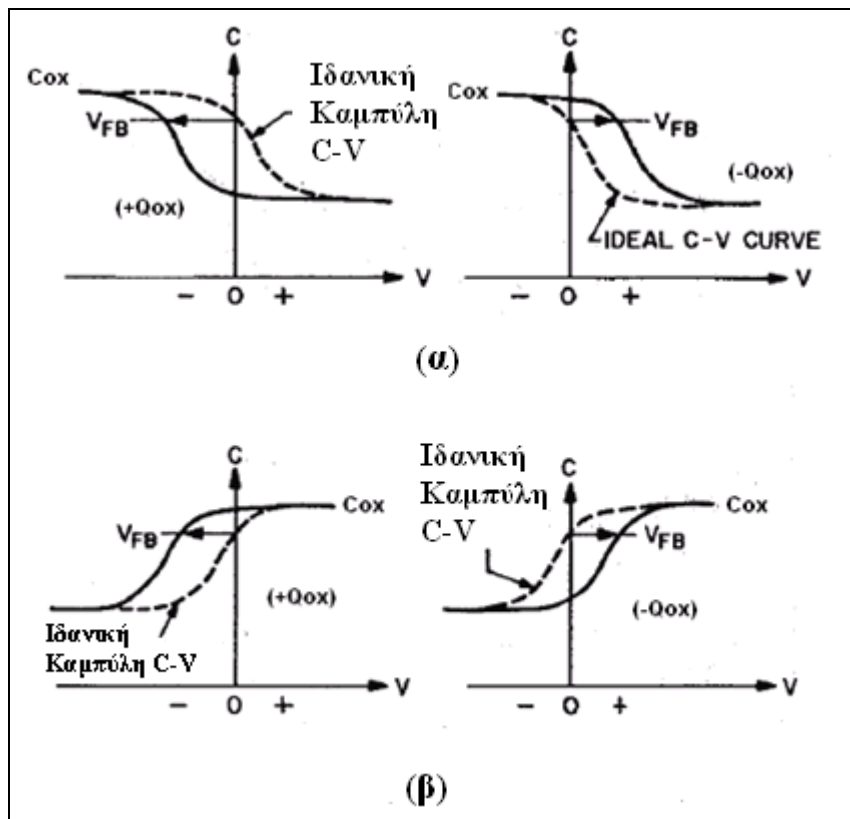
I) σταθερά φορτία οξειδίου Q_f , τα οποία εντοπίζονται κοντά στη διεπιφάνεια και είναι ακίνητα με την εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου. Είναι ανεπηρέαστα από εξωτερικούς παράγοντες. Κατά κανόνα είναι θετικά και εξαρτώνται κυρίως από τις συνθήκες ανόπτησης (annealing) του οξειδίου. Οφείλονται, κυρίως, στην απώλεια ηλεκτρονίων σε ενδοπλεγματικά κενά οξυγόνου.

II) φορτία παγιδευμένα μέσα στο οξειδίο Q_{ot} , τα οποία μπορούν να δημιουργηθούν, για παράδειγμα, από ακτινοβολία ακτίνων X ή από έγχυση θερμών ηλεκτρονίων. Αυτές οι παγίδες κατανέμονται σε όλο το οξειδίο, και

III) ευκίνητα ιοντικά φορτία Q_m , τα οποία μπορούν να κινηθούν κάτω από συνθήκες εφαρμογής τάσης ή θερμοκρασίας.

Τα φορτία που βρίσκονται μέσα στο οξειδίο Q_{ox} , προκαλούν μετατόπιση της τάσης επίπεδης ζώνης (V_{FB} : Flat Band Voltage). Στο επόμενο σχήμα φαίνεται η μετατόπιση που δημιουργούν τα φορτία αυτά στις χαρακτηριστικές χωρητικότητας – τάσης τόσο για p όσο για n-τύπου ημιαγωγό. Η συνολική μετατόπιση δίνεται από τον τύπο

$$\Delta V_{ox} = \Delta V_f + \Delta V_m + \Delta V_{ot} = \frac{Q_{ox}}{C_{ox}} \quad (1.15)$$



Σχήμα 1.9: Μετατόπιση της καμπύλης C-V κατά μήκος του άξονα της τάσης εξ' αιτίας θετικού ή αρνητικού φορτίου στο οξειδίο για (α) p-τύπου ημιαγωγό και (β) n-τύπου ημιαγωγό.

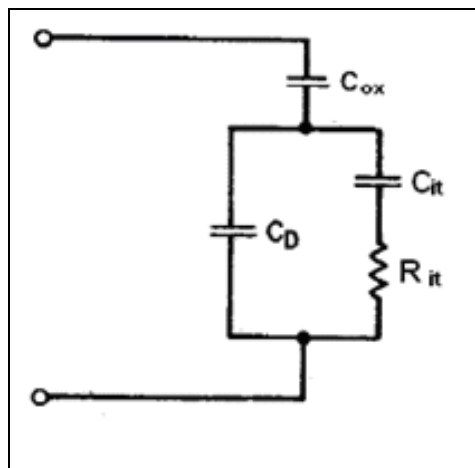
1.1.5.1.2. Φορτία στη διεπιφάνεια του οξειδίου με τον ημιαγωγό

Τα διεπιφανειακά φορτία Q_{it} , είναι παγιδευμένα φορτία μέσα στο ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού τα οποία δημιουργούνται από τη διακοπή της περιοδικότητας του. Ένα καλό οξειδίο πρέπει να μπορεί να απενεργοποιεί όσο το δυνατόν περισσότερες διεπιφανειακές παγίδες έτσι ώστε η δίοδος MOS να μπορεί να προσεγγίζει την ιδανική της συμπεριφορά. Αυτές οι παγίδες μπορούν να είναι είτε τύπου αποδέκτη είτε τύπου δότη. Οι παγίδες τύπου αποδέκτη έχουν αρνητικό φορτίο όταν είναι γεμάτες από ηλεκτρόνια και ουδέτερο φορτίο όταν είναι άδειες από ηλεκτρόνια. Αντίθετα, οι παγίδες τύπου δότη έχουν θετικό φορτίο όταν είναι άδειες από ηλεκτρόνια και ουδέτερο φορτίο όταν είναι γεμάτες με ηλεκτρόνια. Κατά τη διάρκεια εφαρμογής τάσης, οι ζώνες σθένους και αγωγιμότητας κάμπτονται είτε

προς τα πάνω είτε προς τα κάτω με αποτέλεσμα η ενέργεια Fermi του ημιαγωγού να 'σαρώνει' το ενεργειακό του χάσμα. Έτσι, κάθε φορά μεταβάλλεται ο αριθμός των κατειλημμένων καταστάσεων. Η μεταβολή αυτή εισάγει μια χωρητικότητα. Έτσι, η συνολική χωρητικότητα της δομής MOS θα δίνεται από τον τύπο

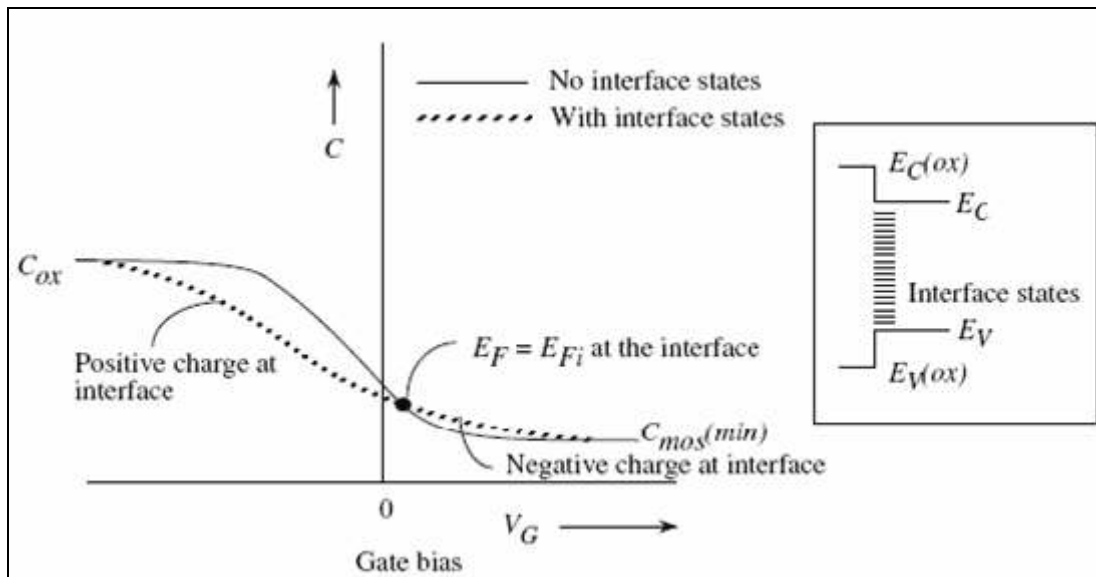
$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_D + C_{it}} \quad (1.16)$$

Το κύκλωμα της διόδου MOS, αν ληφθούν υπόψη οι διεπιφανειακές καταστάσεις, είναι αυτό του σχήματος 1.10. Η χωρητικότητα των διεπιφανειακών καταστάσεων είναι παράλληλη αυτής του ημιαγωγού και η συνολική χωρητικότητα της δομής δίνεται από τη σχέση 1.16. Η αντίσταση R_{it} σχετίζεται με τις απώλειες και οφείλεται στο γεγονός ότι ο αριθμός των φορέων που παγιδεύονται είναι μεγαλύτερος από αυτόν που επανεκπέμπονται και έτσι δημιουργείται μια καθυστέρηση στην εκπομπή των φορέων κατά τη διάρκεια μιας περιόδου. Η εκπομπή είναι πιο αργή διαδικασία από αυτή της παγίδευσης. Η σταθερά χρόνου $\tau_{it} = C_{it} \cdot R_{it}$ ορίζεται ως χρόνος ζωής των διεπιφανειακών παγίδων και προσδιορίζει τη συμπεριφορά τους με τη συχνότητα. Για πολύ μικρές συχνότητες, όσοι φορείς παγιδεύονται άλλοι τόσοι προλαβαίνουν να αποπαγιδευθούν και έτσι η R_{it} τείνει να μηδενιστεί.



Σχήμα 1.10: Ισοδύναμο κύκλωμα της διόδου MOS το οποίο περιλαμβάνει τις διεπιφανειακές καταστάσεις.

Η επίδραση των διεπιφανειακών καταστάσεων στη χαρακτηριστική C-V της διόδου MOS φαίνεται στο σχήμα 1.11. Όταν το διεπιφανειακό φορτίο είναι θετικό, η καμπύλη C-V μετατοπίζεται προς τις αρνητικές τάσεις ενώ όταν είναι αρνητικό μετατοπίζεται προς τις θετικές τάσεις. Ωστόσο, η μετατόπιση αυτή δεν είναι όμοια με αυτή που συμβαίνει λόγω φορτίων που βρίσκονται στο οξείδιο. Η μετατόπιση λόγω διεπιφανειακών φορτίων δεν είναι παράλληλη αλλά μοιάζει περισσότερο με τράβηγμα (stretch out) επειδή το φορτίο Q_{it} δεν παραμένει σταθερό καθώς μεταβάλλεται η εξωτερική πόλωση.



Σχήμα 1.11: Διάγραμμα των χαρακτηριστικών C-V ιδανικής διόδου MOS για p-τύπου ημιαγωγό με και χωρίς διεπιφανειακές καταστάσεις για σήμα μεγάλης συχνότητας.

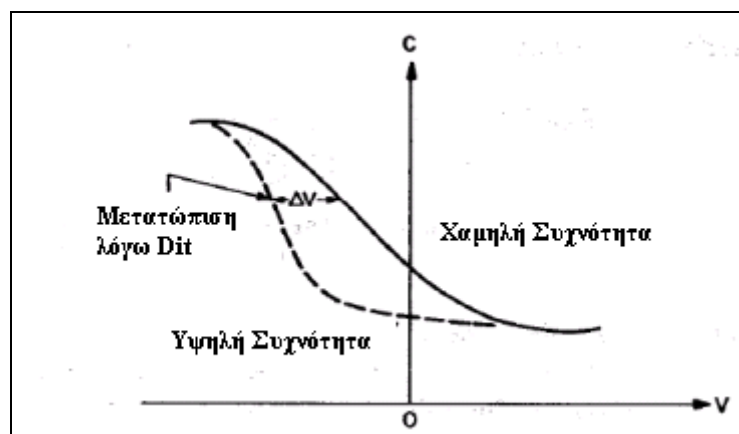
Η συχνότητα του σήματος παίζει ρόλο στις χαρακτηριστικές C-V των διόδων MOS με διεπιφανειακές καταστάσεις. Η επίδραση αυτής στις χαρακτηριστικές C-V φαίνεται στο σχήμα 1.12. Το φαινόμενο stretch out είναι πιο έντονο όσο η συχνότητα του σήματος AC αυξάνει. Αυτό συμβαίνει διότι, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η διεργασία εκπομπής φορέων από τις διεπιφανειακές παγίδες είναι πιο αργή από αυτή της σύλληψης, με αποτέλεσμα το φορτίο που παραμένει παγιδευμένο να είναι μεγαλύτερο σε σχέση με την περίπτωση των χαμηλών

συχνότητων. Στο μεγάλης συχνότητας σήμα AC, οι φορείς δεν προλαβαίνουν να αποπαγιδευτούν.

Οι απώλειες που εισάγουν οι διεπιφανειακές καταστάσεις, έχουν επίδραση και στην αγωγιμότητα εκτός από τη χωρητικότητα. Στην περίπτωση του ιδανικού πυκνωτή, όταν εφαρμόζεται ένα σήμα $V(t) \sim \cos\omega t$ το ρεύμα θα έχει και αυτό τη μορφή $I(t) \sim \sin\omega t$ αφού δεν υπάρχει διαφορά φάσης μεταξύ τους. Η καταναλισκόμενη

ισχύς σε μία περίοδο θα είναι $\int I \cdot V = 0$. Άρα, στη φασματοσκοπία σύνθετης αγωγής $Y = G + i\omega C$ το G είναι μηδέν. Έτσι, χωρίς διεπιφανειακές καταστάσεις δεν υπάρχουν απώλειες. Στην περίπτωση της πραγματικής διόδου που υπάρχουν διεπιφανειακές καταστάσεις, παγιδούνται σ' αυτές φορείς οι οποίοι αποπαγιδεύονται ακόμα πιο δύσκολα. Έτσι, κατά την εφαρμογή ενός σήματος της μορφής $V(t) \sim \cos\omega t$, το ρεύμα μετατόπισης θα παρουσιάζει διαφορά φάσης (θα καθυστερεί) σε σχέση με την τάση, $I \sim \sin(\omega t + \theta)$, οπότε η καταναλισκόμενη ισχύς σε μία περίοδο θα είναι $\int I \cdot V \neq 0$.

Έτσι, στη φασματοσκοπία σύνθετης αγωγής, το G θα είναι διάφορο του μηδενός και θα παρουσιάζει μέγιστο σε κάποια συχνότητα που παρατηρείται μέγιστη εκπομπή φορέων.



Σχήμα 1.12: Εξάρτηση των C-V χαρακτηριστικών των διόδων MOS με διεπιφανειακές καταστάσεις από τη συχνότητα του εξωτερικού σήματος.

Η ύπαρξη φορτίων στο οξείδιο, στη διεπιφάνεια του οξειδίου με τον ημιαγωγό και η διαφορά των έργων εξόδου του μετάλλου και του ημιαγωγού προκαλούν μια τάση κατωφλίου διαφορετική από αυτή της σχέσης 1.14 που ισχύει για την ιδανική δίοδο MOS. Τα φορτία συνεισφέρουν στην τάση κατωφλίου με τον όρο της σχέσης 1.15. Αντίστοιχη είναι και η συνεισφορά των διεπιφανειακών φορτίων,

$$\Delta V_{it} = \frac{Q_{it}}{C_{ox}}$$

Η τάση κατωφλίου της πραγματικής διόδου MOS για p-τύπου ημιαγωγό (λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω συνεισφορές) δίνεται από τη σχέση

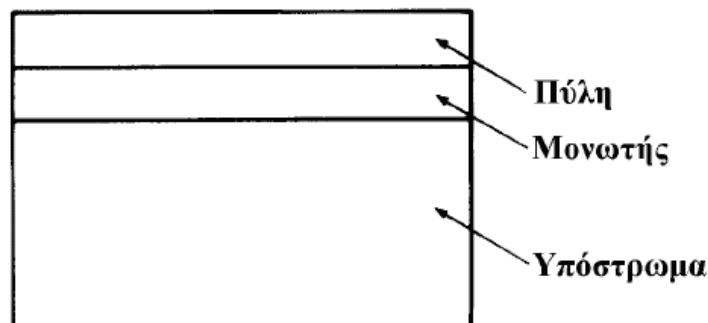
$$V_T (strong_inversion) = \Phi_{ms} - \frac{Q_{ox}}{C_{ox}} - \frac{Q_{it}}{C_{ox}} + 2\psi_B - \frac{Q_s}{C_{ox}} \quad (1.17)$$

Στη σχέση 1.17, οι όροι γράφονται με τις αλγεβρικές τους τιμές.

1.1.5.2. Καταστάσεις πόλωσης στην πραγματική δίοδο

Για την ανάλυση των καταστάσεων πόλωσης του κεφαλαίου αυτού βασιζόμαστε στην αντίστοιχη θεωρητική περιγραφή της εργασίας [1.21].

Στην περίπτωση του σχήματος 1.13(α) γίνεται η υπόθεση πως η πύλη είναι φτιαγμένη από πολυκρυσταλλικό πυρίτιο και το υπόστρωμα με p-πυρίτιο

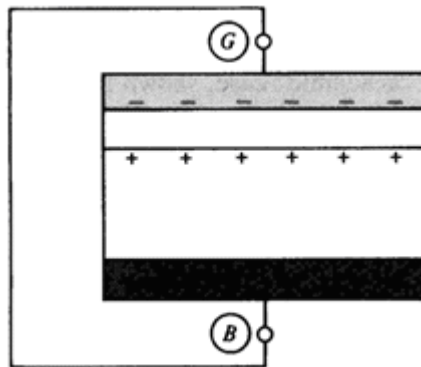


Σχήμα 1.13 (α) Δομή Διόδου

Στην πραγματική περίπτωση του σχήματος 1.13(β), η πύλη είναι από διαφορετικό υλικό, (στην συγκεκριμένη περίπτωση μέταλλο), δημιουργώντας την επαφή πύλης (gate terminal) G. Το υπόστρωμα κάνει επαφή με μία μεταλλική πλάκα, η οποία συνδέεται μέσω της επαφής υποστρώματος (body terminal B) με τα λοιπά μέρη. Βραχυκυκλώνοντας την επαφή πύλης με την επαφή υποστρώματος και ακολουθώντας τη διαδρομή από την επαφή πύλης προς αυτή του υποστρώματος συναντούνται πολλά δυναμικά επαφής. Ρόλο, όμως, παίζουν μόνο το πρώτο και το τελευταίο, οπότε:

Σύνολο δυναμικών επαφής από πύλη προς υπόστρωμα = $\Phi_{\text{υλικό πύλης}} - \Phi_{\text{υλικό υποστρώματος}}$

Λόγω της μη-μηδενικής διαφοράς δυναμικού εμφανίζονται φορτία στις δύο πλευρές του οξειδίου. Αν η διαφορά δυναμικού αυτή είναι αρνητική, τα φορτία θα έχουν την πολικότητα του σχήματος 1.13(β).



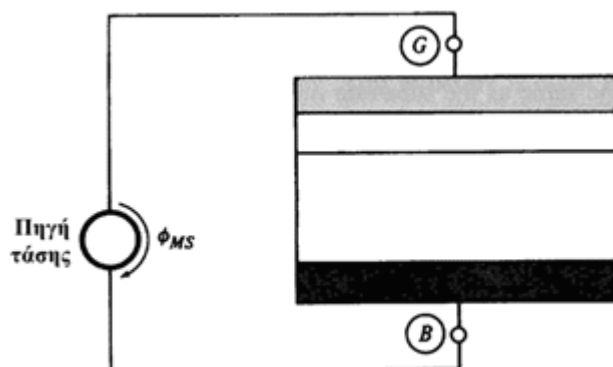
Σχήμα 1.13(β)

Στο σχήμα 1.13(γ) φαίνεται η περίπτωση όπου ασκείται μία εξωτερική τάση, ώστε τα φορτία να εξαφανιστούν. Η τάση αυτή πρέπει να αντισταθμίζει το σύνολο των δυναμικών επαφής από την πύλη προς το υπόστρωμα, οπότε:

$$\Phi_{MS} = \Phi_{\text{υλικό υποστρώματος}} - \Phi_{\text{υλικό πύλης}} \quad (1.18)$$

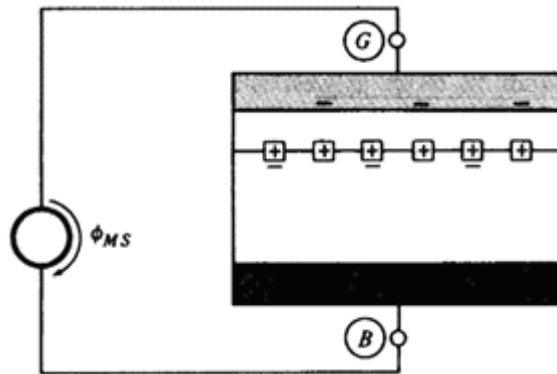
Συγκέντρωση φορτίων μπορεί να δημιουργηθεί και λόγω των φορτίων ή προσμίξεων στο εσωτερικό του οξειδίου ή στην περιοχή της διεπιφάνειας Si - SiO₂

που μια πραγματική δίοδος MOS περιέχει. Σήμερα, πλέον, τα τέσσερα αυτά είδη φορτίων έχουν μειωθεί εξαιρετικά, χάρη στις κατάλληλες μεθόδους κατασκευής. Γίνεται η υπόθεση πως όλα τα παρασιτικά φορτία βρίσκονται στη διεπιφάνεια οξειδίου – ημιαγωγού και η τιμή τους Q_0 είναι σταθερή. Ακόμη και όταν υπάρχουν φορτία εντός του οξειδίου, θεωρείται πως δεν υπάρχουν, αυξάνοντας την τιμή του Q_0 , το οποίο ονομάζεται ενεργό φορτίο διεπιφάνειας. Σχεδόν πάντα, ανεξάρτητα από τον τύπο υποστρώματος, το εγκλωβισμένο φορτίο είναι θετικό. Σήμερα, για διατάξεις υψηλής ποιότητας, πρέπει να παρουσιάζει συγκέντρωση μικρότερη των 10^{10} ιόντων/cm² που αντιστοιχεί σε $1,6 \cdot 10^{-9}$ C/cm².



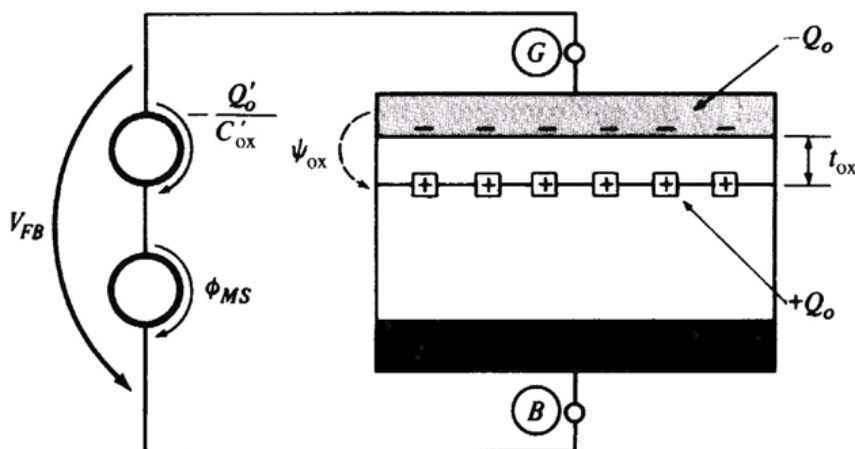
Σχήμα 1.13(γ)

Το ενεργό φορτίο διεπιφάνειας εικονίζεται εντός των μικρών τετραγώνων του σχήματος 1.13(δ). Μία πηγή τιμής ϕ_{MS} χρησιμοποιείται για να αντισταθμίσει το σύνολο των δυναμικών επαφής από την πύλη προς το υπόστρωμα. Το φορτίο Q_0 θα προξενήσει την εμφάνιση ενός φορτίου $-Q_0$ στο σύστημα για λόγους ηλεκτροουδετερότητας. Μέρος του $-Q_0$ θα εμφανιστεί στην πύλη και το υπόλοιπο στον ημιαγωγό. Το τελευταίο μπορεί να απαλειφθεί, αν ολόκληρο το $-Q_0$ παρουσιαζόταν στην πύλη. Για την εμφάνιση του φορτίου $-Q_0$ στην πύλη, θα συνδεθεί σε σειρά μία πηγή με το εξωτερικό κύκλωμα, έχοντας τον αρνητικό της πόλο προς την πύλη.



Σχήμα 1.13(δ)

Συνεπώς, η πτώση δυναμικού κατά μήκος του οξειδίου ψ_{ox} πρέπει να ισούται με $-Q_o/C_{ox}$, όπου C_{ox} είναι η συνολική χωρητικότητα ανάμεσα στα δύο άκρα του οξειδίου. Αυτή την τάση ακριβώς πρέπει να δίνει η πηγή, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.13(ε).



Σχήμα 1.13(ε)

Αν οι ποσότητες εκφραστούν ανά μονάδα επιφάνειας (Q'_o , C'_{ox}), έχουμε:

$$\psi_{ox} = -\frac{Q'_o}{C'_{ox}} \quad (1.19)$$

και η χωρητικότητα του οξειδίου ανά μονάδα επιφάνειας δίνεται από:

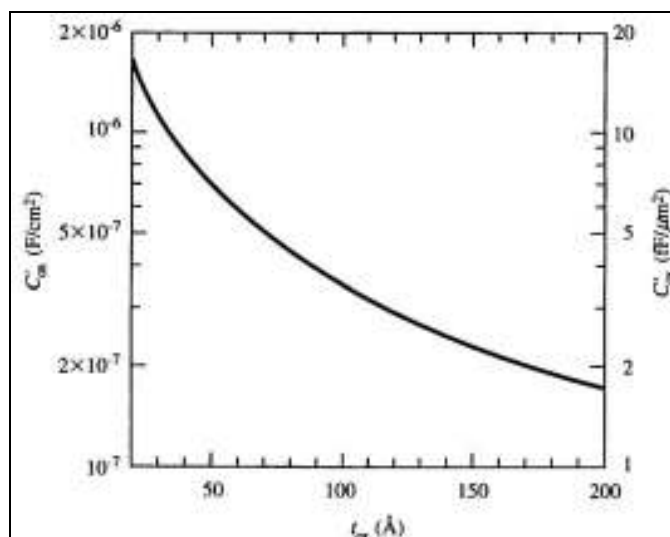
$$C'_{ox} = \epsilon_{ox}/t_{ox} \quad (1.20)$$

όπου t_{ox} είναι το πάχος του μονωτή και ϵ_{ox} η διηλεκτρική του σταθερά, που δίνεται από:

$$\epsilon_{ox} = k_{ox} \cdot \epsilon_0 \quad (1.21)$$

όπου ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού και k_{ox} η σχετική διηλεκτρική σταθερά του ημιαγωγού. Για το SiO_2 είναι $k_{ox} = 3.9$.

Η σχέση $C'_{ox} = \epsilon_{ox}/t_{ox}$ εικονίζεται γραφικά στο σχήμα 1.14.



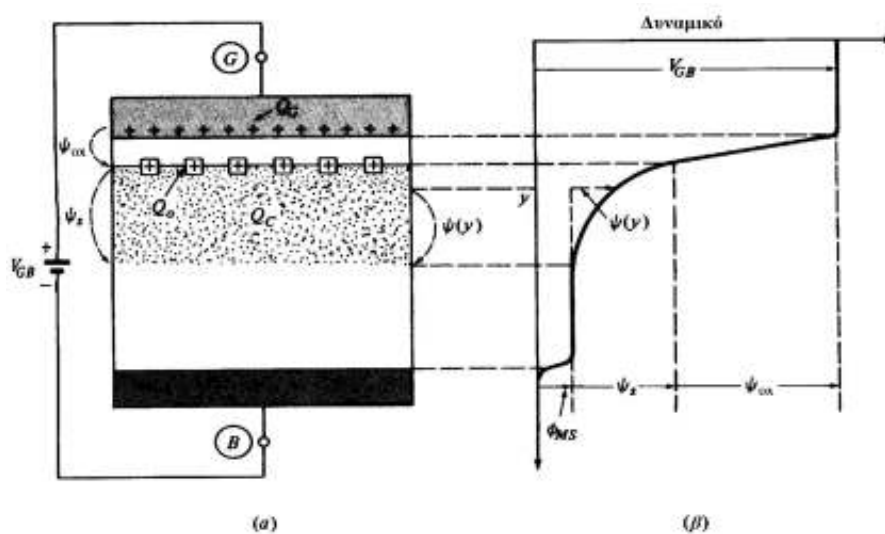
Σχήμα 1.14: Χωρητικότητα ανά μονάδα επιφάνειας συναρτήσει του πάχους για μονωτή SiO_2

Χρειάζεται, λοιπόν, μία εξωτερική τάση μεταξύ της πύλης και του υποστρώματος, ώστε ο ημιαγωγός να διατηρηθεί παντού ουδέτερος. Η τάση αυτή ονομάζεται επίπεδης ζώνης (flat band voltage) και συμβολίζεται με V_{FB} . Η σχέση που τη δίνει, όπως φαίνεται και από το σχήμα 1.13(ε) είναι:

$$V_{FB} = \Phi_{ms} - \frac{Q'_{ox}}{C'_{ox}}$$

1.1.5.2.1. Επίδραση εξωτερικά επιβαλλόμενης τάσης στο δυναμικό και το φορτίο

Στο σχήμα 1.15 φαίνεται πως επηρεάζεται το υπόστρωμα μίας MOS δομής p-υποστρώματος, όταν η εξωτερικά επιβαλλόμενη τάση παίρνει τιμές διαφορετικές από την τάση μηδενικής πόλωσης.



Σχήμα 1.15: α) Δομή MOS p-υποστρώματος υπό τάση β) Κατανομή του δυναμικού για $\psi_s > 0$, θεωρώντας την πύλη, την επαφή του υποστρώματος και τα εξωτερικά καλώδια από διαφορετικό υλικό.

Μία αυθαίρετη τιμή του V_{GB} προκαλεί την εμφάνιση φορτίων στον ημιαγωγό. Πρακτικά, όλα αυτά τα φορτία θα συγκεντρωθούν σε μια περιοχή κοντά στην ανώτερη επιφάνεια του ημιαγωγού. Έξω από την περιοχή αυτή το υπόστρωμα είναι πρακτικά ουδέτερο. Η συνολική πτώση τάσης από τη διεπιφάνεια ημιαγωγού – υποστρώματος ως ένα σημείο στο υπόστρωμα, εκτός της περιοχής αυτής, ονομάζεται επιφανειακό δυναμικό ψ_s .

Όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.15, υπάρχουν τέσσερα είδη πτώσης τάσης, κατά μήκος του κλειστού βρόγχου:

- Η τάση της εξωτερικής πηγής V_{GB} .
- Η πτώση τάσης κατά μήκος του οξειδίου ψ_{ox} .
- Το επιφανειακό δυναμικό ψ_s .
- Τα δυναμικά επαφής που υπάρχουν.

Κατά μήκος του κλειστού βρόγχου, λοιπόν, είναι:

$$V_{GB} = \psi_{ox} + \psi_s + \phi_{MS} \quad (1.22)$$

Το ισοζύγιο, αυτό, των δυναμικών φαίνεται στο σχήμα 1.15(β) θεωρώντας την πύλη, την επαφή του υποστρώματος και τους εξωτερικούς αγωγούς από το ίδιο υλικό. Τότε, το μόνο δυναμικό επαφής που παρεμβάλλεται είναι αυτό μεταξύ του υποστρώματος και της μεταλλικής του επαφής.

Το ϕ_{MS} αποτελεί γνωστή σταθερά, οπότε για οποιαδήποτε αλλαγή στο V_{GB} έχουμε:

$$\Delta V_{GB} = \Delta \psi_{ox} + \Delta \psi_s \quad (1.23)$$

Όσον αφορά τα φορτία του συστήματος, συναντούνται τρία είδη:

- Το φορτίο στην πύλη Q_G .
- Το ενεργό φορτίο διεπιφάνειας Q_o .
- Το φορτίο στον ημιαγωγό, κάτω του οξειδίου, Q_C .

Για να ισχύει η ηλεκτρική ουδετερότητα στο σύστημα, τα φορτία πρέπει να αλληλοαναιρούνται:

$$Q_G + Q_o + Q_C = 0 \quad (1.24)$$

ή, όταν γίνεται αναφορά ανά μονάδα επιφάνειας, είναι:

$$Q'_G + Q'_o + Q'_C = 0 \quad (1.25)$$

Το Q'_o θεωρείται σταθερό, οπότε για αλλαγές στο Q'_C θα ισχύει:

$$\Delta Q'_G + \Delta Q'_C = 0 \quad (1.26)$$

Για το φορτίο ανά μονάδα επιφάνειας στον ημιαγωγό, κάτω του οξειδίου, Q'_C , έχουμε [1.2]:

$$Q'_C = \pm \sqrt{2q\epsilon_s N_A} \sqrt{\phi_s e^{-\psi_s/\phi_T} + \psi_s - \phi_s + e^{-2\psi_F/\phi_T} \left(e^{\psi_s/\phi_T} - \psi_s - \phi_s \right)} \quad (1.30)$$

όπου το πρόσημο "-" πρέπει να χρησιμοποιείται για την περίπτωση που $\psi_s > 0$ (απογύμνωση ή αναστροφή) και το "+" όταν $\psi_s < 0$ (συσσώρευση).

Το φορτίο ανά μονάδα επιφάνειας στην πύλη, Q'_G , σχετίζεται με το δυναμικό κατά μήκος του οξειδίου, ψ_{ox} , μέσω της χωρητικότητας ανά μονάδα επιφάνειας του οξειδίου, C'_{ox} . Δηλαδή:

$$Q'_G = C'_{ox} \psi_{ox}$$

ο Περιοχές απογύμνωσης και αναστροφής

Η τιμή του δυναμικού ψ_s σε κατάσταση απογύμνωσης υπολογίζεται από την εξίσωση του Poisson αν δεχθούμε ότι η πυκνότητα φορτίου χώρου μέσα στον ημιαγωγό είναι σταθερή και ίση με qN_A . Αποδεικνύεται [1.2] ότι ισχύει:

$$\psi_s = \frac{qN_A d_B^2}{2\epsilon_s} \quad (1.31)$$

όπου d_B το βάθος της περιοχής απογύμνωσης από την επιφάνεια του ημιαγωγού και N_A η συγκέντρωση προσμίξεων αποδεκτών στον ημιαγωγό.

ο Περιοχή αναστροφής

Το συνολικό φορτίο κάτω από το οξειδίο Q'_C είναι το άθροισμα του φορτίου στο στρώμα αναστροφής Q'_I και του φορτίου λόγω των ιονισμένων δεκτών στην περιοχή απογύμνωσης Q'_B :

$$Q'_C = Q'_I + Q'_B \quad (1.32)$$

και επειδή συνήθως $\phi_F \approx 26\phi_t$ ως $36\phi_t$, στη σχέση (1.30) γίνεται η προσέγγιση:

$$Q'_C = \pm \sqrt{2q\epsilon_s N_A} \sqrt{\psi_s + \phi_t e^{(\psi_s - 2\phi_F) - \phi_t}} \quad (1.33)$$

Η περιοχή απογύμνωσης είναι πολύ μεγαλύτερη του στρώματος αναστροφής. Πρακτικά, λοιπόν, όλη η περιοχή απογύμνωσης είναι απαλλαγμένη ηλεκτρονίων και το φορτίο οφείλεται μόνο στους δέκτες και καθόλου στους ελεύθερους φορείς.

Η περιοχή αναστροφής χωρίζεται σε τρεις υποπεριοχές:

- ✓ την ασθενή
- ✓ τη μέση
- ✓ την ισχυρή

Η έναρξη της ασθενούς αναστροφής είναι για $\psi_s = \phi_F$ και το ανώτερο όριό της για $\psi_s = 2\phi_F$. Για $\psi_s > 2\phi_F$ και για μία ποσότητα ϕ_{z0} που είναι αρκετά ϕ_t , υπάρχει η μέση αναστροφή. Μετά υπάρχει η ισχυρή αναστροφή.

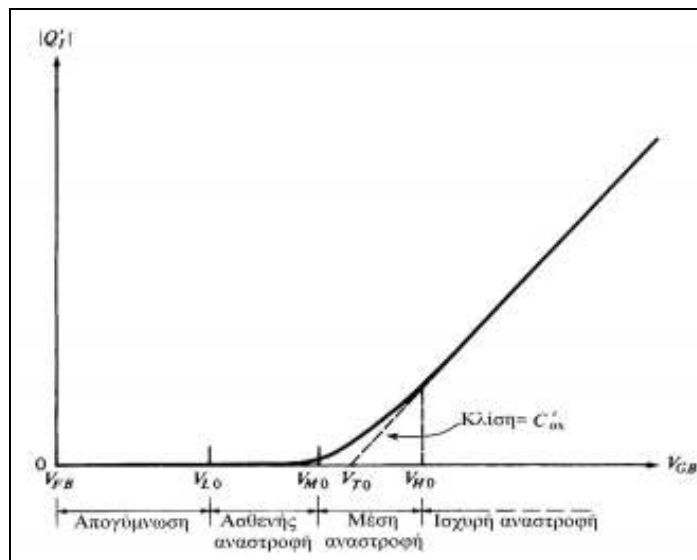
Για τις αλλαγές του $\Delta Q'_C$ υπεύθυνα είναι τα $\Delta Q'_I$ και $\Delta Q'_B$:

$$\Delta Q'_C = \Delta Q'_I + \Delta Q'_B \quad (1.34)$$

Το φορτίο στο στρώμα αναστροφής, Q'_I , εξαρτάται από την εξωτερικά επιβαλλόμενη τάση V_{GB} , σύμφωνα με τη σχέση:

$$Q'_I = -C'_{ox}(V_{GB} - V_{FB} - \Psi_S - \gamma\sqrt{\Psi_S}) \quad (1.35)$$

η οποία προκύπτει από τις σχέσεις που προαναφέρθηκαν και γραφικά απεικονίζεται στο σχήμα 1.16:



Σχήμα 1.16: Φορτίο στο στρώμα αναστροφής προς την τάση πύλης – υποστρώματος

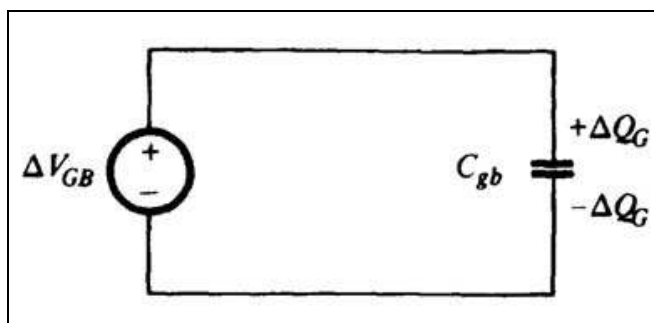
Το συνολικό φορτίο κάτω από το οξειδίο $|Q'_C|$ επηρεάζεται σχεδόν αποκλειστικά από το φορτίο της περιοχής απογύμνωσης $|Q'_B|$ ως το V_{M0} , μετά το $|Q'_B|$ συμβάλλει εξίσου με το $|Q'_I|$ (μέση αναστροφή) και τελικά σχεδόν καθόλου στην ισχυρή αναστροφή.

1.1.5.3. Χωρητική συμπεριφορά της διόδου MOS για σήμα χαμηλής συχνότητας

Όπως γίνεται φανερό παρατηρώντας το σχήμα 1.17, αν το V_{GB} αυξηθεί κατά μία μικρή ποσότητα ΔV_{GB} , τότε φορτίο $\Delta Q'_G$ θα εισέλθει στην επαφή της πύλης. Για να διατηρηθεί η ηλεκτρική ουδετερότητα, φορτίο ίσης τιμής πρέπει να εξέλθει της επαφής του υποστρώματος, ή, εναλλακτικά, φορτίο $-\Delta Q'_G$ πρέπει να εισέλθει στην επαφή του υποστρώματος. Ορίζεται, λοιπόν, η ποσότητα C'_{gb} ως χωρητικότητα ανά μονάδα επιφάνειας, σύμφωνα με τη σχέση:

$$C'_{gb} \equiv \frac{dQ'_G}{dV_{GB}} \quad (1.36)$$

ενώ το ισοδύναμο κύκλωμα είναι:



Σχήμα 1.17: Ισοδύναμο κύκλωμα δομής MOS δύο επαφών, συνδεδεμένης με πηγή τάσης

Το φορτίο $-\Delta Q'_G$ προκαλεί αλλαγή στο φορτίο του υποστρώματος Q'_C κατά $\Delta Q'_C = -\Delta Q'_G$. Η αλλαγή που θα επέλθει στην τάση πύλης – υποστρώματος θα μοιραστεί κατά μήκος του οξειδίου, σαν $\Delta\psi_{ox}$, και κατά μήκος του ημιαγωγού, σαν αλλαγή $\Delta\psi_s$ στο δυναμικό επιφάνειας:

$$\Delta V_{GB} = \Delta\psi_{ox} + \Delta\psi_s \quad (1.37)$$

Από τις δύο προηγούμενες σχέσεις, λοιπόν, προκύπτει:

$$\frac{1}{C'_{gb}} = \frac{1}{dQ'_G/d\psi_{ox}} + \frac{1}{-dQ'_c/d\psi_s} \quad (1.38)$$

οπότε προκύπτει ότι:

$$C'_{ox} = \frac{dQ'_G}{d\psi_{ox}} \quad (1.39)$$

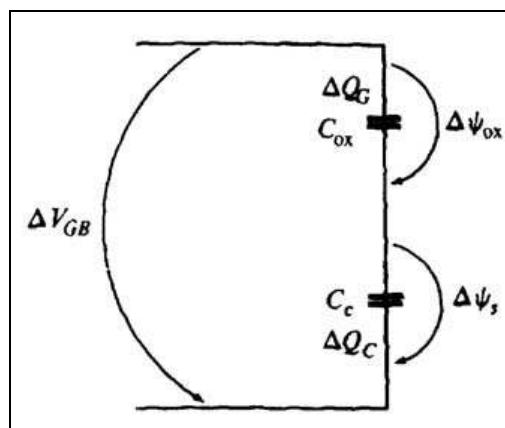
Με αλλαγή στο δυναμικό του υποστρώματος κατά $\Delta\psi_s$ το φορτίο στην περιοχή θα αλλάξει κατά $\Delta Q'_c$. Το επιπλέον φορτίο θα έρθει από τη βάση της περιοχής, μέσω της επαφής του υποστρώματος, σχηματίζοντας πυκνωτή με χωρητικότητα:

$$C'_c = \frac{dQ'_c}{d\psi_s} \quad (1.40)$$

Συνεπώς η σχέση (1.25) μπορεί να πάρει τώρα τη μορφή:

$$\frac{1}{C'_{gb}} = \frac{1}{C'_{ox}} + \frac{1}{C'_c} \quad (1.41)$$

Επομένως, η χωρητικότητα C_{gb} είναι ίση με αυτή που επιδεικνύουν δύο πυκνωτές με τιμές C_{ox} και C_c όταν συνδεθούν σε σειρά, όπως στο ακόλουθο σχήμα:



Σχήμα 1.18: Το κύκλωμα της σχέσης (1.41)

κατά απόλυτη τιμή, το Q'_c είναι ευαίσθητο σε αλλαγές του ψ_s και το C'_c πολύ μεγάλο. Αυτό συμβαίνει επειδή το V_{GB} είναι αρκετά μικρότερο του V_{FB} , οπότε συγκεντρώνονται πολλές οπές κάτω από το οξειδίο λόγω του αρνητικού δυναμικού επιφάνειας. Δημιουργείται, λοιπόν, ένας πυκνωτής με τη θετική πλάκα στο μέρος της βάσης. Συνεπώς, η συνολική χωρητικότητα ανάμεσα στις δύο επαφές του MOS είναι αυτή του οξειδίου C'_{ox} .

Θεωρείται η συνεισφορά της χωρητικότητας της περιοχής απογύμνωσης C'_b και του στρώματος αναστροφής C'_i . Από τις εξισώσεις (1.20) και (1.40) προκύπτει η:

$$C'_c = \sqrt{2q\epsilon_s N_A} \frac{1 + e^{\frac{\psi_s - 2\phi_F}{\phi_t}}}{2 \sqrt{\psi_s + \phi_t e^{\frac{\psi_s - 2\phi_F}{\phi_t}}}} = \frac{-dQ'_B}{d\psi_s} + \frac{-dQ'_I}{d\psi_s} \quad (1.42)$$

επομένως οι επιμέρους χωρητικότητες λαμβάνουν τις εξής τιμές:

χωρητικότητα περιοχής απογύμνωσης

$$C'_b = \frac{-dQ'_B}{d\psi_s} \quad (1.43)$$

χωρητικότητα στρώματος αναστροφής:

$$C'_i = \frac{-dQ'_I}{d\psi_s} \quad (1.44)$$

Λαμβάνοντας υπόψη την εξίσωση (1.42) οι ακριβείς τιμές των C'_b και C'_i έχουν ως εξής:

$$C'_b = \sqrt{2q\epsilon_s N_A} \frac{1}{2 \sqrt{\psi_s + \phi_t e^{\frac{\psi_s - 2\phi_F}{\phi_t}}}} \quad (1.45)$$

$$C'_i = \sqrt{2q\epsilon_s N_A} \frac{e^{\frac{\psi_s - 2\phi_F}{\phi_t}}}{2 \sqrt{\psi_s + \phi_t e^{\frac{\psi_s - 2\phi_F}{\phi_t}}}} \quad (1.46)$$

Είναι σημαντικό να γίνει η παρατήρηση πως από τις εξισώσεις αυτές προκύπτει $C'_b = C'_i$ για $\psi_s = 2\phi_F$.

Επομένως είναι:

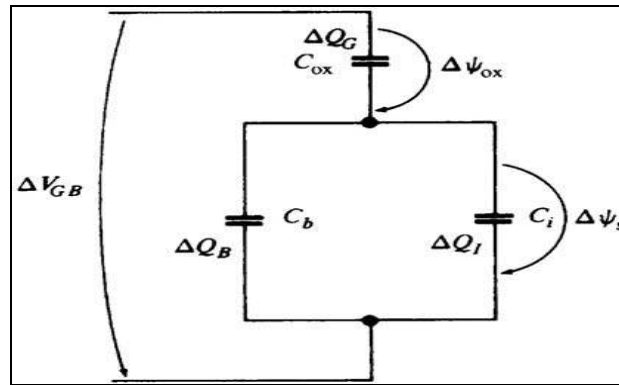
$$C'_c = C'_b + C'_i \quad (1.47)$$

δηλαδή πρόκειται για παράλληλη σύνδεση των πυκνωτών.

Συνολικά, μάλιστα, για το C'_{gb} θα ισχύει:

$$\frac{1}{C'_{gb}} = \frac{1}{C'_{ox}} + \frac{1}{C'_b + C'_i} \quad (1.48)$$

το οποίο μπορεί να παρασταθεί με το ισοδύναμο κύκλωμα του σχήματος 1.19. Πρέπει να γίνει η παρατήρηση πως πρόκειται για ισοδύναμο κύκλωμα που αφορά μικρές αλλαγές δυναμικών και φορτίων γύρω από μία συγκεκριμένη τιμή δυναμικού και όχι τις συνολικές τιμές των δυναμικών και των φορτίων.

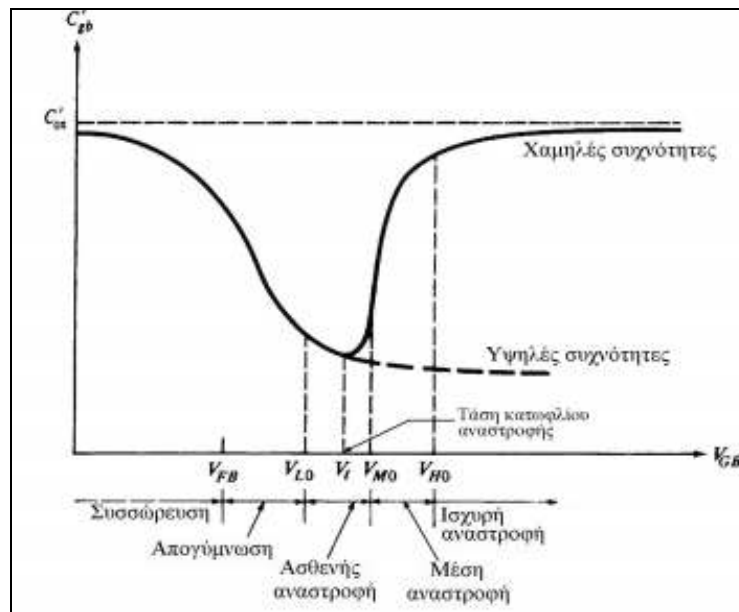


Σχήμα 1.19: Ισοδύναμο κύκλωμα για μικρές αλλαγές δυναμικών και φορτίων

Το διάγραμμα που αντιστοιχεί στην συνολική ανά μονάδα επιφάνειας χωρητικότητα πύλης - υποστρώματος C'_{gb} εικονίζεται στο σχήμα 1.20.

Σε εξωτερικό σήμα χαμηλής συχνότητας αντιστοιχεί η συνεχής γραμμή, ενώ όταν πρόκειται για εξωτερικό σήμα υψηλής συχνότητας λαμβάνεται η διακεκομμένη γραμμή. Αν το ΔV_{GB} είναι ημιτονοειδούς μορφής, τότε και οι αλλαγές στο φορτίο είναι επίσης ημιτονοειδείς. Θα αντιστοιχούν σε τιμές ισορροπίας μόνο αν η συχνότητα είναι αρκετά χαμηλή (της τάξης του 1 Hz). Αν, όμως, πρόκειται για υψηλές συχνότητες (π.χ. 100 kHz), το φορτίο του στρώματος αναστροφής δεν προλαβαίνει να παρακολουθήσει τις αλλαγές του ΔV_{GB} . Οι απαιτούμενες αλλαγές στο φορτίο πρέπει να δίνονται με κάλυψη ή αποκάλυψη δεκτών στη βάση της περιοχής απογύμνωσης, όπως γίνεται και κατά τη διεργασία της απογύμνωσης. Ο λόγος που το φορτίο του στρώματος αναστροφής δεν προλαβαίνει να παρακολουθήσει τις αλλαγές είναι πως παραμένει αποκομμένο από το εξωτερικό του εξαιτίας του οξειδίου στο άνω και της περιοχής απογύμνωσης στο κάτω μέρος του. Οι μόνοι μηχανισμοί, λοιπόν, που επιτρέπουν την αλλαγή της συγκέντρωσης ηλεκτρονίων είναι η θερμική διέγερση και η επανασύνδεση, που όμως λαμβάνουν χώρα με πολύ αργό ρυθμό. Για να επιτευχθεί η συμπεριφορά της μη-διακεκομμένης καμπύλης και σε πολύ υψηλότερες συχνότητες είναι αναγκαίο να υπάρχει επικοινωνία με το περιβάλλον, ώστε να προσδίδεται ή να αφαιρείται φορτίο στο

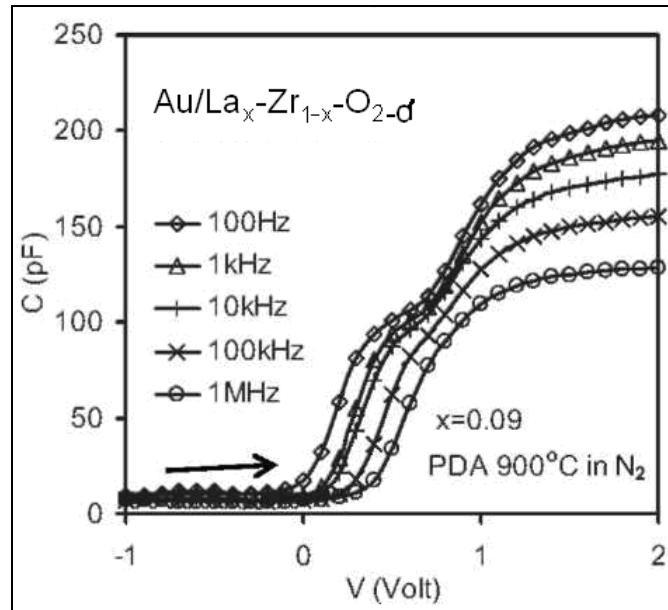
στρώμα αναστροφής εξωτερικά. Αυτό πραγματοποιείται με τις περιοχές της πηγής και της υποδοχής στο MOS transistor.



Σχήμα 1.20: Συνολική χωρητικότητα ανά μονάδα επιφάνειας

1.1.5.4. Διασπορά της συχνότητας στη συσσώρευση

Υπάρχουν αρκετοί μηχανισμοί που μπορεί να προκαλέσουν τη διασπορά της χωρητικότητας με τη συχνότητα όπως παρατηρείται (σχήμα 1.21) στη συσσώρευση όπως οι αντιστάσεις σε σειρά [1.3] και η εξάρτηση της σταθεράς k από τη συχνότητα του διεπιφανειακού διηλεκτρικού στρώματος [1.5]. Για την απόκτηση των φυσικών ιδιοτήτων και της διηλεκτρικής σταθεράς των διηλεκτρικών από τις μετρήσεις C-V οι επιδράσεις που αναφέρθηκαν παραπάνω πρέπει να εξαλειφθούν. Για να μειωθούν οι επιδράσεις των αντιστάσεων σε σειρά οι πίσω επαφές (κράμα In-Ga) μπορούν να αποτεθούν σε μεγάλη επιφάνεια υλικού μόνωσης το οποίο ελαχιστοποιεί τις επιδράσεις των αντιστάσεων σε σειρά και των ατελειών των πίσω επαφών [1.3]. Τα καλώδια και οι συνδέσεις πρέπει να έχουν μικρό μήκος για την περαιτέρω ελαχιστοποίηση των παρασίτων επίσης [1.4].



Σχήμα 1.21: Τα αποτελέσματα C-V σε διάφορες συχνότητες από ένα δείγμα που έχει υποστεί ανόπτηση Au/La_x-Zr_{1-x}-O₂-δ/p-Si για x=0.09 [1.6].

1.1.5.5. Διασπορά της συχνότητας στην αναστροφή για Ge

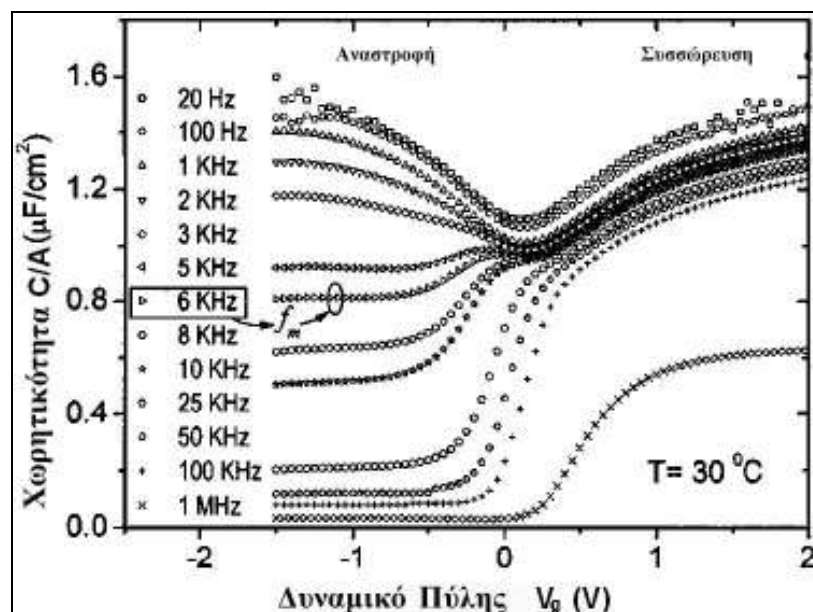
Τα MOSFETs γερμανίου με διηλεκτρικές πύλες υψηλής-κ μπορεί να αποτελούν καλές εναλλακτικές λύσεις για μελλοντικές ηλεκτρονικές διατάξεις υψηλής ταχύτητας [1.6].

Η συμπεριφορά των καμπυλών χωρητικότητας-δυναμικού (C-V) σε χαμηλή συχνότητα (σχήμα 1.22), ή πιο συγκεκριμένα, η παρατήρηση μιας υψηλής χωρητικότητας ac σε αναστροφή [1.7] (κοντά στην τιμή της χωρητικότητας του οξειδίου C_{ox}) αποδίδεται συνήθως σε ανεπιθύμητες προσμίξεις [1.8-1.10] λόγω της κακής ποιότητας του μεγαλύτερου μέρους του αρχικού υλικού του Ge ή λόγω της μη επαρκούς επίστρωσης της επιφάνειας κάτι το οποίο δημιουργεί μεγάλης πυκνότητας διεπιφανειακές παγίδες ή παγίδες λόγω των κενών στον όγκο του ημιαγωγού. Αυτές οι παγίδες θεωρείται ότι μεσολαβούν στη δημιουργία ζευγών οπών-ηλεκτρονίων στη απογύμνωση έτσι ώστε να παρέχουν τις απαραίτητες

προϋποθέσεις στους φορείς μειοψηφίας για τη δημιουργία του στρώματος αναστροφής και δίνουν μια υψηλή τιμή στη χωρητικότητα.

Η πυκνότητα των φορέων μειοψηφίας στο Ge ωστόσο είναι μεγαλύτερη από αυτή του Si λόγω του μικρού ενεργειακού χάσματος (ή της υψηλότερης συγκέντρωσης ενδογενών φορέων n_i). Αυτό μπορεί να επιφέρει συμπεριφορά χαμηλής συχνότητας στο Ge σε υψηλές συχνότητες του σήματος μέτρησης.

Πραγματικά, οι Nicollian και Brews είχαν ήδη προβλέψει αυτή τη συμπεριφορά πολύ πριν. Έτσι όρισαν ως f_m [1.3] τη συχνότητα εκείνη στην οποία η χωρητικότητα στην αναστροφή παίρνει τιμή στο μέσο μεταξύ της υψηλής C_{in} (20 Hz) και χαμηλής C_{HF} . Έτσι ορίζεται η μετάβαση από την συμπεριφορά χαμηλής συχνότητας στην αντίστοιχη υψηλής.



Σχήμα 1.22: Χαρακτηριστικές C-V σε θερμοκρασία δωματίου μιας διάταξης Pt/HfO₂/n-Ge MOS που έχουν μετρηθεί σε διάφορες συχνότητες από 20 Hz έως 1MHz. Μεγάλη διασπορά συχνότητας παρατηρείται στην αναστροφή (αρνητικό V_g). Η συχνότητα μετάβασης f_m 6 kHz ορίζεται ως η συχνότητα στην οποία η χωρητικότητα αναστροφής είναι μεταξύ των χαμηλών και των υψηλών τιμών.

Λόγω του μικρού χρόνου απόκρισης των φορέων μειονότητας στο Ge ένα στρώμα αναστροφής μπορεί να αναπτυχθεί γρήγορα σε απόκριση ενός εξωτερικού σήματος ac στην πύλη έτσι ώστε μια χωρητικότητα ίση με την C_{ox} να εμφανίζεται ακόμη και σε συχνότητες γύρω στο 1kHz.

1.1.6. Σειριακή αντίσταση των διόδων MOS

Η σειριακή αντίσταση (R_s) στις διόδους MOS έχει να κάνει με προβλήματα κατά τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό τους. Αυτά τα προβλήματα σχετίζονται με την αδυναμία δημιουργίας ωμικής επαφής στο πίσω μέρος του ημιαγωγού, με την ύπαρξη ξένων ουσιών μεταξύ ακίδας μέτρησης και μεταλλικής επαφής καθώς επίσης και με την ανομοιομορφία στην κατανομή των προσμίξεων του ημιαγωγού. Η σειριακή αντίσταση επηρεάζει τη μέτρηση χωρητικότητας – τάσης και αγωγιμότητας – τάσης στην περιοχή της συσσώρευσης για μεγάλες συχνότητες σήματος. Η R_s υπολογίζεται από τη σχέση [1.3]:

$$R_s = \frac{G_{ma}}{G_{ma}^2 + \omega^2 C_{ma}^2} \quad (1.49)$$

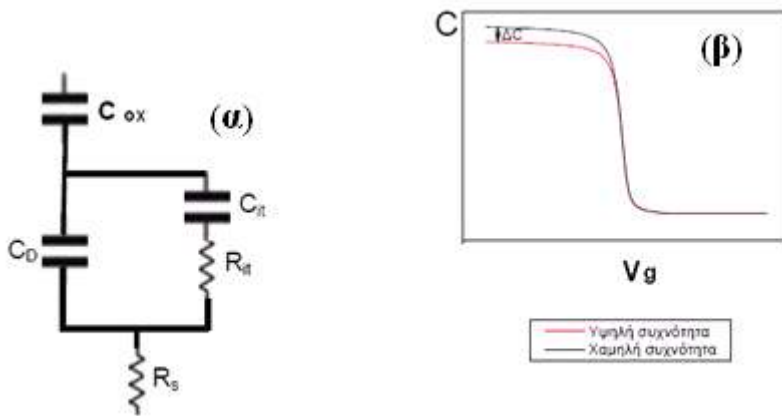
όπου ω είναι η συχνότητα του σήματος, G_{ma} και C_{ma} η μετρούμενη αγωγιμότητα και η μετρούμενη χωρητικότητα στην περιοχή της συσσώρευσης για μεγάλη συχνότητα σήματος ($\sim 1\text{MHz}$). Οι τιμές της διορθωμένης ως προς την R_s χωρητικότητας και αγωγιμότητας δίνονται από τις σχέσεις

$$C_c = \frac{(G_m^2 + \omega^2 C_m^2) C_m}{a^2 + \omega^2 C_m^2} \quad (1.50)$$

$$G_c = \frac{(G_m^2 + \omega^2 C_m^2) a}{a^2 + \omega^2 C_m^2} \quad (1.51)$$

όπου $a = G_m - (G_m^2 + \omega^2 C_m^2) R_s$.

Το κύκλωμα με την ενσωμάτωση της R_s φαίνεται στο σχήμα 1.23(α) ενώ η επίδραση της στις χαρακτηριστικές C-V φαίνεται στα σχήματα 1.23(β)



Σχήμα 1.23: (α) Ισοδύναμο κύκλωμα πραγματικής διόδου MOS παρουσία σειριακής αντίστασης R_s (β) Επίδραση της R_s στην καμπύλη C-V και (γ) στην καμπύλη G-V

1.1.7. Ισοδύναμο ηλεκτρικό πάχος (Equivalent Oxide Thickness: EOT)

Στα MOSFET, είναι απαραίτητο να χρησιμοποιείται οξείδιο με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη διηλεκτρική σταθερά, ώστε να αυξάνεται η χωρητικότητα του πυκνωτή MOS, να διευκολύνεται το κανάλι με φορείς (να μπορούν να μαζευτούν όλο και περισσότεροι φορείς στο κανάλι) και συμπληρωματικά για να μειωθεί η διαρροή. Στους πυκνωτές, η χωρητικότητα δίνεται από τη σχέση $C = k_{ox} \cdot \epsilon_0 \cdot A / d_{ox}$ όπου A είναι το εμβαδόν του, k_{ox} η διηλεκτρική του σταθερά και d_{ox} το πάχος του. Αυτό σημαίνει ότι για να αυξηθεί η χωρητικότητα, για συγκεκριμένα k_{ox} και A , θα πρέπει να μειωθεί το πάχος του οξειδίου. Μειώνοντας όμως το πάχος του οξειδίου, καταστρέφονται οι μονωτικές ιδιότητες του και έτσι όλο και μεγαλύτερα ρεύματα διαρροής περνάνε μέσα από αυτό (τα ρεύματα διαρροής εξαρτώνται τόσο από το πάχος του οξειδίου όσο και από το ενεργειακό του χάσμα, αλλά περισσότερο από το πάχος του).

Εάν βρεθεί ένα διηλεκτρικό με k_{ox} μεγαλύτερο από το k του SiO_2 , $k(SiO_2)=3.9$, τότε θα μπορεί να κρατηθεί η χωρητικότητα σταθερή, αυξάνοντας το πάχος του οξειδίου (έχοντας έτσι μικρότερα ρεύματα διαρροής). Από τη στιγμή που απαιτείται η ίδια χωρητικότητα για τις περιπτώσεις του SiO_2 και του οξειδίου υψηλού k_{ox} , τότε

$$k_{ox} \cdot \varepsilon_0 \cdot A / d_{ox} = k_{SiO_2} \cdot \varepsilon_0 \cdot A / EOT \quad \text{οπότε}$$

$$EOT = \frac{k_{SiO_2}}{k_{ox}} \cdot d_{ox} \quad (1.52)$$

Άρα, το EOT είναι το πάχος εκείνο του SiO_2 που δίνει την ίδια χωρητικότητα με ένα οξείδιο μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς πάχους d_{ox} όταν χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία δομών MOS. Στις διόδους MOS, είναι επιθυμητές όσο το δυνατόν μικρότερες τιμές του EOT.

1.1.8. Υπολογισμός των χαρακτηριστικών παραμέτρων των πυκνωτών MOS

Σε αυτή την παράγραφο θα προβληθούν οι βασικές σχέσεις για την ανάλυση και επεξεργασία των χαρακτηριστικών χωρητικότητας-τάσης υψηλών συχνοτήτων (1MHz). Στον ακόλουθο πίνακα 1.1 παραθέτουμε τους συμβολισμούς που θα μας χρησιμεύσουν στην θεωρητική ανάλυση. Για να δηλώσουμε μεγέθη τα οποία υπολογίζονται με την χρήση των σχέσεων που προτείνονται στην ανάλυση που ακολουθεί, τα σύμβολα θα είναι τυπωμένα με πλάγια γραφή.

Πίνακας 1.1 Κατάλογος χρησιμοποιούμενων συμβόλων

Σύμβολο Περιγραφή

A	Επιφάνεια μετάλλου πύλης (m^2)
t_{ox}	Πάχος οξειδίου (m)
N_b	Συγκέντρωση προσμίξεων νόθευσης υποστρώματος (cm^{-3})
C_{fb}	Χωρητικότητα κατάστασης επιπέδων ζωνών (F)
V_{fb}	Τάση επίτευξης επιπέδων ζωνών (V)
N_f	Αριθμός μόνιμων φορτίων ανά μονάδα επιφάνειας (cm^{-2})
V_{th}	Τάση κατωφλίου (V)
C_{acc}	Χωρητικότητα σε κατάσταση ισχυρής συσσώρευσης
C_{ox}	Χωρητικότητα του οξειδίου (F)
ϵ_{ox}	Διηλεκτρική σταθερά του οξειδίου (F/m)
ϵ_{Si}	Διηλεκτρική σταθερά του πυριτίου
W_{max}	Μέγιστο πάχος της περιοχής απογύμνωσης (m)
k	Σταθερά του Boltzmann (J/K)
T	Θερμοκρασία (K)
n_i	Ενδογενής συγκέντρωση ελευθέρων φορέων του πυριτίου (cm^{-3})
q	Φορτίο ηλεκτρονίου (Cb)
C_{inv}	Χωρητικότητα κατάστασης αναστροφής (F)
L_b	Μήκος Debye σε νοθευμένο με επιθυμητές προσμίξεις ημιαγωγό (m)
C_{fbs}	Χωρητικότητα του ημιαγωγού σε κατάσταση επιπέδων ζωνών (F)
Q_{bsc}	Ολικό φορτίο της περιοχής απογύμνωσης (Cb/cm^2)
N_{bsc}	Αριθμός φορτίων περιοχής απογύμνωσης ανά μονάδα επιφάνειας (cm^{-2})
Q_{ss}	Συνολικό διεπιφανειακό φορτίο (Cb/cm^2)
ϕ_{ms}	Διαφορά των έργων εξαγωγής μετάλλου και ημιαγωγού (eV)
ϕ_b	Η διαφορά ανάμεσα στην στάθμη Fermi E_F του ημιαγωγού και την ενδογενή Fermi E_i , στο ηλεκτρικά ουδέτερο τμήμα του υποστρώματος (eV)
ϕ_{max}	Η μέγιστη διαφορά των σταθμών Fermi στην διεπιφάνεια (eV)

1.1.8.1. Επιφάνεια πύλης και πάχος οξειδίου

Δοθέντος του πάχους του οξειδίου είναι δυνατός ο υπολογισμός της επιφάνειας

της μεταλλικής επαφής, σε περίπτωση όπου το σχήμα της είναι ακαθόριστο. Η μέτρηση του πάχους του οξειδίου μπορεί να γίνει με την χρήση ελλεισομέτρου ή XRR. Αν θεωρήσουμε το μοντέλο του μονοδιάστατου πυκνωτή με παράλληλους οπλισμούς έχουμε

$$C_{acc} \equiv C_{ox} = \frac{\epsilon_o A}{t_{ox}} \quad (1.53)$$

Το πάχος του οξειδίου μπορούμε να το υπολογίσουμε αν γνωρίζουμε και την ακριβή επιφάνεια της μεταλλικής επαφής. Η σύγκριση αυτής της τιμής με εκείνη των δομικών μετρήσεων (TEM και ελλεισομετρίας) μας δίνει μια εκτίμηση της σειριακής αντίστασης στην όλη πειραματική διάταξη.

1.1.8.2. Υπολογισμός του μέγιστου πάχους απογύμνωσης

Εφαρμόζοντας την θεωρία για την επιφανειακή απογύμνωση ενός ημιαγωγικού στρώματος, έχουμε ότι το μέγιστο πάχος του απογυμνωμένου από ευκίνητους φορείς στρώματος θα δίνεται από την σχέση

$$W_F = \epsilon_S A \left(\frac{1}{C_{min}} - \frac{1}{C_{ox}} \right) = \epsilon_S A \left(\frac{1}{C_{inv}} - \frac{1}{C_{ox}} \right) \quad (1.54)$$

1.1.8.3. Υπολογισμός της συγκέντρωσης προσμίξεων N_b

Θεωρώντας ότι οι προσμίξεις του ημιαγωγικού υποστρώματος είναι ομοιόμορφα κατανομημένες με συγκέντρωση N_b , μπορούμε να εφαρμόσουμε την μέθοδο της μεγίστης-ελαχίστης χωρητικότητας για τον υπολογισμό της. Είναι συνηθισμένο όμως φαινόμενο να μην έχουμε ομοιόμορφη συγκέντρωση N_b . Σε αυτή την περίπτωση, η μέθοδος μας δίνει μια εκτίμηση της μέσης τιμής της συγκέντρωσης

αυτής. Λαμβάνοντας υπόψη ότι το μέγιστο δυναμικό στην διεπιφάνεια δίνεται από την σχέση του Linder

$$\varphi_{\max} = 2\varphi_b + \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{2q\varphi_b}{kT} - 1\right) \quad (1.55)$$

όπου φυσικά

$$\varphi_b = \left(\frac{-p}{+n}\right) \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_b}{n_i}\right) \quad (1.56)$$

Αλλά από την (1.54) προκύπτει ότι

$$W_F = \frac{2\varepsilon_s \phi_{\max}}{qN_b} \quad (1.57)$$

Εξισώνοντας τις σχέσεις (1.54) και (1.55) έχουμε

$$N_b = \frac{4kT}{q^2 \varepsilon_s A^2} \left(\frac{C_{ox} \cdot C_{\min}}{C_{ox} - C_{\min}}\right)^2 \left[\ln\left(\frac{N_b}{n_i}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(2 \ln\left(\frac{N_b}{n_i}\right) - 1\right) \right] \quad (1.58)$$

Η τελευταία σχέση είναι μια υπερβατική εξίσωση η οποία λύνεται πάρα πολύ σύντομα και εύκολα με μια από τις επαναληπτικές μεθόδους αριθμητικής επίλυσης εξισώσεων.

Αν δεν χρησιμοποιήσουμε το δυναμικό επιφάνειας όπως αυτό δίνεται από την σχέση (1.55) αλλά από την προσεγγιστική σχέση

$$\Phi_{\max} = 2\varphi_b \quad (1.59)$$

τότε η σχέση (1.58) απλοποιείται σημαντικά

$$N_b = \frac{4kT}{q^2 \varepsilon_s A^2} \left(\frac{C_{\min}}{C_{ox} - C_{\min}}\right)^2 \ln\left(\frac{N_b}{n_i}\right) \quad (1.60)$$

1.1.8.4. Υπολογισμός του μήκους Debye

Ο υπολογισμός του μήκους Debye για νοθευμένο ημιαγωγό δίνεται από την σχέση

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_s kT}{q^2 N_D}} \quad (1.61)$$

1.1.8.5. Υπολογισμός της χωρητικότητας σε κατάσταση επιπέδων ζωνών

Η χωρητικότητα σε κατάσταση επιπέδων ζωνών της περιοχής απογύμνωσης θα δίνεται από την σχέση

$$C_{fbs} = \frac{\epsilon_s A}{L_D} \quad (1.62)$$

Επομένως η ολική χωρητικότητα σε κατάσταση επιπέδων ζωνών θα είναι

$$C_{fb} = \frac{C_{ox} C_{fbs}}{C_{ox} + C_{fbs}} \quad (1.63)$$

1.1.8.6. Υπολογισμός της τάσης σε κατάσταση επιπέδων ζωνών

Η C_{fb} είναι η μετρούμενη χωρητικότητα σε αυτήν την κατάσταση και συνεπώς μπορεί να βρεθεί πολύ εύκολα με κάποια από τις αριθμητικές μεθόδους παρεμβολής στα σημεία της χαρακτηριστικής καμπύλης η τάση για την οποία μετριέται. Με το τρόπο αυτό υπολογίζεται η τάση V_{fb} . Η ακρίβεια υπολογισμού της είναι μικρότερη του 1% ακόμα και για την απλή μέθοδο της γραμμικής παρεμβολής.

1.1.8.7. Υπολογισμός του ολικού φορτίου της περιοχής απογύμνωσης

Το μέγιστο φορτίο της περιοχής απογύμνωσης υπολογίζεται εύκολα από την σχέση

$$Q_{bsc} = \left(\begin{smallmatrix} -p \\ +n \end{smallmatrix} \right) \sqrt{4q\epsilon_S |\phi_b| N_b} \quad (1.64)$$

και επομένως η επιφανειακή τους συγκέντρωση θα είναι: $N_{bsc} = Q_{bsc} A / Q$ (1.65)

1.1.8.8. Υπολογισμός του συνολικού διεπιφανιακού φορτίου

Το φορτίο αυτό θα δίνεται από την σχέση: $Q_{ss} = C_{ox} (\Phi_{MS} - V_{FB})$ (1.66)

1.1.8.9. Υπολογισμός του μόνιμου φορτίου του οξειδίου

Τα μόνιμα φορτία του οξειδίου τα οποία βρίσκονται πλησίον της διεπιφάνειας προκαλούν μια πτώση τάσης V_f ίση με

$$V_f = q t_{ox} N_f / \epsilon_{ox} = q A N_f / C_{ox} \quad (1.67)$$

Αλλά από την τάση V_{fb} έχουμε ότι

$$V_f = \left| V_{fb} - \phi_{ms} - \left(\begin{smallmatrix} -p \\ +n \end{smallmatrix} \right) \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_b}{n_i} \right) \right| \quad (1.68)$$

Εξισώνοντας τις (1.67) και (1.68) έχουμε ότι

$$N_f = \frac{C_{ox}}{qA} \left| V_{fb} - \phi_{ms} - \left(\frac{-p}{+n} \right) \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_b}{n_i} \right) \right| \quad (1.69)$$

1.1.8.10. Υπολογισμός της τάσης κατωφλίου

Η τάση κατωφλίου είναι εκείνη κατά την οποία το δυναμικό επιφανείας είναι ίσο με $2\phi_b$. Συνεπώς:

$$V_{th} = V_{fb} + V_{ox} + \left(\frac{+p}{-n} \right) \frac{2kT}{q} \ln \left(\frac{N_b}{n_i} \right) \quad (1.70)$$

και υπολογίζοντας την πτώση τάσης στο οξειδίο V_{ox} βρίσκουμε τελικά ότι

$$V_{th} = V_{fb} + \left(\frac{+p}{-n} \right) \left[\frac{q\epsilon_s A^2 N_b}{C_{ox}} \frac{C_{ox} - C_{inv}}{C_{ox} C_{inv}} + \frac{2kT}{q} \ln \left(\frac{N_b}{n_i} \right) \right] \quad (1.71)$$

1.1.9. Οξειδία Υψηλής Διηλεκτρικής Σταθεράς (High-k)

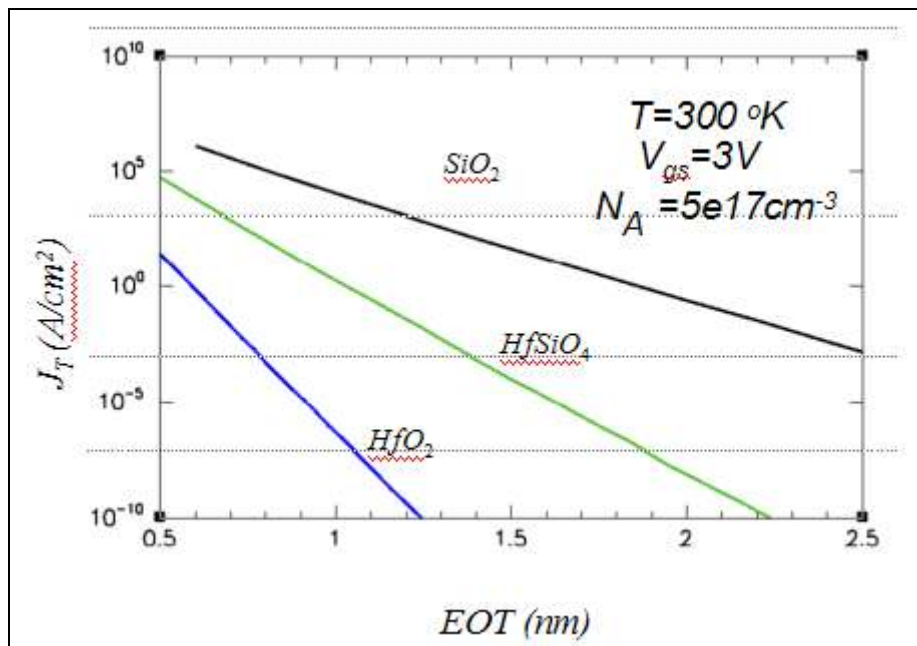
Για να περιορίσουμε το ρεύμα σήραγγας καθώς και για να αποφύγουμε θέματα αξιοπιστίας [1.11 – 1.13], το φυσικό πάχος της πύλης του διηλεκτρικού πρέπει να αυξηθεί. Ωστόσο, το πολύ λεπτό στρώμα SiO_2 χρησιμοποιείται για να παραχθεί μεγάλης έντασης ηλεκτρικό πεδίο στην κατακόρυφη κατεύθυνση, το οποίο είναι κρίσιμο για να ελεγχθούν φαινόμενα βραχυκύκλωσης μεταξύ πηγής και απαγωγού (short-channel effects) και να εξασφαλιστεί επαρκές ρεύμα οδήγησης (drive current) στο υπόστρωμα του MOSFET. Για αυτό το λόγο, το ηλεκτρικό πάχος του διηλεκτρικού της πύλης πρέπει να μειωθεί ενόσω το φυσικό πάχος πρέπει τουλάχιστον να παραμείνει ως έχει. Η μόνη δυνατή λύση είναι να αντικατασταθεί το οξειδίο του πυριτίου με υλικά μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) για τη μόνωση της πύλης.

Μεταξύ αρκετών υλικών μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k), το HfO_2 και το $HfSiO_4$ εμφανίστηκαν να είναι οι πιο ελπιδοφόροι υποψήφιοι για να αντικαταστήσουν το οξείδιο του πυριτίου [1.14], [1.15]. Όσο αυξάνεται η διηλεκτρική σταθερά, τόσο τα υλικά μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) τείνουν να μειώνουν το ύψος του φραγμού [1.14]. Ένα ισοδύναμο πάχος οξειδίων (EOT) μπορεί να εισαχθεί για μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) υλικά. Καθορίζει το πάχος εκείνο του οξειδίου του πυριτίου που απαιτείται για να λάβει την ίδια χωρητικότητα πύλης με αυτήν που λαμβάνεται από μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) υλικά,

$$EOT = \epsilon_{ox} t_l / \kappa \epsilon_0 \quad (1.73)$$

όπου το κ και το t_l είναι η διηλεκτρική σταθερά και το φυσικό πάχος των διηλεκτρικών μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) αντιστοίχως.

Αν και η πυκνότητα του ρεύματος σήραγγας της πύλης μειώνεται από τα μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς (high-k) υλικά, προκύπτουν νέα ζητήματα επεξεργασίας και σχεδιασμού των διατάξεων. Αυτά περιλαμβάνουν το φαινόμενο FIBL (Fringing-Induced Barrier Lowering) [1.13], [1.16] και ατέλειες διεπαφών [1.17]. Το FIBL αναγκάζει το ρεύμα διαρροής off-state (off-state leakage current) να αυξηθεί και υποβιβάζει τα χαρακτηριστικά της τάσης κατωφλίου [1.19]. Οι ατέλειες διεπαφών μειώνουν την κινητικότητα στο κανάλι και το ρεύμα οδήγησης (drive current) μειώνεται. [1.16-1.20].



Σχήμα 1.24: Σύγκριση ρευμάτων σήραγγας σε διάφορα μονωτικά υλικά της πύλης: SiO_2 , $HfSiO_4$, και HfO_2 .

1.2. Αναφορές

[1.1] U. K. Mishra, J. Singh "Semiconductor device physics and design", Springer, 2008

[1.2] R. Degraeve, G. Groeseneken, R. Bellens, J.L. Ogiger, M. Deopas, P. Roussel, and H Maes, *New insights in the relation between electron trap generation and the statistical properties of oxide breakdown*, IEEE Trans. Electron Devices, 45, p. 904, (1998).

[1.3] E. H. Nicollian and J. R. Brews, *MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology* (Wiley-Inter science, New York, NY, 1982).

[1.4] L. Zhijiong and T. P. Ma, *A new method to extract EOT of ultrathin gate dielectric with high leakage current*, IEEE Electron Device Lett., 25, p.655 (2004).

- [1.5] O. Bierwagen, L. Geelhaar, X. Gay, M. Piešinš, H. Riechert, B. Jobst, and A. Rucki, *Leakage currents at crystallites in $ZrAl_xO_y$ thin films measured by conductive atomic-force microscopy*, Appl. Phys. Lett., 90, p.232901, (2007).
- [1.6] C. Z. Zhao, S. Taylor, M. Werner, P. R. Chalker, R. T. Murray, J. M. Gaskell, and A. C. Jones, J. Appl. Phys., 105, p.044102, (2009).
- [1.7] K. Martens, C. O. Chui, G. Brammertz, B. D. Jaeger, D. Kuzum, M. Meuris, M. M. Heyns, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat, H. E. Maes, et al., *On the Correct Extraction of Interface Trap Density of MOS Devices With High-Mobility Semiconductor Substrates*, IEEE Trans. Electron Devices, 55, p.547 (2008).
- [1.8] H. Kim C. Chui, K.C. Saraswat, P.C. McIntyre, *Local epitaxial growth of ZrO_2 on $Ge(100)$ substrates by atomic layer epitaxy*, Appl. Phys. Lett., 83, p.2647 (2003).
- [1.9] A. Dimoulas, G. Vellianitis, G. Mavrou, E. K. Evangelou, and A. Sotiropoulos, *Intrinsic carrier effects in HfO_2 - Ge metal-insulator-semiconductor capacitors*, A. Phys. Lett., 86, p.223507, (2005).
- [1.10] S. J. Whang, S.J. Lee, F. Gao, N.Wu, C.X. Zhu, J.S. Pan, L.J. Tang, D.-L. Kwong, *IEDM'04 Tech. Dig.*, p. 307 (2004).
- [1.11] T. Yuan, D. A. Buchanan, C. Wei, D. J. Frank, K. E. Ismail, L. Shih-Hsien, G. A. Sai-Halasz, R. G. Viswanathan, H. J. C. Wann, S. J. Wind, and W. Hon-Sum, *CMOS scaling into the nanometer regime*, Proceedings of the IEEE, vol. 85, no. 4, pp. 486-504, 1997.
- [1.12] H. S. Momose, M. Ono, T. Yoshitomi, T. Ohguro, S. Nakamura, M. Saito, and H. Iwai, *Tunneling gate oxide approach to ultra-high current drive in small geometry MOSFETs*, International Electron Devices Meeting 1994. Technical Digest 1994, pp. 593-596.
- [1.13] D. A. Buchanan, *Scaling the gate dielectric: materials, integration, and reliability*, Ibm Journal of Research and Development, vol. 43, no. 3, pp.245-264, May1999.
- [1.14] R. M. Wallace and G. D. Wilk, *High- κ Dielectric Materials for*

Microelectronics, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, vol.28, no. 4, p. 55, 2003.

[1.15] K. Yamamoto, W. Deweerd, M. Aoulaiche, M. Houssa, S. De Gendt, S. Horii, M. Asai, A. Sano, S. Hayashi, and M. Niwa, *Electrical and physical characterization of remote plasma oxidized HfO₂ gate dielectrics*, *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 53, no. 5, pp. 1153-1160, 2006.

[1.16] P. M. Zeitzoff, *MOSFET scaling trends and challenges through the end of the roadmap*, *Proc. IEEE Custom Integrated Circuits Conference 2004*, pp.233-240.

[1.17] L. Kang, K. Onishi, Y. Jeon, H. L. Byoung, C. Kang, Q. Wen-Jie, R. Nieh, S. Gopalan, R. Choi, and J. C. Lee, *MOSFET devices with polysilicon on single-layer HfO₂ high-k dielectrics*, *IEDM Tech. Dig. 2000*, pp. 35-38.

[1.18] K. Onishi, S. K. Chang, C. Rino, C. Hag-Ju, H. K. Young, S. Krishnan, M. S. Akbar, and J. C. Lee, *Performance of polysilicon gate HfO₂/MOSFETs on [100] and [111] silicon substrates*, *Electron Device Letters, IEEE*, vol. 24, no. 4, pp.254-256, 2003.

[1.19] C. Qiang, W. Lihui, and J. D. Meindl, *Impact of high-k dielectrics on undoped double-gate MOSFET scaling*, *IEEE International SOI Conference 2002*, pp.115-116.

[1.20] T. Skotnicki, J. A. Hutchby, K. Tsu-Jae, H. S. P. Wong, and F. Boeuf, *The end of CMOS scaling: toward the introduction of new materials and structural changes to improve MOSFET performance*, *Circuits and Devices Magazine, IEEE*, vol. 21, no. 1, pp. 16-26, 2005.

[1.21] Γ. Χαϊδόγιαννος, *Κατασκευή και χαρακτηρισμός νανοδιατάξεων ετεροεπαφών με μοριακά και ημιαγωγικά υλικά*, Μεταπτυχιακή εργασία, Αθήνα, Ιούνιος 2002

[1.22] D. K. Schroder, *Semiconductor Material and Device Characterization, 2nd ed.*, John Wiley & Sons, New York (1998).

2. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ ΈΛΕΓΧΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

2.1. Εισαγωγή

Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται ένα υπολογιστικά αποδοτικό και ακριβές μοντέλο για τη χωρητικότητα που αναπτύσσεται στην πύλη διατάξεων MOS που περιλαμβάνουν προηγμένα υπέρλεπτα οξειδία με ισοδύναμο πάχος (EOT) κάτω από 0.5nm. Οι δομές αυτές βρίσκουν εφαρμογή στην τρέχουσα και στου άμεση μελλοντική τεχνολογία ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Στις περιπτώσεις αυτές όπου το πάχος του διηλεκτρικού της πύλης είναι τόσο μικρό, η μοντελοποίηση των κβαντομηχανικών φαινομένων με την απλή θεώρηση ενός άπειρου τριγωνικού κβαντικού φρέατος στη διεπιφάνεια Si – υποστρώματος μπορεί να οδηγήσει σε απaráδεκτες υποεκτιμήσεις των προσδιοριζόμενων χωρητικοτήτων της πύλης.

Στο παρόν μοντέλο επανεξετάζονται τα κβαντομηχανικά φαινόμενα με διεξαγωγή αυτοσυνεπών (self-consistent) αριθμητικών υπολογισμών Schrödinger – Poisson. Οι κβαντικά διορθωμένοι υπολογισμοί της χαρακτηριστικής χωρητικότητας πύλης – τάσης ($C - V$) συνδέονται άμεσα με τη μετατόπιση της στάθμης Fermi και κατά συνέπεια με την τάση.

Το μοντέλο κατασκευάστηκε και δοκιμάστηκε με συγκρίσεις τόσο με αριθμητικούς υπολογισμούς μέχρι 0.5nm όσο και με πειραματικά δεδομένα από διατάξεις n-MOS και p-MOS με δείγματα Πυριτίου (HfO_2) και Γερμανίου (La_2O_3) και διηλεκτρικό υψηλού διηλεκτρικού συντελεστή κ (π.χ. HfO_2 , ZrO_2) σε (100) πυρίτιο με EOT μέχρι 1.3nm. Το (συμπαγές) μοντέλο προσαρμόστηκε έτσι ώστε να λαμβάνει υπόψη διεπιφανειακές καταστάσεις και φαινόμενα απογύμνωσης και συσσώρευσης όταν χρησιμοποιείται πολυπυρίτιο στην πύλη.

2.1.1. Ανάγκη Ανάπτυξης και Ελέγχου του Μοντέλου

Καθώς συνεχίζεται η ραγδαία συρρίκνωση στην τεχνολογία CMOS και για να αποφευχθούν οι γνωστές τεχνολογικές δυσκολίες που αφορούν στα μεγάλα

ρεύματα διαρροής μέσω της πύλης και αλλά σχετικά φαινόμενα που εμφανίζονται στο πολυπυρίτιο, γίνεται μια αναζήτηση υλικών με μεγάλη διηλεκτρική σταθερά και μιας τεχνολογίας μετάλλου πύλης έτσι ώστε να αντικαταστήσουν το SiO_2 και την πύλη πολυπυριτίου αντίστοιχα. Παρόλα αυτά οι συμβατικές τεχνικές ανάλυσης για το οξειδίο και για τις διατάξεις MOS, όπως οι μετρήσεις χαρακτηριστικών χωρητικότητας της πύλης – τάσης (C-V) και ρεύματος – τάσης (I – V) παραμένουν σημαντικές για τον χαρακτηρισμό των διηλεκτρικών της πύλης και γενικότερα των διατάξεων MOS και παρέχουν σημαντικές πληροφορίες όπως το EOT του διηλεκτρικού, το φορτίο στο οξειδίο, το έργο εξόδου μετάλλου – πύλης, την πυκνότητα επιφανειακών προσμείξεων και τις καταστάσεις των διεπιφανειών.

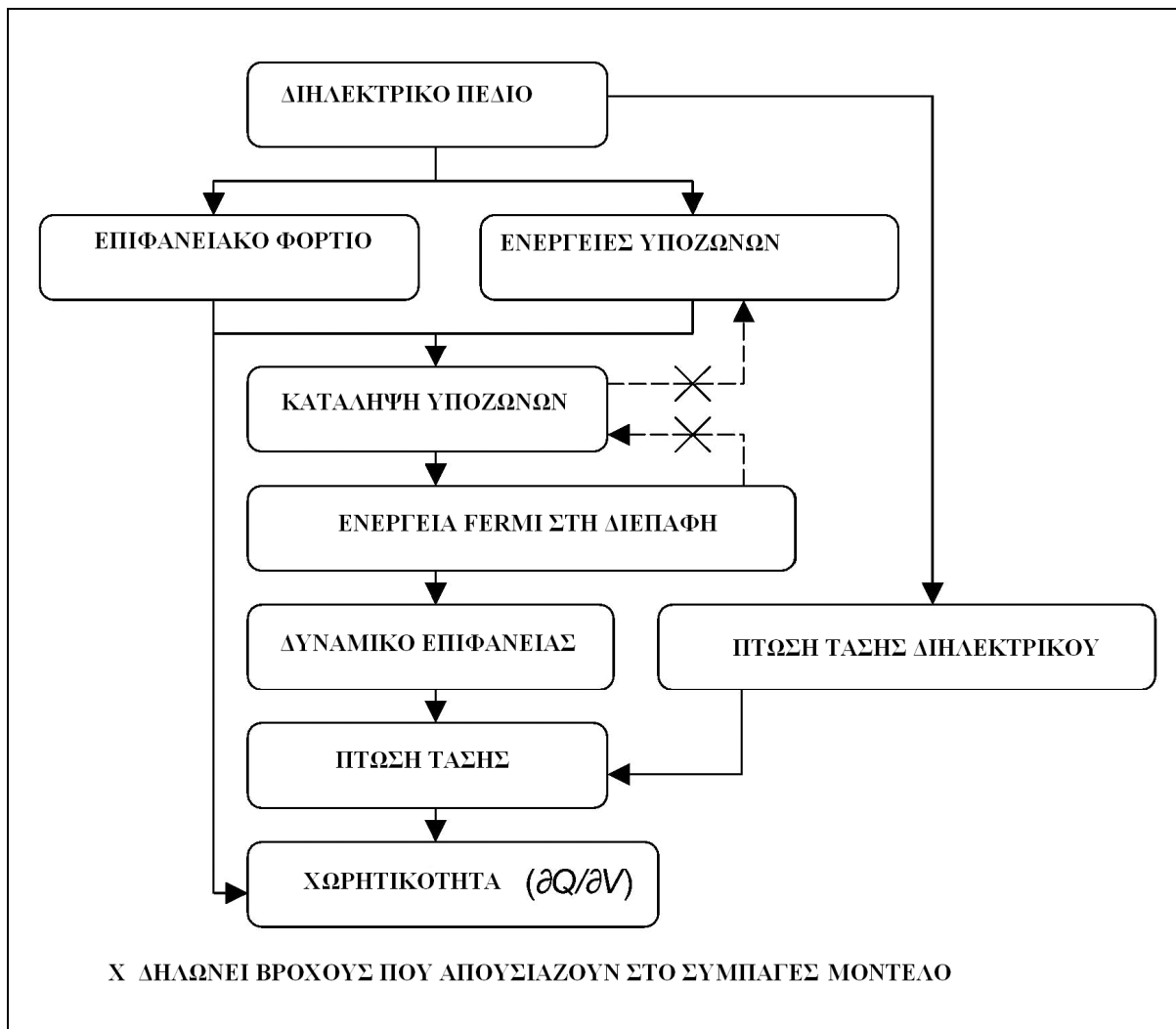
Η ερμηνεία των δεδομένων C-V αποτελεί πρόκληση καθώς προχωράμε σε μικρότερες διαστάσεις, καθώς μη μηδενικές συσσωρεύσεις φορτίου και στρώματα ισχυρής απογύμνωσης προκαλούν έντονα φαινόμενα. Έτσι η χωρητικότητα εμφανίζεται μειωμένη σε σύγκριση με αυτή που αναμένεται. Το πρόβλημα γίνεται εντονότερο λόγω του κβαντικού περιορισμού (quantum confinement) και της απαγορευτικής αρχής του Pauli, αφού οι φορείς εξωθούνται ακόμα περισσότερο από τη διηλεκτρική επιφάνεια και αυξάνονται οι ενέργειες των φορέων, ως προς αυτές που θα αναμέναμε κλασσικά [2.2]. Τα φαινόμενα σήραγγας ανακουφίζουν τις παραπάνω συσσωρεύσεις φορέων [2.3] – [2.7]. Παρόλο που αυτή η συμπεριφορά μπορεί να αντιμετωπιστεί από μια προσέγγιση με αριθμητική ανάλυση [2.3], [2.6] η αυξανόμενη πολυπλοκότητα, σε φυσικό επίπεδο, καθιστά δύσκολη την ανάπτυξη μοντέλων που να βρίσκουν εφαρμογή σε διαστάσεις με EOT $\sim 1\text{nm}$ και μικρότερο. Ενώ τέτοιου είδους προσομοιωτές C-V παρέχουν μια ακριβή και κατανοητή εικόνα των φαινομένων αυτών, είναι απαραίτητη και η ύπαρξη αποδοτικών αναλυτικών μοντέλων με παρόμοια ακρίβεια περιγραφής σε πρακτικές καθημερινές διατάξεις καθώς και στη μελέτη κυκλωμάτων.

2.2. Ανάλυση του Μοντέλου

2.2.1. Βασικές Αρχές Δόμησης του Μοντέλου

Στην παρούσα εργασία βασισμένοι στη βασική φυσική, στην αναλυτική θεωρία [2.7] και σε αυτοσυνεπείς (self-consistent) αριθμητικούς υπολογισμούς Schrödinger – Poisson [2.4] – [2.6], [2.8], [2.9], αναπτύξαμε ένα νέο (συμπαγές) μοντέλο $C - V$ για EOT διαστάσεων $\sim 1\text{nm}$ και λιγότερο. Από συγκρίσεις, με αριθμητικές προσομοιώσεις σε διηλεκτρικά πύλης με EOT μέχρι 0.5nm και με πειραματικά δεδομένα από διατάξεις n-MOS και p-MOS με διηλεκτρικά πύλης μεγέθους EOT 1.29nm , συμπεριλαμβανομένων διατάξεων La_2O_3 και HfO_2 , προέκυψε ότι υπάρχει πολύ μεγάλη ακρίβεια και αποδοτικότητα στο μοντέλο για διατάξεις πύλης μετάλλου σε πυρίτιο και γερμάνιο. Οι υπολογιστικοί χρόνοι για τον υπολογισμό των καμπυλών $C - V$ είναι περίπου μερικές δεκάδες ms ανά σημείο σε PC.

Παρόλο που δεν αποτελεί καθαυτό αντικείμενο της εργασίας, για λόγους πληρότητας, στο μοντέλο προστέθηκαν, επίσης, φαινόμενα πολλαπλής απογύμνωσης και πολλαπλής συσσώρευσης στην χωρητικότητα της πύλης, ενώ έγιναν σχετικές συγκρίσεις με αριθμητικές προσομοιώσεις και πειραματικά δεδομένα. Επίσης, στο μοντέλο προστέθηκαν και δοκιμάστηκαν με αριθμητική προσομοίωση επιφανειακές ατέλειες. Τέλος, αν και η παρούσα δουλειά σχετικά με ένα (συμπαγές) μοντέλο $C - V$ αποτελεί μια ολοκληρωμένη εργασία, σημειώνουμε ότι η προσέγγιση αυτή αποτελεί μια βάση για αυτοσυνεπείς (self-consistent) υπολογισμούς των ρευμάτων φαινομένου σήραγγας στην πύλη ($I - V$) χρησιμοποιώντας την ίδια διαδικασία κατάληψης των σταθμών υποζωνών (subband), τις ίδιες ενεργειακές στάθμες και ίδιο σχήμα φράγματος δυναμικού.



Σχήμα 2.1: Διάγραμμα ροής για το (συμπαγές) μοντέλο (και αριθμητικοί υπολογισμοί).

2.2.2. Περιγραφή του Μοντέλου για Διατάξεις Πύλης-Μετάλλου

2.2.2.1. Αλγόριθμος για τον υπολογισμό της χωρητικότητας της πύλης σε καταστάσεις συσσώρευσης και ισχυρής απογύμνωσης

Στο σχήμα 2.1 φαίνεται το διάγραμμα ροής το οποίο συνοψίζει τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείται στο συγκεκριμένο μοντέλο για ισχυρή απογύμνωση ή συσσώρευση στο υπόστρωμα. Πρώτα καθορίζονται οι ενέργειες υποζωνών (subband) και το συνολικό επιφανειακό φορτίο της χωρητικότητας στο υπόστρωμα, ως συνάρτηση του πεδίου. Η διαδικασία πλήρωσης των ενεργειών υποζωνών (subband) μέσα στις ενεργειακές ζώνες, που ακολουθούν τη στατιστική Fermi – Dirac, καθορίζει την ενέργεια Fermi και επομένως, εξ' ορισμού, την τάση ($V = -E_F/q$). Τέλος, η ημι-στατική (quasi-static) χωρητικότητα βρίσκεται, επίσης εξ' ορισμού, συγκρίνοντας τις μεταβολές του επιφανειακού φορτίου με τις μεταβολές της τάσης ($C = dQ/dV$).

Ο αλγόριθμος βασίζεται σε πρώτες αρχές και επομένως δεν γίνεται κανενός είδους προσέγγιση. Στην πραγματικότητα το συγκεκριμένο διάγραμμα ροής είναι ουσιαστικά το ίδιο με αυτό που χρησιμοποιήθηκε για την αριθμητική προσομοίωση κατά την ανάπτυξη του παρόντος μοντέλου. Παρόλα αυτά για να εφαρμοστεί ο αλγόριθμος στα πλαίσια ενός (συμπαγούς) μοντέλου απαιτείται οι ενέργειες υποζωνών (subband) και οι σχετικές κατανομές φορτίου σε αυτές να προκύπτουν άμεσα με ελάχιστη ή καθόλου ανάδραση.

2.2.2.2. Ενεργειακές στάθμες υποζωνών (subband) σε πεπερασμένα ημιτριγωνικά φρέατα

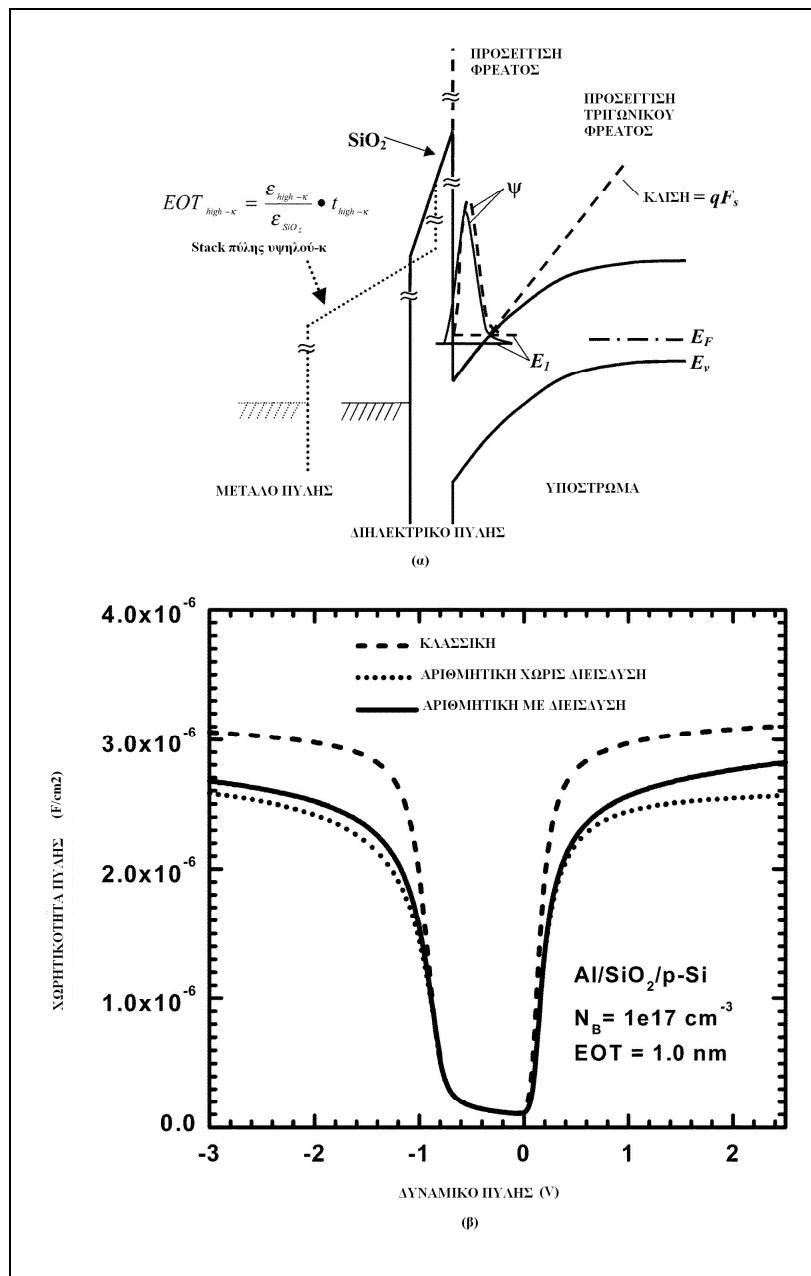
Ο Stern [2.7] απέδειξε ότι αν το δυναμικό του καναλιού μπορεί να προσεγγιστεί ως ένα άπειρο τριγωνικό φρέαρ - σχήμα 2.2(a) - τότε οι ιδιοενέργειες, των δέσμιων καταστάσεων, σε σχέση με το όριο της ζώνης μπορούν να γραφούν ως

$$E_i \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{3}{2} \pi e F_s \left(i + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3} \quad (2.1)$$

χρησιμοποιώντας τις συναρτήσεις Airy όπου η διαφορά είναι αμελητέα σε σχέση με τους αριθμητικούς υπολογισμούς. Το m^* είναι η ενεργός μάζα και το i αναφέρεται στην ιδιοκατάσταση, με $i=0$ να αντιστοιχεί στη βασική κατάσταση.

Χρησιμοποιώντας το νόμο της ύψωσης σε δύναμη $2/3$ ο van Dort και οι συνεργάτες του [2.10], [2.11], ανέπτυξαν ένα πρώτο μοντέλο λαμβάνοντας υπόψη τα κβαντομηχανικά φαινόμενα για τις διατάξεις MOS και έκαναν μια εκτίμηση για τη μετατόπιση της τάσης κατωφλίου.

Το CVC είναι ένα διαδεδομένος (συμπαγής) προσομοιωτής C – V που αναπτύχθηκε αργότερα από τον Hauser και τους συνεργάτες του [2.12], [2.13], ο οποίος αντιμετωπίζει τα κβαντομηχανικά φαινόμενα και επαληθεύτηκε για πυκνωτές πολυπυριτίου MOS με πάχος οξειδίου περίπου 2nm ή παραπάνω. Ο προσομοιωτής αυτός χρησιμοποιεί επίσης το νόμο της ύψωσης σε δύναμη $2/3$ για να προσδιορίσει το χαμηλότερο κβαντικό επίπεδο, παρόλο που η ενεργός μάζα χρησιμοποιήθηκε ως ένας συντελεστής συναρμογής (fitting parameter) έτσι ώστε να αντιμετωπιστούν οι μη ιδανικές συνθήκες στο πραγματικό σύστημα. Είναι αξιοσημείωτο ότι αυτή η πληροφορία χρησιμοποιήθηκε για να μετατοπιστεί αποδοτικά το όριο της ζώνης στο CVC. Η κεντροειδής μετατόπιση των κβαντικά περιορισμένων φορέων είναι παγιωμένη στο 1.2nm σύμφωνα με το [2.14]. Σε αντίθεση η κεντροειδής μετατόπιση δεν είναι ρητή εδώ και η μη σταθερή της φύση φαίνεται στα αποτελέσματα που ακολουθούν.



Σχήμα 2.2 (α) Σχηματικό διάγραμμα δομής MOS όπου φαίνεται το προφίλ του δυναμικού που χρησιμοποιείται σε στους αυτοσυνεπείς (self-consistent) αριθμητικούς υπολογισμούς (συνεχής γραμμή) και στην προσέγγιση τριγωνικού φρέατος (διακεκομμένη γραμμή) που χρησιμοποιείται συχνά στους αναλυτικούς υπολογισμούς των ενεργειών υποζωνών (subband), μαζί με τις διαφορές στις ενέργειες και την κατανομή πιθανότητας για τις βασικές καταστάσεις. Διηλεκτρικά μεγάλης σταθεράς κ (διακεκομμένη γραμμή στα αριστερά) έχουν μεγαλύτερο φυσικό πάχος για το ίδιο ισοδύναμο πάχος οξειδίου (EOT). $t_{\text{high-}\kappa}$ είναι το φυσικό πάχος του διηλεκτρικού της πύλης. Το κεντροειδές των φορέων είναι μετατοπισμένο πιο κοντά στην διεπιφάνεια και η ενέργεια κβάντωσης είναι χαμηλότερη λόγω της διείσδυσης της κυματοσυνάρτησης.

(β) Η χαρακτηριστική C - V ενός MOS υπολογισμένη αριθμητικά για μια διάταξη με EOT 1nm στην κλασσική περιοχή (σωματίδια και στατιστική Boltzman), υπολογισμένη κβαντομηχανικά με την προσέγγιση αδιαπέραστου φράγματος (hard wall approximation) και υπολογισμένη κβαντομηχανικά με τη διείσδυση της κυματοσυνάρτησης στο διηλεκτρικό.

Παρόλα αυτά όπως αποκαλύπτεται από τους αριθμητικούς υπολογισμούς, σαν αυτούς του σχήματος 2.2(β), τα φαινόμενα διείσδυσης της κυματοσυνάρτησης στις πραγματικές διατάξεις μπορούν να ελαττώσουν την επίδραση του κβαντικού περιορισμού των φορέων και να οδηγήσουν τελικά σε υποεκτιμήσεις της χωρητικότητας της πύλης [2.3], [2.6], [2.15] – [2.17], καθώς επίσης και του ρεύματος στη πύλη [2.18] σε διατάξεις με υπέρλεπτο ΕΟΤ. Δυστυχώς δεν είναι δυνατή η εξαγωγή μια σαφούς αναλυτικής έκφρασης όπως η (2.1) για το σύστημα του σχήματος 2.2(α) με τη διείσδυση της κυματοσυνάρτησης και τις διαφοροποιήσεις στη συνάρτηση του δυναμικού από το τριγωνικό, καθώς το πεδίο σβήνει μέσω του στρώματος φορτίου. Όμως με τη βοήθεια μιας αυτοσυνεπούς (self-consistent) αριθμητικής προσομοίωσης Schrödinger – Poisson βρήκαμε ότι ο νόμος με τη μορφή (2.1) παραμένει αξιόπιστος στις περιοχές άμεσου ενδιαφέροντος. Μόνο οι παράμετροι απαιτούν κάποια βελτίωση. Δηλαδή με μια πολύ καλή προσέγγιση ακόμα και αν επιτρέψουμε τη διείσδυση της κυματοσυνάρτησης και οποιεσδήποτε αποκλίσεις από το τριγωνικό φρέαρ, οι ενέργειες υποζωνών (subband), ως προς τα όρια της ζώνης στη διεπιφάνεια Si – διηλεκτρικού μπορούν να γραφούν με τη μορφή,

$$E_i - E_{C,V} \cong \pm \gamma_i \left(\frac{|F_{ox}| cm}{MV} \right)^{\lambda_i} \quad (2.2)$$

για ηλεκτρόνια και οπές. E_C και E_V είναι τα όρια των ζωνών αγωγιμότητας και σθένους στη διεπιφάνεια Si – διηλεκτρικού, το i αναφέρεται στην στάθμη υποζωνών (subband) και F_{ox} είναι το ενεργό πεδίο του οξειδίου. Τα πρόσημα της ενέργειας αντιστοιχούν στις ηλεκτρονικές ενέργειες, ακόμα και για τις στάθμες υποζωνών (subband) των οπών.

2.2.2.3. Κατάληψη υποζωνών (subband) σταθμών σε κατάσταση συσσώρευσης και ισχυρής αναστροφής

Σε κατάσταση ισχυρής αναστροφής ή συσσώρευσης φορέων στο κανάλι, μόλις υπολογιστούν οι ιδιοενέργειες, η στάθμη Fermi ορίζεται μέσω της κατάληψης των επιπέδων αυτών από τα φορτία. Η συνολική επιφανειακή πυκνότητα φορτίου που επάγεται από το πεδίο προσεγγίζεται από τη σχέση:

$$Q_S(F_{OX}) = -\varepsilon_{OX} F_{OX} \quad (2.3)$$

για την περίπτωση της συσσώρευσης και

$$Q_S(F_{OX}) = -\varepsilon_{OX} F_{OX} - Q_{depletion}(F_{OX}) \quad (2.4)$$

για την περίπτωση της ισχυρής αναστροφής, όπου ε_{OX} είναι η διηλεκτρική σταθερά του οξειδίου και $Q_{depletion}$ το φορτίο της περιοχής απογύμνωσης ως συνάρτηση του πεδίου στο οξείδιο, που θα παρουσιαστεί παρακάτω.

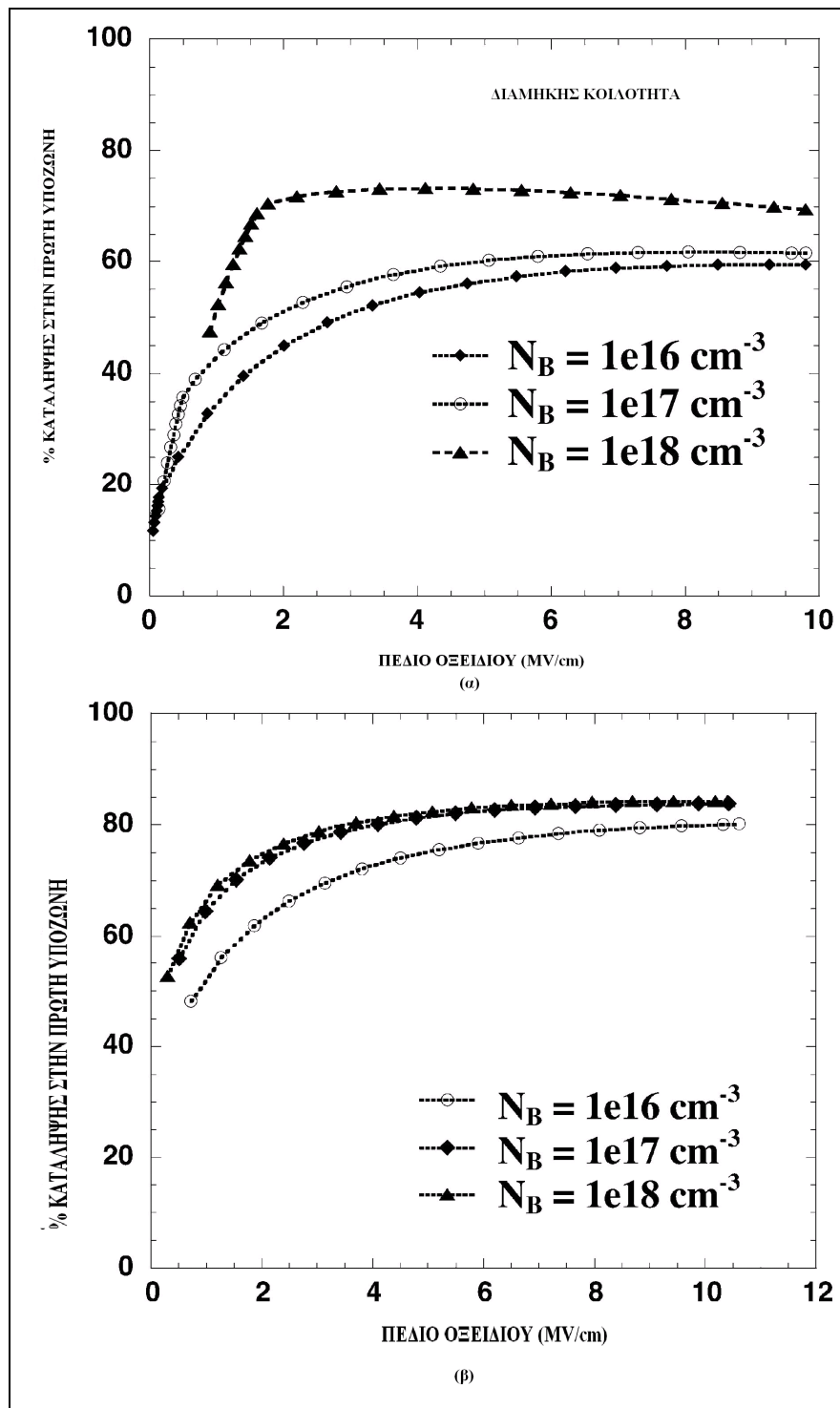
Σύμφωνα με τη στατιστική Fermi – Dirac με την προσέγγιση ότι η πυκνότητα καταστάσεων είναι σταθερή σε κάθε υποζώνη (subband) ισχύει [2.21]:

$$\mp Q_S(F_{OX}) = \sum_i \frac{\eta_i m_i k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \frac{\pm [E_F - E_i(F_{OX})]}{k_B T} \right) \quad (2.5)$$

για τα ηλεκτρόνια και τις οπές (όλες οι ενέργειες δίνονται για τα ηλεκτρόνια ακόμα και στις καταστάσεις σθένους), η_i είναι ο εκφυλισμός της i ιδιοενέργειας, m_i είναι η ενεργός μάζα, για πυκνότητα καταστάσεων στις δύο διαστάσεις παράλληλη στη διεπιφάνεια, η οποία εξαρτάται από το σε ποια κοιλάδα βρίσκεται το επίπεδο της i ιδιοενέργειας, E_F είναι η στάθμη Fermi. Για θερμοκρασίες $T > 0$ η (2.5) δεν μπορεί να επιλυθεί αναλυτικά ως προς την E_F εάν ληφθούν υπόψη περισσότερες από μια κοιλάδες.

Για να διερευνήσουμε την πιθανότητα να χρησιμοποιηθεί μόνο μια ιδιοενέργεια ώστε να υπολογιστεί η ενέργεια Fermi, χωρίς να παραμεληθούν τα φορτία στις διεγερμένες καταστάσεις υποζώνης (subband), μελετήθηκε η

καταληψιμότητα της βασικής στάθμης ως συνάρτηση του πεδίου στο οξείδιο, μέσω αριθμητικής προσομοίωσης. Όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3(α) για τα ηλεκτρόνια σε αναστροφή και 2.3(β) για τις οπές σε συσσώρευση, το ποσοστό καταληψιμότητας είναι ένα σχεδόν σταθερό μέρος του συνολικού επαγόμενου φορτίου για μέτρια έως μεγάλα πεδία, και δεν εξαρτάται έντονα από τις προσμείξεις. Ο κορεσμός της πιθανότητας κατάληψης της βασικής κατάστασης είναι συνέπεια δύο αντίθετων φαινομένων: της απομάκρυνσης των ενεργειών υποζωνών (subband) και της αύξησης του εκφυλισμού στην κατανομή των φορέων. Εάν μπορεί να εφαρμοστεί η στατιστική Boltzman, η αύξηση της απόστασης ανάμεσα στη βασική στάθμη και τις διεγερμένες ενέργειες στην υποζώνη (subband), με την αύξηση του πεδίου, έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση όχι μόνο στην απόλυτη αλλά και στη σχετική κατάληψη της βασικής στάθμης υποζωνών (subband). Παρόλα αυτά η κατανομή των φορέων εκφυλίζεται γρήγορα σε κατάσταση ισχυρής αναστροφής και πρέπει να χρησιμοποιηθεί η στατιστική Fermi. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, όσο χαμηλότερη είναι η ενέργεια υποζωνών (subband), τόσο μικρότερη να είναι η σχετική μεταβολή στο φορτίο σε συνάρτηση με τις αλλαγές στο $E_F - E_i$, και συγκεκριμένα με το επίπεδο Fermi πάνω από τον πυθμένα της ενέργειας υποζωνών (subband) E_i . Σε χαμηλά πεδία (σχήμα 2.3(α)) όπου το ποσοστό κατάληψης μεταβάλλεται απότομα η διάταξη βρίσκεται σε απογύμνωση/ ασθενή αναστροφή, η κατάληψη υποζωνών (subband) είναι αμελητέα και η μετατόπιση της ενέργειας Fermi / επιφανειακό δυναμικό αντιμετωπίζεται με διαφορετικό τρόπο, όπως θα περιγραφεί παρακάτω. Σε χαμηλά πεδία (σχήμα 2.3(β)) η διάταξη βρίσκεται σε κατάσταση συσσώρευσης αλλά σε σχεδόν επίπεδες ζώνες και φορτίο μη επαγόμενο από το πεδίο. Φορτίο το οποίο είναι παρόν σε συνθήκη επίπεδων ζωνών ανεβάζει την στάθμη Fermi αυξάνοντας έτσι την καταληψιμότητα υψηλότερων ιδιοενεργειών.



Σχήμα 2.3: Ποσοστιαία κατάληψη (α) των ηλεκτρονίων στη χαμηλότερη υποζώνη (subband) (στις κοιλάδες με διαμήκη μάζα κάθετη στη διεπιφάνεια) και (β) βαριές οπές στην υποζώνη (subband). Οι αριθμοί κατάληψης είναι σχεδόν σταθεροί σε σχετικά μέτρια έως μεγάλα πεδία και εμφανίζουν ασθενή εξάρτηση από τις προσμειξεις.

Αν θεωρήσουμε έναν γνωστό συντελεστή κατάληψης για τη βασική υποζώνη (subband) κ_1 η (2.5) γίνεται

$$\mp \kappa_1 Q_S(F_{OX}) = \frac{\eta_1 m_1 k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \frac{\pm [E_F - E_1(F_{OX})]}{k_B T} \right) \quad (2.6)$$

Η τελευταία εξίσωση μπορεί να επιλυθεί ακριβώς ως προς το $E_F - E_{C,V}(F_{OX})$ σε συνάρτηση με το $E_1 - E_{C,V}(F_{OX})$ (από την (2.1)) και το $Q(F_{OX})$ (από τις (2.3), (2.4) και (2.8)) οπότε έχουμε:

$$E_F - E_{C,V}(F_{OX}) = E_1(F_{OX}) - E_{C,V}(F_{OX}) \pm k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{\kappa_1 |Q_S(F_{OX})| \pi \hbar^2}{\eta_1 m_1 k_B T} \right) - 1 \right] \quad (2.7)$$

για ηλεκτρόνια ($\eta_1=4$ συμπεριλαμβανομένου και του εκφυλισμού λόγω spin) και για οπές ($\eta_1=2$) (υπενθυμίζεται ότι τα όρια των ζωνών είναι συνάρτηση του πεδίου και όχι η ενέργεια Fermi). Οι τιμές για το κ_1 που χρησιμοποιήθηκαν είναι 0.65 για τα ηλεκτρόνια σε αναστροφή (n-MOS) και 0.57 σε συσσώρευση (p-MOS) και 0.86 για οπές σε αναστροφή (p MOS) και 0.83 σε συσσώρευση (n MOS). Οι συγκεκριμένες πιθανότητες κατάληψης είναι πολύ κοντά σε αυτές που βρέθηκαν από τον Stern [2.22].

Επίσης, ο συντελεστής κατάληψης κ_1 μπορούσε να μοντελοποιηθεί ως συνάρτηση του πεδίου στο οξειδίο και των προσμείξεων, για μεγαλύτερη ακρίβεια, ενώ και πάλι θα ήταν δυνατός ο αναλυτικός υπολογισμός της E_F , αλλά μέχρι στιγμής δεν υπήρξε εμφανής λόγος για να γίνει κάτι τέτοιο. Μια μεταβολή της τάξης του $\pm 10\%$ στην τιμή του κ_1 έχει ως συνέπεια ένα αμελητέο σφάλμα στον υπολογισμό της χωρητικότητας της πύλης, ακόμα και για διατάξεις με πάχος διηλεκτρικού με EOT της τάξης των 0.5nm, όπως φαίνεται και στις προσομοιώσεις C – V που ακολουθούν. Οι τιμές που χρησιμοποιούνται για το m_1 είναι $0.19m_e$ για τα ηλεκτρόνια και $0.49m_e$ για της βαριές οπές [2.23].

Η συνολική κάμψη των ζωνών στο υπόστρωμα, το επιφανειακό δυναμικό, δίνεται από τη σχέση

$$q\phi_{sub}(F_{OX}) = [E_F - E_{C,V}(F_{OX})] - [E_F - E_{C,V}(0)] \quad (2.8)$$

όπου $[E_F - E_{C,V}(0)]$ είναι η σχετική θέση της στάθμης Fermi στη διεπιφάνεια σε συνθήκη επίπεδης ζώνης.

2.2.2.4. Φορτίο στρώματος απογύμνωσης σε ισχυρή αναστροφή

Για να εφαρμοστεί η σχέση (2.4) απαιτείται η γνώση του φορτίου στην περιοχή απογύμνωσης. Για το λόγο αυτό, σε ισχυρή αντιστροφή, η πτώση δυναμικού κατά μήκος της περιοχής απογύμνωσης προσεγγίζεται από τη σχέση

$$q\psi_{d,si}(F_{OX}) = \pm 2q\phi_F + [E_1(F_{OX}) - E_{C,V}(F_{OX})] \quad (2.9)$$

όπου $q\phi_F$ είναι η απόσταση μεταξύ της στάθμης Fermi και της ενδογενούς στάθμης Fermi σε συνθήκη επίπεδης ζώνης (η έκφραση στις αγκύλες είναι αρνητική για οπές). Η πρόσθεση του E_1 αποτελεί προσέγγιση για την μεταβολή του ορίου της ζώνης λόγω του κβαντικού περιορισμού. Το φορτίο στο στρώμα απογύμνωσης, σε ισχυρή αναστροφή, που υπεισέρχεται στην (2.4) υπολογίζεται από τη σχέση [2.23]

$$\mp Q_{depletion}(F_{OX}) \cong \sqrt{2q|\psi_{d,si}(F_{OX})|\varepsilon_s N_{dop}} \quad (2.10)$$

όπου ε_s είναι η διηλεκτρική σταθερά του Si. Σημειώνεται ότι στο συγκεκριμένο μοντέλο η πτώση δυναμικού κατά μήκος του στρώματος απογύμνωσης και το αντίστοιχο φορτίο, σε συνθήκες ισχυρής αντιστροφής, δεν λαμβάνονται ως σταθερά μέσω του E_1 σε αντίθεση με άλλες εργασίες π.χ. [2.25].

Η ενέργεια Fermi στην σχέση (2.6) δεν επηρεάζεται από τη συγκέντρωση προσμείξεων, κάτι που έχει ως συνέπεια το γεγονός να μπορούν να θεωρηθούν

σύνθετα προφίλ προσμειξεων, χωρίς να χρειάζεται τροποποίηση το μοντέλο για τις περιπτώσεις συσσώρευσης και ισχυρής αναστροφής. Η μόνη τροποποίηση που χρειάζεται είναι στο μοντέλο για την περιοχή απογύμνωσης.

2.2.2.5. Κάμψη των ζωνών σε κατάσταση απογύμνωσης και ασθενούς αναστροφής

Στην κατάσταση ασθενούς αναστροφής το στρώμα του επιφανειακού φορτίου παραλείπεται μαζί με τις σχετικές τροποποιήσεις που αναφέρονται παραπάνω. Στην περιοχή αυτή το μοντέλο γίνεται πιο συμβατικό και η κάμψη των ζωνών στο υπόστρωμα υπολογίζεται από τη σχέση

$$q\phi_{sub}(F_{OX}) = \pm \frac{\epsilon_{OX}^2 F_{OX}^2}{2q\epsilon_s N_{dop}} \quad (2.11)$$

για η MOS και p MOS αντίστοιχα. Εναλλακτικά μπορούμε να υπολογίσουμε το στρώμα του φορτίου σε ασθενή αναστροφή με επαναληπτικό τρόπο, αλλά η συνεισφορά του είναι σημαντική μόνο λίγο πριν τη μετάβαση στην ισχυρή αναστροφή.

2.2.2.6. Δυναμικό πύλης, φορτίο και χωρητικότητα

Για μεταλλικές πύλες, αν είναι γνωστό το $\phi_{sub}(F_{OX})$ σε κατάσταση συσσώρευσης, απογύμνωσης και ασθενούς ή ισχυρής αναστροφής, το δυναμικό στην πύλη, $V_G = -[E_{F,Gate} - E_F]/q$, δίνεται από τη σχέση:

$$V_G = V_{FB} + F_{OX}t_{OX} + \phi_{sub}(F_{OX}) \quad (2.12)$$

όπου t_{OX} είναι το ισοδύναμο πάχος του οξειδίου, F_{OX} είναι το ενεργό πεδίο στο οξείδιο και $\phi_{sub}(F_{OX})$ είναι η συνολική κάμψη των ζωνών/ επιφανειακό δυναμικό στο υπόστρωμα.

Ο αλγόριθμος που παρουσιάζεται στο σχήμα 2.1, προκύπτει με την εφαρμογή των (2.2), (2.9) και (2.10) για ισχυρή αναστροφή $\phi_{sub}(F_{OX})$ στη συνέχεια με την εφαρμογή της (2.3) ή (2.4) για συσσώρευση ή ισχυρή αναστροφή αντίστοιχα, στην συνέχεια εφαρμόζονται οι (2.7) και (2.8). Σε κατάσταση απογύμνωσης και ασθενούς αναστροφής $\phi_{sub}(F_{OX})$ απλά εφαρμόζεται η (2.11). Το συνολικό επαγόμενο φορτίο στην πύλη δίνεται απλά από τη σχέση:

$$Q_{tot} = \epsilon_{OX} F_{OX} \quad (2.13)$$

Η ημιστατική χωρητικότητα στη συνέχεια λαμβάνεται από τις (2.12) και (2.13) από τον ορισμό της χωρητικότητας

$$C = \frac{\partial Q_{tot}}{\partial V_G} \quad (2.14)$$

2.2.2.7. Μεταβάσεις μεταξύ ασθενούς - ισχυρής αναστροφής και συσσώρευσης - απογύμνωσης

Για να προσδιορίσουμε το αν η διάταξη βρίσκεται σε ισχυρή ή ασθενή αναστροφή, η κάμψη των ζωνών υπολογίζεται και για τις δύο περιπτώσεις και λαμβάνεται η μικρότερη τιμή. Δηλαδή αν το αποτέλεσμα που προκύπτει από την (2.11) είναι μικρότερο από αυτό της (2.9) τότε η διάταξη θεωρείται ότι βρίσκεται σε απογύμνωση ή σε ασθενή αναστροφή και χρησιμοποιείται το αποτέλεσμα της (2.11) για την κάμψη των ζωνών. Αν το αποτέλεσμα της (2.9) είναι μικρότερο η διάταξη θεωρείται ότι βρίσκεται σε ισχυρή αναστροφή και χρησιμοποιείται αυτό. Με αυτό τον τρόπο η κάμψη των ζωνών κατά τη μετάβαση μεταξύ των δύο περιοχών είναι συνεχής. Παρόλα αυτά η μετάβαση μπορεί να εξομαλυνθεί, αν είναι επιθυμητό, χρησιμοποιώντας ένα απλό επαναληπτικό μοντέλο γύρο από το σημείο της μετάβασης. Η στάθμη Fermi υπολογίζεται θεωρώντας ότι δεν υπάρχει φορτίο στο στρώμα αναστροφής. Στη συνέχεια υπολογίζεται το φορτίο για ασθενή αναστροφή από την (2.6) με την προηγούμενη ενέργεια Fermi. Στη συνέχεια

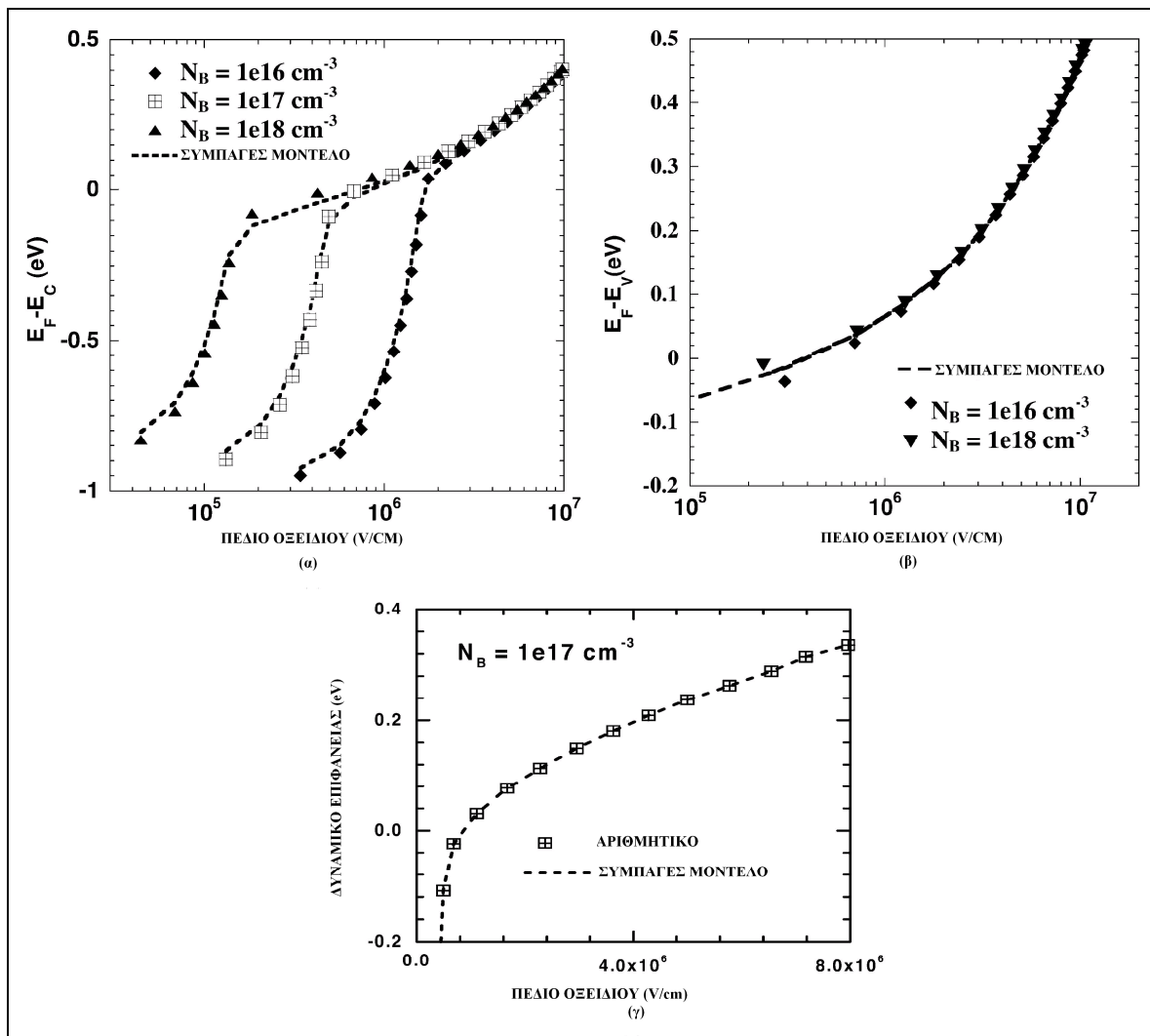
υπολογίζεται το φορτίο σε απογύμνωση από την (2.11) με το πεδίο στο οξειδίο ελαττωμένο από το φορτίο ασθενούς αναστροφής σύμφωνα με $F_{OX} \rightarrow F_{OX} + Q_s / \epsilon_{OX}$ (για τα ηλεκτρόνια το Q_s είναι αρνητικό). Η ενέργεια Fermi προσδιορίζεται ξανά και η όλη διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να συγκλίνει. Ο υπολογιστικός χρόνος επιβαρύνεται ελάχιστα αφού μόνο μερικές επαναλήψεις πολύ απλών εξισώσεων είναι απαραίτητες, για την περίπτωση που βρισκόμαστε πολύ κοντά στη μετάβαση από την ισχυρή στην ασθενή ανατροφή. Η επίδραση αυτής της διαδικασίας εξομάλυνσης είναι ορατή μόνο στο σημείο όπου η χωρητικότητα παρουσιάζει ελάχιστο και μόνο όταν το πεδίο έχει αναλυθεί πλήρως.

Η μετάβαση από κατάσταση συσσώρευσης σε ασθενή αναστροφή αντιμετωπίζεται ακόμα πιο απλά. Οι προσεγγίσεις παραπάνω χρησιμοποιούνται μόνο έξω από μια περιοχή $\pm 0.1V$ γύρω από την περιοχή επίπεδης ζώνης. Οι χαρακτηριστικές C – V συνδέονται χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της Ερμιτιανής κυβικής παρεμβολής (Hermitian cubic interpolation) [2.24]. Η μέθοδος αυτή είναι πρακτική γιατί έχει αποδεκτά αποτελέσματα, αποφεύγοντας μια λεπτομερειακή περιγραφή από φυσικής απόψεως, που είναι πολύ πιο πολύπλοκη. Για μικρότερα πεδία σε συσσώρευση, οι προσεγγίσεις της προηγούμενης ενότητας είναι αμφίβολες, όπως τονίστηκε, ενώ στην κατάσταση απογύμνωσης το μοντέλο της προηγούμενης ενότητας είναι αναξιόπιστο αφού δε λαμβάνει υπόψη το μήκος Debye και επιπλέον συνεισφορές λόγω κβαντομηχανικής απώθησης αδέσμευτων φορέων από το διηλεκτρικό.

2.2.3. Αποτελέσματα C–V του μοντέλου για διατάξεις μεταλλικής πύλης

Στο σχήμα 2.4 παρέχονται συγκρίσεις μεταξύ του (συμπαγούς) μοντέλου και των αριθμητικών προσομοιώσεων που αφορούν στη θέση της στάθμης Fermi σχετικά με τα όρια των ζωνών στη διεπιφάνεια Si – SiO₂ ως συνάρτηση του πεδίου σε ασθενή και ισχυρή αναστροφή σχήμα 2.4(α) και σε συσσώρευση σχήμα 2.4(β), για έναν πυκνωτή n MOS. Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων καθώς επίσης και η απουσία

επίδρασης των προσμίξεων στην κατάσταση ισχυρής αναστροφής, εκτός από την περίπτωση κοντά στην συνθήκη επίπεδης ζώνης, στην κατάσταση συσσώρευσης είναι εμφανής. Η μετατόπιση της σχετικής θέσης της στάθμης Fermi στις καταστάσεις ισχυρής αναστροφής και συσσώρευσης οδηγεί στη μείωση της χωρητικότητας $C = \partial Q_{tot} / \partial V_G$, σε σχέση με την πραγματική κατανομή επιφανειακού φορτίου. Η αύξηση είναι μη γραμμική (sublinear) στο υπόστρωμα σε κατάσταση συσσώρευσης και ισχυρής αναστροφής (σχήμα 2.4(γ)), που σημαίνει ότι το στρώμα γίνεται αισθητά λεπτότερο κατά την αύξηση του φορτίου. Το γεγονός αυτό οφείλεται κυρίως στη διεύθυνση της κυματοσυνάρτησης με συνέπεια η χωρητικότητα να παρουσιάζει κάποια αύξηση ακόμα και στην ισχυρή αναστροφή. Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και στην περίπτωση πυκνωτών p MOS.



Σχήμα 2.4: Σύγκριση των επιπέδων Fermi στη διεπιφάνεια διηλεκτρικού – Si σε μια διάταξη n MOS σύμφωνα με το μοντέλο, με αυτοσυνεπείς (self-consistent) αριθμητικούς υπολογισμούς και με τη διεύθυνση της κυματοσυνάρτησης στο διηλεκτρικό (α) με το όριο της ζώνης αγωγιμότητας στη διεπιφάνεια σε συνθήκες απογύμνωσης ή ασθενούς αναστροφής και ισχυρής αναστροφής και (β) με το όριο της ζώνης σθένους στη διεπιφάνεια σε συνθήκες συσσώρευσης. (γ) Γραφική παράσταση των δεδομένων από το (α) για μια διάταξη με 10^{17} cm^{-3} συγκέντρωση προσμείξεων σε ισχυρή αναστροφή.

2.3. Σύνοψη

Στηριζόμενοι στην βασική φυσική, στην αναλυτική θεωρία [2.27] και στην αυτοσυνεπή λύση Schrödinger – Poisson [2.4] – [2.6], [2.8], [2.9], αναπτύξαμε ένα νέο (συμπαγές) μοντέλο για την περιγραφή των χαρακτηριστικών C – V στα διηλεκτρικά μεταλλικών πυλών με EOT $\sim 1\text{nm}$. Το μοντέλο περιλαμβάνει κβαντομηχανικά φαινόμενα συμπεριλαμβανομένης της δημιουργία υποζωνών (subband) και της διείσδυσης της κυματοσυνάρτησης. Ο αλγόριθμος βασίζεται σε βασικές αρχές. Συγκρίσεις με αριθμητικές προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκαν ώστε να βελτιστοποιηθούν οι παράμετροι στις εκφράσεις των ενεργειών υποζωνών (subband) και των πιθανοτήτων κατάληψης στο υπόστρωμα, σε ισχυρή αναστροφή και συσσώρευση, οι οποίες εξήχθησαν αναλυτικά. Επίσης από τις συγκρίσεις προκύπτει πολύ καλή συμφωνία με τα δεδομένα των προσομοιώσεων και τα πειραματικά δεδομένα. Στο μοντέλο συμπεριελήφθησαν επίσης και διεπιφανειακές καταστάσεις. Για την περίπτωση μη ομοιογενούς ντοπαρίσματος θα πρέπει να βελτιωθεί το μοντέλο για την κάμψη των ζωνών και της περιοχής απογύμνωσης. Παρόλο που κατά την τάση που επικρατεί τείνουμε προς τη χρησιμοποίηση μεταλλικών πυλών για πιο λεπτά διηλεκτρικά στρώματα, για λόγους πληρότητας, εξετάστηκαν μοντέλα απογύμνωσης και συσσώρευσης σε πολυπυρίτιο. Η απλότητα των εξισώσεων επιτρέπει την παραγωγή πλήρων καμπυλών C – V σε λίγα μόλις sec με την χρήση PC και με ακρίβεια συγκρίσιμη με τους αριθμητικούς υπολογισμούς. Η μεθοδολογία αυτή εξετάστηκε και πειραματικά σε συγκεκριμένα δείγματα με πολύ καλά αποτελέσματα όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο 5.

2.4. Αναφορές

- [2.1] The International Technology Roadmap for Semiconductors (2009 Edition) Process Integration, Devices and Structures [Online]. <http://public.itrs.net/>
- [2.2] F. Stern and W. E. Howard, "Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit," *Phys. Rev.*, vol. 163, pp. 816–835, 1967.
- [2.3] A. Haque and M. Z. Kauser, "A comparison of wave-function penetration effects on gate capacitance in deep submicron n-and p-MOSFETs," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 9, pp. 1580–1587, Sep. 2000.
- [2.4] W.-K. Shih, E. X. Wang, S. Jallepalli, F. Leon, C. M. Maziar, and A. F. Tasch, "Modeling gate leakage current in nMOS structures due to tunneling through an ultrathin oxide," *Solid State Electron.*, vol. 42, pp. 997–1006, 1998.
- [2.5] S. Mudanai, Y. Y. Fan, Q. Ouyang, A. F. Tasch, L. F. Register, and S. K. Banerjee, "Modeling of direct tunneling current through gate dielectric stacks," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 47, no. 10, pp. 1851–1857, Oct. 2000.
- [2.6] S. Mudanai, L. F. Register, A. F. Tasch, and S. K. Banerjee, "Understanding the effects of wave penetration on the inversion layer capacitance of NMOSFETs," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 22, pp. 145–147, Mar. 2001.
- [2.7] F. Stern, "Self-consistent results for n-type Si inversion layers," *Phys. Rev. B, Condens. Matter*, vol. 5, pp. 4891–4899, 1972.
- [2.8] "UTQUANT.3.0," Univ. Texas, Austin, TX, 2004.
- [2.9] S. A. Hareland, S. Krishnamurthy, S. Jallepalli, C.-F. Yeap, A. F. Tasch, and C. M. Maziar, "A computationally efficient model for inversion layer quantization effects in deep submicron n-channel MOSFETs," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 43, no. 1, pp. 90–96, Jan. 1996.
- [2.10] M. J. Van Dort, P. H. Woerlee, A. J. Walker, C. A. H. Juffermans, and H. Lifka, "Quantum mechanical threshold voltage shifts of MOSFETs caused by high levels of channel doping," in *IEDM Tech. Dig.*, 1991, session 18.

- [2.11] M. J. Van Dort, P. H. Woerlee, and A. J. Walker, "A simple model for quantization effects in heavily doped silicon MOSFETs at inversion conditions," *Solid State Electron.*, vol. 37, no. 3, pp. 411–414, 1994.
- [2.12] J. R. Hauser and K. Ahmed, "Characterization of ultrathin oxides using electrical C –V and I –V measurements," in *Proc. Characterization Methodology ULSI Technology Conf.*, 1998, pp. 235–239.
- [2.13] K. Ahmed, E. Ibok, G. Bains, D. Chi, B. Ogle, J. Wortman, and J. R. Hauser, "Comparative physical and electrical metrology of ultrathin oxides in the 6 to 1.5 nm regime," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 43, no. 1, pp. 1349–1354, Jan. 2000.
- [2.14] Y. Ohkura, "Quantum effects in Si n-MOS inversion layer at high substrate concentration," *Solid State Electron.*, vol. 33, pp. 1581–1585, 1990.
- [2.15] F. Stern, "Effect of a thin transition layer at a Si-SiO interface on electron mobility and energy levels," *Solid State Comm.*, vol. 21, pp. 163–166, 1977.
- [2.16] S. Mudanai, L. F. Register, A. F. Tasch, and S. K. Banerjee, "A new and accurate quantum mechanical compact model for nMOS gate capacitance," in *Proc. Device Research Conf.*, Jun. 2001, pp. 87–88.
- [2.17] W. K. Chim, J. X. Zheng, and B. H. Koh, "Modeling of charge quantization and wave penetration effects in a metal-oxide-semiconductor system with ultrathin gate oxide," *J. Appl. Phys.*, vol. 94, no. 8, pp. 5273–5277, 2003.
- [2.18] M. M. A. Hakim and A. Haque, "Effects of neglecting carrier tunneling on electrostatic potential in calculating direct tunneling gate current in deep submicron MOSFETs," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 9, pp. 1669–1671, Sep. 2000.
- [2.19] G. D. Wilk, R. M. Wallace, and J. M. Anthony, "High- κ gate dielectrics: Current status and materials properties considerations," *J. Appl. Phys.*, vol. 89, no. 10, pp. 5243–5275, Oct. 2001.
- [2.20] H. L. Shang, K.-L. Lee, P. Kozlowski, C. D'Emic, I. Babich, E. Sikorski, M. Jeong, H. S. P. Wong, K. Guarini, and W. Haensch, "Self-aligned n-channel

germanium MOSFETs with a thin Ge oxynitride gate dielectric and tungsten gate," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 25, pp. 135–137, Dec. 2004.

[2.21] T. Ando, B. Fowler, and F. Stern, "Electronic properties of two-dimensional systems," *Rev. Modern Phys.*, vol. 54, no. 2, pp. 437–672, Apr. 1982.

[2.22] F. Stern, "Quantum properties of surface-charge layer," *CRC Critical Rev. Solid State Sci.*, pp. 499–514, Mar. 1974.

[2.23] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*. New York: Wiley, 1981, ch. 7.

[2.24] M. T. Heath, *Scientific Computing an Introductory Survey*, 2nd ed. New York: McGraw-Hill, ch. 7.

[2.25] L. Larcher, P. Pavan, F. Pellizzer, and G. Ghidini, "A new model of gate capacitance as a simple tool to extract MOS parameters," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, no. 5, pp. 935–945, May 2001.

[2.26] P. Q. Xuan and J. Bokor, "Investigation of NiSi and TiSi as CMOS gate materials," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 24, no. 3, pp. 634–638, Mar. 2003.

[2.27] Q. Lu, R. Lin, P. Ranade, Y. C. Yeo, X. F. Meng, H. Takeuchi, T.-J. King, C. M. Hu, H. F. Luang, S. J. Lee, W. P. Bai, C.-H. Lee, D.-L. Kwong, X. Guo, X. W. Wang, and T.-P. Ma, "Molybdenum metal-gate MOS technology for post-SiO gate dielectrics," in *IEDM Tech. Dig.*, Dec. 2000, pp. 641–644.

[2.28] S. B. Samavedam *et al.*, "Dual-metal gate CMOS with HfO gate dielectric," in *IEDM Tech. Dig.*, 2002, pp. 433–436.

[2.29] S. Mudanai, F. Li, S. B. Samavedam, P. J. Tobin, C. S. Kang, R. Nieh, J. C. Lee, L. F. Register, and S. K. Banerjee, "Interfacial defect states in HfO and ZrO₂ n MOS capacitors," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 23, no. 12, pp. 728–730, Dec. 2002.

[2.30] S. Mudanai, "Gate Current Modeling Through High-κ Materials and Compact Modeling of Gate Capacitance," Ph.D. dissertation, Univ. Texas, Austin, TX, 2001

[2.31] A. Pacelli, A. Spinelli, and L. Perron, "Carrier quantization at flat bands in MOS devices," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 46, no. 2, pp. 383–387, Feb. 1999.

[2.32] A. Spinelli, R. Clerc, and Ghibaudo, "An analytic model for flat-band polysilicon quantization in MOS devices," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, no. 7, pp. 1314–1316, Jul. 2002.

3. ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ SCHRÖDINGER ΚΑΙ POISSON

Η **μέθοδος διακριτών διαφορών** συνδυάζεται με ένα ανομοιόμορφο πλέγμα σημείων και χρησιμοποιείται για την επίλυση των εξισώσεων Schrödinger και Poisson σε μία διάσταση. Με τη χρήση κατάλληλων μετασχηματισμών διατηρείται η συμμετρία της διακριτοποιημένης εξίσωσης Schrödinger, ακόμα και με τη χρήση ενός ανομοιόμορφου πλέγματος σημείων. Με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται μείωση του υπολογιστικού χρόνου.

Η μέθοδος αυτή αποτελεί έναν πολύ αποδοτικό τρόπο εύρεσης των ιδιοκαταστάσεων, οι οποίες μπορεί να εκτείνονται σε σχετικά μεγάλες περιοχές, χωρίς αυτό να έχει επίπτωση στην ακρίβεια. Η ορθότητα της μεθόδου επιβεβαιώνεται με συγκρίσεις με ακριβείς υπολογισμούς που έγιναν σε τετραγωνικά φρέατα GaAs/AlGaAs.

3.1. Εισαγωγή

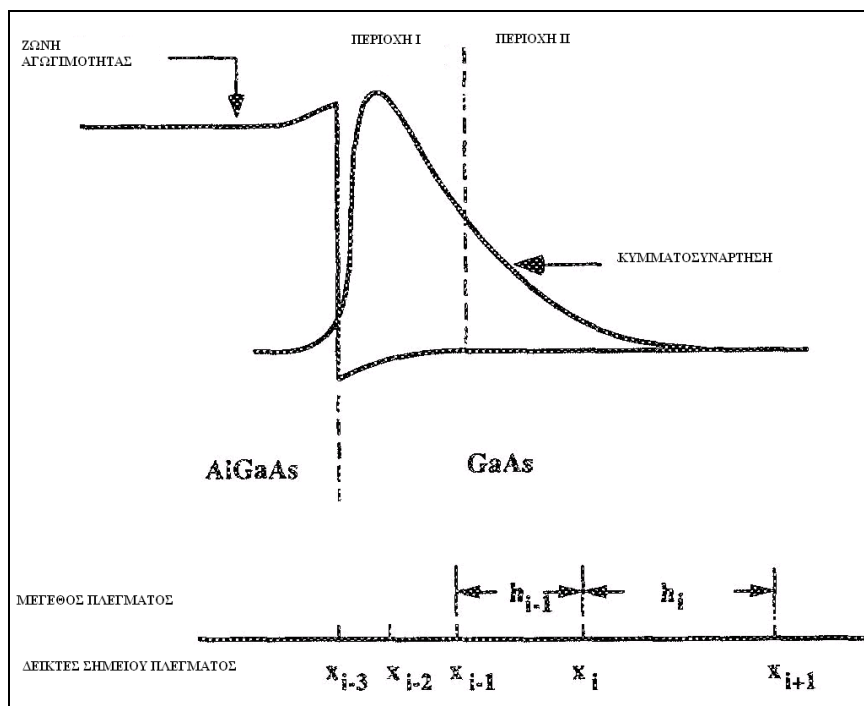
Η ανάπτυξη φρεάτων δυναμικού με ετεροδομές υψηλής ποιότητας καθώς επίσης και η διαμόρφωση χαρακτηριστικών στοιχείων, είτε με κατεργασίες κατασκευής υψηλής ανάλυσης [3.1], [3.2], είτε με την καινοτόμο ανάπτυξη σε κεκλιμένα υποστρώματα [3.3], [3.4], οδηγούν στη δημιουργία δομών και διατάξεων πολύ μικρών διαστάσεων, οι οποίες θα έχουν τεράστιες τεχνολογικές επιπτώσεις. Για να γίνουν πλήρως αντιληπτές οι οπτικές ιδιότητες και οι ιδιότητες μεταφοράς φορτίων είναι απαραίτητη η αυτοσυνεπής (self-consistent) λύση των εξισώσεων Schrödinger και Poisson [3.5] – [3.8].

Η συμβατική προσέγγιση ως προς την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger γίνεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (FDM: Finite Difference Method). Ο πραγματικός χώρος διαιρείται σε ένα πεπερασμένο πλέγμα από περιοχές και η κυματοσυνάρτηση, ψ , επιλύεται σε αυτές τις περιοχές. Με αυτόν

τον τρόπο η συνολική λύση της ψ αποτελεί ένα διάνυσμα. Η διατύπωση με τη μορφή πίνακα της εξίσωσης του Schrödinger είναι

$$A\psi = \lambda\psi \quad (3.1)$$

όπου A είναι ο πίνακας που περιγράφει τον τελεστή και λ οι ιδιοτιμές της ενέργειας. Η χρήση της FDM συνήθως υποθέτει ένα πλέγμα με ομοιομορφία μεταξύ των περιοχών, έτσι ώστε ο A να είναι πραγματικός και συμμετρικός. Για την επιλογή του μεγέθους των περιοχών του πλέγματος γίνεται ένας συμβιβασμός μεταξύ ακρίβειας στους υπολογισμούς και υπολογιστικού χρόνου.



Σχήμα 3.1: (α) Διάγραμμα ζωνών μιας μονής ετεροδομής GaAs/AlGaAs και η κυματοσυνάρτηση σε δέσμια κατάσταση. (β) Διακριτοποίηση του δυναμικού χρησιμοποιώντας ανομοιόμορφο πλέγμα σημείων.

Γενικά, υπάρχουν περιπτώσεις όπου η κυματοσυνάρτηση παρουσιάζει έντονες διακυμάνσεις σε μια περιοχή ενώ μεταβάλλεται πιο αργά σε κάποια άλλη. Ένα τέτοιο παράδειγμα φαίνεται στο σχήμα 1(α), όπου απεικονίζεται η κυματοσυνάρτηση σε μια ετεροεπαφή GaAs/AlGaAs με ιδιοενέργεια που βρίσκεται κοντά στη στάθμη Fermi. Σε αυτή τη περίπτωση θα ήταν ιδανικό να χρησιμοποιηθεί ένα πλέγμα από περιοχές μεταβλητών διαστάσεων δηλαδή μικρή απόσταση των σημείων στην περιοχή I (region I) και μεγάλη απόσταση των σημείων στην περιοχή II (region II). Η χρήση ενός μεταβλητού πλέγματος περιοχών απαιτεί προσεκτικό χειρισμό στο όριο μεταξύ δύο γειτονικών περιοχών με διαφορετικό μήκος και χαλάει τη συμμετρία του A, κάνοντας πιο δύσκολο τον υπολογισμό της ιδιοσυνάρτησης [3.9].

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας προτείνεται ένας απλός μετασχηματισμός που διατηρεί τη συμμετρία του πίνακα A ενώ ταυτόχρονα επιτρέπει την ύπαρξη ενός πλέγματος με μεταβλητό μέγεθος. Εάν χρησιμοποιηθεί το βέλτιστο ανομοιομόρφο πλέγμα περιοχών, η μέθοδος αυτή παρέχει έναν αποδοτικό υπολογισμό για το προφίλ της ζώνης και για την κατανομή της πυκνότητας των ηλεκτρονίων σε μια χωρικά εκτεταμένη περιοχή.

3.1.1. Βασικές Εξισώσεις

Η εξίσωση Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο σε μια διάσταση είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.2)$$

όπου ψ είναι η κυματοσυνάρτηση, E η ενέργεια, V η δυναμική ενέργεια, \hbar η σταθερά του Planck διαιρεμένη με το 2π και m^* η ενεργός μάζα.

Η εξίσωση Poisson σε μια διάσταση είναι

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon_s(x) \frac{d}{dx} \right) \phi(x) = \frac{-q[N_D(x) - n(x)]}{\varepsilon_0} \quad (3.3)$$

όπου ε_s είναι η διηλεκτρική σταθερά, ϕ είναι το ηλεκτροστατικό δυναμικό, N_D η συγκέντρωση δοτών και n είναι η κατανομή πυκνότητας ηλεκτρονίων.

Για να βρούμε την κατανομή ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας πρέπει να θέσουμε τη δυναμική ενέργεια ίση με την ενέργεια της ζώνης αγωγιμότητας. Σε ένα κβαντικό φρέαρ με αυθαίρετο προφίλ δυναμικής ενέργειας, η δυναμική ενέργεια σχετίζεται με το ηλεκτροστατικό δυναμικό μέσω της σχέσης

$$V(x) = -q\phi(x) + \Delta E_C(x) \quad (3.4)$$

όπου ΔE_C είναι η ψευδοδυναμική ενέργεια λόγω της μετατόπισης της ζώνης στην ετεροεπαφή.

Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$ στη εξίσωση (3.2) και η ηλεκτρονική πυκνότητα $n(x)$ στην εξίσωση (3.3) σχετίζονται μεταξύ τους μέσω της σχέσης

$$n(x) = \sum_{k=1}^m \psi_k^*(x) \psi_k(x) n_k \quad (3.5)$$

όπου m είναι το πλήθος των δέσμιων καταστάσεων και n_k είναι η κατάληψη της κάθε κατάστασης.

Η συγκέντρωση ηλεκτρονίων σε κάθε κατάσταση μπορεί να εκφραστεί ως

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + \text{Exp}[(E - E_F)/kT]} dE \quad (3.6)$$

όπου E_k είναι η ιδιοενέργεια.

Για να εξάγουμε αυτοσυνεπείς (self-consistent) λύσεις για τις εξισώσεις (3.2) και (3.3) χρησιμοποιούμε μια επαναληπτική διαδικασία. Ξεκινώντας με ένα δοκιμαστικό δυναμικό $V(x)$, οι κυματοσυναρτήσεις και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να υπολογιστεί η κατανομή πυκνότητας ηλεκτρονίων από τις εξισώσεις (3.5) και (3.6). Το ηλεκτροστατικό δυναμικό $\phi(x)$ υπολογίζεται από την εξίσωση (3.3) με αντικατάσταση των $n(x)$ και $N_D(x)$. Η νέα δυναμική ενέργεια $V(x)$ εξάγεται στη συνέχεια από τη σχέση (3.4). Επαναλαμβάνοντας την παραπάνω διαδικασία εξάγονται οι λύσεις για τα $V(x)$ και $n(x)$ στα πλαίσια κάποιου δεδομένου σφάλματος.

3.2. Αριθμητική Μέθοδος

3.2.1. Διαμόρφωση της εξίσωσης Schrödinger

Για να επιλυθεί αριθμητικά η εξίσωση Schrödinger μπορεί να διακριτοποιηθεί η εξίσωση (3.3) χρησιμοποιώντας ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών τριών σημείων:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2(\psi_{i+1} - \psi_i)}{m_{i+1/2} h_i (h_i + h_{i+1})} - \frac{2(\psi_i - \psi_{i-1})}{m_{i-1/2} h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \right) = \lambda \psi_i$$

αυτή μπορεί να παρασταθεί με τη μορφή εξίσωσης πινάκων ως

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} \psi_j = \lambda \psi_i \quad (3.7)$$

όπου

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i+1/2}^*} \frac{1}{h_{i+1} (h_i + h_{i-1})} \right) & \text{αν } j=i+1 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i-1/2}^*} \frac{1}{h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \right) & \text{αν } j=i-1 \\ -A_{ii+1} - A_{ii-1} + V_i & \text{αν } j=i \\ 0 & \text{οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (3.8a)$$

Ο δείκτης i υποδεικνύει την συγκεκριμένη περιοχή του πλέγματος σε μια διάσταση. Ημιακέραιοι δείκτες δηλώνουν θέσεις μέσα στις περιοχές του πλέγματος και h_i είναι το μέγεθος μιας περιοχή του πλέγματος μεταξύ διαδοχικών σημείων x_i και x_{i+1} . Έτσι σχηματίζεται ένας τριδιαγώνιος (tridiagonal) πίνακας ο οποίος είναι συμμετρικός μόνο όταν τα h_i είναι όλα ίσα μεταξύ τους. Ενώ η χρήση ανομοιομορφου πλέγματος είναι προτιμότερη για κάποια προβλήματα, αναιρεί τη συμμετρία του πίνακα A ακυρώνοντας κάποιες απλοποιήσεις. Παρόλα αυτά αν ορίσουμε την παράμετρο

$$L_i^2 = (h_i + h_{i-1})/2 \quad (3.9)$$

η εξίσωση (8a) γίνεται

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i+1/2}^*} \frac{1}{h_i} \right) \frac{1}{L_i^2} & \text{αν } j=i+1 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i-1/2}^*} \frac{1}{h_{i-1}} \right) \frac{1}{L_i^2} & \text{αν } j=i-1 \\ -A_{ii+1} - A_{ii-1} + V_i & \text{αν } j=i \\ 0 & \text{οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (3.8b)$$

Θέτουμε $B_{ij} = L_i^2 A_{ij}$ ή σε μορφή πινάκων

$$B = MA \quad (3.10)$$

όπου M είναι ο διαγώνιος πίνακας με στοιχεία L_i^2 . Από τις παραπάνω εξισώσεις φαίνεται ότι ο B είναι συμμετρικός ότι δηλαδή $B_{ii+1} = B_{i+1i}$. Έτσι έχουμε τον επιθυμητό μετασχηματισμό που μας επιτρέπει να λύσουμε ως εξής

$$B\psi = MA\psi = \lambda M\psi \quad (3.11)$$

Ο πίνακας M που εξάγεται από τη FDM είναι διαγώνιος και έτσι μπορεί να εκφραστεί με τη μορφή

$$M=LL\psi \quad (3.12)$$

όπου L είναι ένας διαγώνιος πίνακας με στοιχεία L_i .

Χρησιμοποιώντας της εξίσωση (3.10) μπορούμε να δείξουμε ότι $L^{-1}BL^{-1}L\psi = L^{-1}LLA\psi = \lambda L^{-1}L\psi$ ή

$$H\Phi=\lambda\Phi \quad (3.13)$$

όπου

$$H=L^{-1}BL^{-1} \quad (3.14)$$

και

$$\Psi=L^{-1}\Phi \quad (3.15)$$

Από την $H=H^T$ και λόγω του ότι ο B είναι συμμετρικός και ο L διαγώνιος, ο πίνακας H προκύπτει συμμετρικός και τριδιαγώνιος. Η εξίσωση (3.13) είναι τώρα η κεντρική εξίσωση μέσω της οποίας θα ευρεθούν οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις. Έτσι, αντί για την εξίσωση (3.1) επιλύεται η εξίσωση (3.13) για να βρεθεί η ιδιοτιμή λ που αντιστοιχεί στην ιδιοσυνάρτηση Φ. Στη συνέχεια μέσω της εξίσωσης (3.15) προκύπτει η κυματοσυνάρτηση ψ από την Φ. Αν ψ_k και ψ_l είναι δυο κυματοσυναρτήσεις στο φρέαρ δυναμικού αυτές σχετίζονται η μία με την άλλη μέσω της σχέσης

$$\psi_k^T M \psi_l = \begin{cases} 1 & \text{αν } k = l \\ 0 & \text{αν } k \neq l \end{cases} \quad (3.16)$$

που σημαίνει ότι αυτές είναι ορθοκανονικές με βάση τον πίνακα M.

Σημειώνεται ότι η μέθοδος αυτή μπορεί να εφαρμοστεί όχι μόνο σε μονοδιάστατα προβλήματα αλλά και σε περιπτώσεις δυο διαστάσεων. Χρησιμοποιώντας την ίδια μέθοδο για να διακριτοποιηθεί η εξίσωση Schrödinger καταλήγουμε σε μια εξίσωση ίδια με την (3.11) όπου ο B παρουσιάζει στοιχεία στη διαγώνιο και γύρω από αυτή και ο M είναι πάλι διαγώνιος. Επομένως, καταλήγουμε με τον ίδιο μετασχηματισμό στην εξίσωση (3.13).

3.2.2. Διαμόρφωση της εξίσωσης Poisson

Για την επίλυση μη γραμμικών εξισώσεων Poisson χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton. Η διαφορική εξίσωση που περιγράφει τη μεταβολή στο δυναμικό, $\delta\phi$, σε κάθε επανάληψη ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\left[\frac{d}{dx} \left(\varepsilon_s \frac{d\phi}{dx} \right) + \frac{q}{\varepsilon_0} [N_D(x) - n(x)] \right] = \frac{d}{dx} \left(\varepsilon_s \frac{d\delta\phi}{dx} \right) + \frac{q}{\varepsilon_0} \sum_{k=1}^m \psi_k^* \psi_k \frac{\partial n_k}{\partial E_k} \langle \psi_k | q \delta\phi | \psi_k \rangle \quad (3.17)$$

Στην εξίσωση αυτή υποθέτουμε ότι οι δότες είναι πλήρως ιονισμένοι και η διακύμανση της κυματοσυνάρτησης κατά το $\delta\phi$ είναι πολύ μικρή. Ο όρος στα αριστερά είναι το σφάλμα και είναι μηδέν όταν το ηλεκτροστατικό δυναμικό ϕ είναι ίσο με την αυτοσυνεπή (self-consistent) λύση. Παρόλο που αυτή η διαφορο-ολοκληρωτική εξίσωση είναι δύσκολο να επιλυθεί, μπορεί να γίνει μια προσέγγιση σε πρώτη τάξη. Από την εξίσωση (3.6) μπορούμε να υπολογίσουμε τη μερική παράγωγο $\partial n_k / \partial E_k$. Χρησιμοποιώντας την ίδια μέθοδο όπως και παραπάνω για να διακριτοποιήσουμε την εξίσωση (3.17) αυτή μπορεί να γραφεί ως

$$-e_i = C_{i+1} \delta\phi_{i+1} + \delta\phi_i \left(C_{ii} + \frac{q}{\varepsilon_0} \sum_{k=1}^m \psi_k^* \psi_k \frac{qm^*}{\pi \hbar^2 (1 + \text{Exp}[(E_k - E_F)/kT])} \right) + C_{i-1} \delta\phi_{i-1} \quad (3.18)$$

Όπου

$$e_i = \sum_{j=1}^n C_{ij} \phi_j + q(N_{Di} - n_i) / \varepsilon_0 \quad (3.19)$$

$$A_{ij} = \begin{cases} \frac{2\varepsilon_{i+1/2}}{h_i(h_i + h_{i-1})} & \text{αν } j=i+1 \\ \frac{2\varepsilon_{i+1/2}}{h_i(h_i + h_{i+1})} & \text{αν } j=i-1 \\ -C_{ii+1} - C_{ii-1} & \text{αν } j=i \\ 0 & \text{οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (3.20)$$

Στην εξίσωση (3.18) υπάρχουν n εξισώσεις σφάλματος και n άγνωστες μεταβλητές ($\delta\phi_1, \delta\phi_2, \dots, \delta\phi_n$) οι οποίες μπορούν να παρασταθούν με πίνακες

$$C'\delta\phi = -\xi \quad (3.21)$$

όπου C' είναι ένας τριδιαγώνιος μη συμμετρικός $n \times n$ πίνακας, $\delta\phi$ είναι διάνυσμα μήκους n που περιλαμβάνει το διορθωμένο δυναμικό σε κάθε σημείο που πρέπει να προστεθεί στο προηγούμενο προφίλ του δυναμικού, και ξ είναι ένα διάνυσμα μήκους n που περιλαμβάνει το σφάλμα Poisson σε κάθε σημείο. Τώρα η εξίσωση (3.21) είναι η κεντρική εξίσωση που απαιτείται για να τροποποιήσουμε το προηγούμενο δυναμικό. Για να αυξηθεί η υπολογιστική απόδοση και να μειωθεί ο δεσμευμένος χώρος στη μνήμη χρησιμοποιείται η μέθοδος ελάττωσης Crout [3.11] για την εξίσωση (3.21).

3.3. Παράρτημα

Παρουσιάζουμε τη γενίκευση της μεθόδου του Newton για την επίλυση της εξίσωσης (3.3). Η ηλεκτρονική πυκνότητα καθορίζεται από την εξίσωση του Schrödinger, η οποία με την σειρά της ορίζεται από το δυναμικό $\phi(x)$, επομένως η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι συναρτησιακό του $\phi(x)$ μέσω των εξισώσεων (3.3), (3.4) και (3.5). Το συναρτησιακό αυτό παριστάνεται με $n[\phi]$, και η εξίσωση Poisson (3.3) μπορεί να γραφεί ως

$$\frac{d}{dx} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dx} \right) = \frac{-q(N_D - n[\phi])}{\epsilon_0} \quad (\text{A1})$$

Αν γράψουμε την ακριβή λύση της A1 με $\phi^{(0)}(x)$, τότε για μια δοκιμαστική συνάρτηση $\phi(x)$ θα πρέπει να βρούμε μια διορθωτική συνάρτηση $\delta\phi(x)$ έτσι ώστε

$$\phi^0(x) = \phi(x) + \delta\phi(x) \quad (\text{A2})$$

Με αντικατάσταση της A2 στην A1 έχουμε

$$\frac{d}{dx} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dx} \right) = \frac{-q(N_D - n[\phi + \delta\phi])}{\epsilon_0} - \frac{d}{dx} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dx} \right) \quad (\text{A3})$$

Αν ορίσουμε

$$n[\phi + \delta\phi] = n[\phi] + \delta n[\phi] \quad (\text{A4})$$

Η εξίσωση A3 μπορεί να γραφεί

$$-\left[\frac{d}{dx} \left(\epsilon_s \frac{d\phi}{dx} \right) \right] + \frac{q}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi]) = \frac{d}{dx} \left(\epsilon_s \frac{d\delta\phi}{dx} \right) - \frac{q}{\epsilon_0} \delta n[\phi] \quad (\text{A5})$$

Ο αριστερός όρος της εξίσωσης A5 είναι το σφάλμα στην εξίσωση Poisson για τη δοκιμαστική συνάρτηση $\phi(x)$, το οποίο μπορεί να υπολογιστεί εύκολα. Αν θεωρήσουμε ότι το $\delta\phi(x)$ είναι μικρό, τότε από τις εξισώσεις (4.5) και (A5), το $\delta n[\phi]$ μπορεί να εκφραστεί ως

$$\delta n[\phi] = \sum_{k=1}^m [\delta(\psi_k^* \psi_k) n_k + \psi_k^* \psi_k \delta n_k] \quad (A6)$$

Όπου

$$\delta(\psi_k^* \psi_k) = \psi_k^*[\phi + \delta\phi] \psi_k[\phi + \delta\phi] - \psi_k^*[\phi] \psi_k[\phi] \quad (A7)$$

Και

$$\delta n_k = n_k(\phi + \delta\phi) - n_k(\phi) \quad (A8)$$

Ο πρώτος όρος στα δεξιά της εξίσωσης (A6) είναι συνήθως πολύ μικρότερος από τον δεύτερο. Παραλείποντας τον πρώτο όρο και εκφράζοντας το δn_k σε σχέση με το $\delta\phi$, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (4) – (6) έχουμε

$$\delta n(\phi) = - \sum_{k=1}^m \psi_k^* \psi_k \frac{m^*}{\pi \hbar^2 (1 + \text{Exp}[(E_k - E_F)/kT])} \langle \psi_k | q \delta\phi | \psi_k \rangle \quad (A9)$$

όπου $\langle | \rangle$ είναι το ολοκλήρωμα bra – ket. Οι εξισώσεις (A5) – (A9) είναι αυτές που πρέπει να επιλυθούν ως προς ϕ χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Newton.

3.4. Αναφορές

- [3.1] T. Demel D. Heitmann, P. Gramoow, and K. Ploog, Appl. Phys. Lett. 53,2176 (1988).
- [3.2] T. Thornton, M. Pepper, H. Ahmed, D. Andrews, and G. J. Davies, Phys. Rev. Lett. 56,1198 (1986)
- [3.3] J. M. Gaines, P. M.Petroff, H. Kroemer, R. J. Simes, R. S. Geels, and J. H. English, J. Vac. Sci. Technol. B 6, 1378 (1988).
- [3.4] T. Fukui and H. Saito, Appl. Phys. Lett. 50, 824 (1987).
- [3.5] M. Tomizawa, T. Furuta, K. Yokoyama, and A. Yoshii, IEEE Trans. Electron Devices ED-36, 2380 (1989).
- [3.6] D. Mui, M. Patil, and H. Morkoc, Appl. Phys. Lett. 55,1223 (1989).
- [3.7] G. L. Snider, I-H. Tan, and E. L. Hu, J. Appl. Phys. 68, 2849 (1990).
- [3.8] S. E. Laux and F. Stern, Appl. Phys. Lett. 49, 91 (1986).
- [3.9] F. Szidarouszky and S. Yakowitz, Principles and Procedures of Numerical Analysis (Plenum, New York, 1978), p. 221.
- [3.10] C. M. Krowne, J. Appl. Phys. 65, 1602 (1989).
- [3.11] J. Y.-F. Tang and S. E. Laux, IEEE Trans. Computer-Aided Design CAD-5, 645 (1986).
- [3.12] F. B. Hildebrand, Introduction to Numerical Analysis, 2nd ed. (Dover, New York, 1987), p. 559.

4. ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΠΡΟΣΟΜΙΩΣΗΣ

4.1. Το πρόγραμμα MOS-SIM

Το MOS-SIM είναι ένα πρόγραμμα το οποίο αναπτύχθηκε για να προσομοιώνει και ταυτόχρονα να αναλύει τη χωρητικότητα σε σχέση με την εφαρμοζόμενη τάση πύλης V_g . Αυτό γίνεται με μετρήσεις που πραγματοποιούνται σε διάφορες συχνότητες σε MOS διατάξεις με υπόστρωμα Si ή Ge.

Το πρόγραμμα υπολογίζει την σύνθετη αγωγιμότητα του Y σε μια MOS διάταξη ως συνάρτηση της τάσης που δέχεται στην πύλη επιλύοντας τις εξισώσεις Poisson και Schrödinger σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια. Το Y είναι άμεσα σχετιζόμενο με την χωρητικότητα και την αγωγιμότητα αφού

$$Y = G + i\omega C$$

Ο κώδικας για τον υπολογισμό της θεωρητικής χωρητικότητας (SIM-MOS.exe) είναι γραμμένος στη γλώσσα Visual C++ με το πακέτο ανάπτυξης λογισμικού Microsoft Visual Studio Express. Δημιουργήθηκαν διαφορετικές εκδόσεις του κώδικα αυτού, ανάλογα με το αν το υπόστρωμα είναι σε Πυρίτιο ή σε Γερμάνιο και ανάλογα με το αν θα γίνει προσομοίωση για χαμηλές συχνότητες ή υψηλές συχνότητες.

Οι βασικές παράμετροι για την MOS δομή είναι οι ακόλουθες:

- ✓ C_i : αποτελεί τον μονωτή της συγκεκριμένης χωρητικότητας σε μονάδα μέτρησης $\mu\text{F}/\text{cm}^2$
- ✓ Αρχική τάση, τελική τάση πόλωσης και βήμα
- ✓ Επιλογή n-τύπου ή p-τύπου υπόστρωμα Si ή Ge
- ✓ Συγκέντρωση προσμίξεων δοτών ή ληπτών
- ✓ Πάχος διηλεκτρικού
- ✓ Μετατόπιση δυναμικού V_{fb}

4.2. Περιβάλλον Βελτιστοποίησης με χρήση του λογισμικού Merlin

4.2.1. Εισαγωγή

Η ελαχιστοποίηση στην περίπτωση των ν-διάστατων περιπτώσεων είναι αρκετά συχνή σε αρκετούς τομείς. Ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων σε αρκετές επιστήμες όπως μηχανική, φυσική, χημεία και άλλες συχνά καταλήγουν στο να εντοπίσουν το ελάχιστο σε προβλήματα πολλών μεταβλητών. Για παράδειγμα μπορούμε να αναφέρουμε τις περιπτώσεις των μη-γραμμικών εξισώσεων, την προσαρμογή καμπύλης, οι μέθοδοι των μεταβολών καθώς και τα νευρωνικά δίκτυα. Η ελαχιστοποίηση μίας πολυδιάστατης συνάρτησης αντιμετωπίζει αρκετά προβλήματα. Δεν υπάρχει μια και μοναδική μέθοδος που να ικανοποιεί όλες τις περιπτώσεις. Είναι πλέον κοινά αποδεκτό ότι απαιτείται ένας συνδυασμός στρατηγικής και διάφορων μεθόδων προκειμένου να αντιμετωπιστεί ένα μεγάλο εύρος προβλημάτων που προκύπτουν. Αρκετές φορές η ύπαρξη έστω και ενός περιορισμού μπορεί να αυξήσει σημαντικά τον βαθμό δυσκολίας.

Πολλοί αλγόριθμοι απαιτούν αξιολόγηση για το πόσο αποτελεσματικοί είναι και για το πώς συμπεριφέρονται σε περιπτώσεις κλιμάκωσης. Αυτό έχει ως συνέπεια να δημιουργούνται επιπλέον δυσκολίες.

Το ενοποιημένο περιβάλλον Merlin [4.1] σχεδιάστηκε να επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης. Δημιουργήθηκε με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε να είναι εύκολο στην χρήση και να μπορεί να είναι μεταφέρσιμο σε διαφορετικές πλατφόρμες. Ένα επιπλέον σημαντικό χαρακτηριστικό του Merlin είναι ότι μπορεί εύκολα να ενσωματωθεί σε μηχανισμούς με άλλους (plug-in).

Το περιβάλλον Merlin επιλύει προβλήματα της παρακάτω κατηγορίας:

Βρίσκει το τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης.

$$f(x), \quad x \in R^N, \quad x = [x_1, x_2, x_3, x_4, \dots, \dots, x_1]^T$$

και με βάση τους παρακάτω περιορισμούς.

$$x_i \in [a_i, b_i] \text{ για } i = 1, 2, 3, 4 \dots N$$

Ειδική μέριμνα έχει γίνει στις περιπτώσεις των προβλημάτων όπου η συνάρτηση μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα των τετραγώνων των i , όπως φαίνεται παρακάτω.

$$f(x) = \sum_{i=1}^M f_i^2(x)$$

Η συγκεκριμένη μορφή [4.3] είναι ιδιαίτερα ικανή στις περιπτώσεις όπου ο χρήστης χρειάζεται να προσαρμόσει δεδομένα (data points) με την χρήση συνάρτησης. Στη συνέχεια μπορεί κάποιος να ελαχιστοποιήσει το chi-square της προηγούμενης σχέσης.

Σε αυτήν την περίπτωση το Merlin [4.1] υπολογίζει την ασυμπτωτική διακύμανση του μοντέλου καθώς και την συνδιακύμανση.

Το περιβάλλον Merlin μπορεί να χρησιμοποιηθεί τόσο σε αλληλεπιδραστικά συστήματα όσο και σε αυτοματοποιημένα με την χρήση batch. Στην δεύτερη περίπτωση διαβάζει τις εντολές από ένα αρχείο. Ενώ στην πρώτη περίπτωση τις δέχεται από το χρήστη σε αυτήν την περίπτωση είναι περισσότερο ανεκτικό σε λάθη.

Το Merlin είναι ανοιχτό σε αλλαγές κώδικα. Η γλώσσα προγραμματισμού του είναι η MCL (Merlin Control Language), είναι πολύ εύκολη στην εκμάθηση και είναι υψηλού επιπέδου. Ο μεταγλωττιστής (MCL compiler) παίρνει ως input την διαδικασία των εντολών και παράγει ένα φάκελο με τις εντολές που είναι κατάλληλες για το Merlin. Ο μεταγλωττιστής και το Merlin έχουν υλοποιηθεί σε

ANSI Fortran 77 για να μπορεί να υπάρχει εύκολη μεταφορά του έργου και σε άλλες πλατιφόρμες.

4.2.1.1. Προγραμματισμός σε Περιβάλλον Merlin

Η MCL [4.2] είναι μία γλώσσα ειδικού σκοπού, είναι γλώσσα υψηλού επιπέδου η οποία είναι συσχετισμένη με το Merlin. Το Merlin δέχεται εντολές οι οποίες καθορίζουν την ροή και το αποτέλεσμα των εντολών που εκτελούνται.

Ο χρήστης μπορεί να προετοιμάσει το αρχείο που θα δεχτεί το σύστημα Merlin ως input, το οποίο μπορεί να περιέχει εντολές . Οι εντολές εκτελούνται σειριακά . Αυτός είναι ο ένας τρόπος χρήσης του Merlin. Ο άλλος τρόπος είναι να δίνεις τις εντολές από ένα τερματικό έτσι είναι αρκετά πιο αποτελεσματικό και αποτελεί και τον τρόπο όπου υπάρχει αλληλεπίδραση με τον χρήστη. Για παράδειγμα ένας χρήστης μπορεί να παρατηρήσει κατά την διάρκεια των εντολών ότι ο αλγόριθμος δεν έχει την προσδοκώμενη ανταπόκριση και να θελήσει να επέμβει ή να κάνει τις οποιεσδήποτε αλλαγές θεωρεί αναγκαίες. Από την άλλη όμως κάτι τέτοιο απαιτεί μεγάλη εξοικείωση και αρκετές ώρες χρήσης του τερματικού το οποίο δεν είναι πάντα επιθυμητό. Η γλώσσα MCL [4.2] είναι αρκετά κατανοητή και εύκολη στην μάθηση της. Επιπλέον υποστηρίζει αριθμητικές πράξεις, δομές με διάφορες μορφές (branching structure) καθώς και άλλα αρκετά χαρακτηριστικά. Για να μπορέσουν να γίνουν τα προηγούμενα χαρακτηριστικά κατασκευάσαμε ένα MCL-compiler και τον προσθέσαμε στο Merlin με το κατάλληλο interface.

Το MCL object code (MOC) [4.5] αποτελεί μέρος των δεδομένων που δέχεται το Merlin και του υπαγορεύει τον τρόπο υλοποιήσεως των εντολών. Για τους χρήστες με κάποια εμπειρία συστήνεται η χρήση του MCL ενώ για τους αρχάριους πρώτα η εξοικείωση με το Merlin.

4.3. Διασύνδεση Merlin και MOS-SIM

Γενικός σχεδιασμός

Χρησιμοποιούμε το Merlin (όπως αυτό περιγράφηκε στο αντίστοιχο κεφάλαιο) για να υπολογίσουμε με αυτόματο τρόπο τις βέλτιστες τιμές που ελαχιστοποιούν το άθροισμα της διαφοράς τετραγώνων των θεωρητικών σημείων από τα πειραματικά σημεία. Έγινε μεταγλώττιση (compile) του βασικού κώδικα του Merlin (merlin.f) με την Intel® Software Development Suite Student Edition για Windows.

```
C:\minstall>merlin
Enter number of variables, number of squared terms:
6,81

-----
                                     M E R L I N - 3.1.1 / Oct 2003
                                     D.G. Papageorgiou, I.E. Lagaris
                                     I.N. Demetropoulos
                                     University of Ioannina
                                     G R E E C E
                                     Email: merlin@nrt.cs.uoi.gr
                                     Web: http://nrt.cs.uoi.gr/merlin
-----

The user-modules file "MODULES" is not present.
-----

The Merlin help file "HELP" is present.
The panel description file "PDESC" is present.
Use the "help" command to obtain on-line information.
-----

Number of terms:      81
Number of variables:  6
Estimated machine's accuracy: 1.E-15
Merlin uses "SUBROUTINE SUBSUM" as the objective function.
     ....  W A R N I N G  ....
     ... Initialize variables ...

  ^^^^^^^^^^^ Merlin is at your command !!!
```

Εικόνα 4.1. Περιβάλλον εργασίας πακέτου Merlin

Επιπλέον δημιουργήθηκε το απαραίτητο αρχείο-υποπρόγραμμα Fortran (sample.f) το οποίο περιέχει τη συνάρτηση FUNMIN την οποία καλεί το Merlin για να λειτουργήσει.

Ο κώδικας για τον υπολογισμό της θεωρητικής χωρητικότητας (SIM-MOS.exe) είναι γραμμένος στη γλώσσα Visual C++ με το πακέτο ανάπτυξης λογισμικού Microsoft

Visual Studio Express. Δημιουργήθηκαν διαφορετικές εκδόσεις του κώδικα αυτού, ανάλογα με το αν το υπόστρωμα είναι σε Πυρίτιο ή σε Γερμάνιο και ανάλογα με το αν θα γίνει προσομοίωση για χαμηλές συχνότητες ή υψηλές συχνότητες.

Για να είναι δυνατή η επικοινωνία μεταξύ του κώδικα Fortran και μεταξύ του κώδικα Visual C++ μεταφέραμε σε ορίσματα γραμμής εντολής του κώδικα Visual C++ τις απαραίτητες για τη λειτουργία παραμέτρους. Οι παράμετροι αυτοί είναι

- Η αρχική τάση
- Η τελική τάση
- Η χωρητικότητα του διηλεκτρικού
- Η συγκέντρωση προσμίξεων n-τύπου
- Η συγκέντρωση προσμίξεων p-τύπου
- Το πάχος διηλεκτρικού
- Η μετατόπιση της Vflatband
- Τιμή του Dit.

Έτσι προέκυψε εκτελέσιμο πρόγραμμα (SIM-MOS.exe) σε δυο εκδόσεις (για Πυρίτιο και για Γερμάνιο) το οποίο μπορεί να κληθεί τόσο από τη γραμμή εντολών με τα κατάλληλα ορίσματα όσο και ως κλήση συστήματος μέσα από άλλο πρόγραμμα. Στην περίπτωση μας δηλαδή ως κλήση συστήματος από το εκτελέσιμο πρόγραμμα της Fortran, το οποίο περιλαμβάνει και το εκτελέσιμο του Merlin.

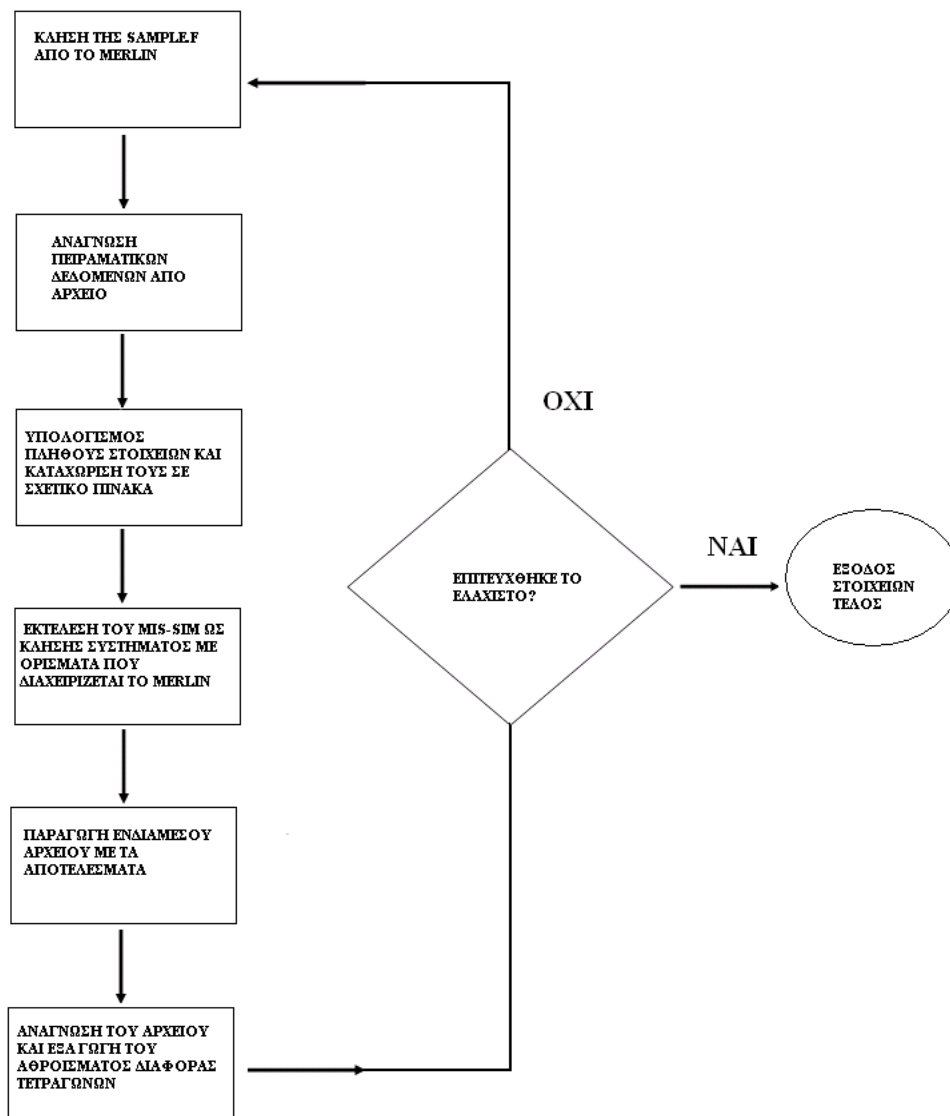
Το πρόγραμμα sample.f

Το πρόγραμμα αυτό περιέχει τη συνάρτηση FUNMIN την οποία καλεί διαδοχικά το Merlin προκειμένου να υπολογίσει τις βέλτιστες τιμές. Η λειτουργία του έχει ως εξής:

- Διαβάζει τα πειραματικά δεδομένα από το αντίστοιχο αρχείο
- Μετρώντας τα πειραματικά σημεία υπολογίζει το πλήθος τους και την αρχική και τελική τιμή τάσης και τα καταχωρίζει σε πίνακα.

- Μετά καλεί ως system call το εκτελέσιμο πρόγραμμα SIM-MOS.exe περνώντας του τις παραμέτρους τις οποίες προσπαθεί να βελτιστοποιήσει ως ορίσματα στη γραμμή εντολών του προγράμματος. Το εκτελέσιμο πρόγραμμα εξάγει τα στοιχεία αυτά σε ενδιάμεσο αρχείο.
- Ο κώδικας Fortran, διαβάζει τα δεδομένα από το ενδιάμεσο αυτό αρχείο και υπολογίζει τη διαφορά τετραγώνων σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα
- Η τιμή της διαφοράς της τιμής αυτής επιστρέφει στο Merlin ώστε να ξεκινήσει πάλι ο κύκλος με νέες τιμές στις παραμέτρους

Στην εικόνα περιγράφεται και το διάγραμμα ροής του προγράμματος αυτού



Διάγραμμα 4.1. Διάγραμμα ροής του sample.f

Βήματα που ακολουθούμε στο Merlin

1. Ξεκινάμε το περιβάλλον Merlin
2. Δίνουμε το πλήθος των παραμέτρων (6) (οι παράμετροι για την αρχική και τελική τάση εξάγονται αυτομάτως από τις τιμές του πειραματικού αρχείου) και πόσες τιμές περιέχουν τα πειραματικά δεδομένα
3. Οι 6 παράμετροι τις οποίες θα προσπαθήσει να ελαχιστοποιήσει το Merlin είναι είναι: Η χωρητικότητα διηλεκτρικού, η συγκέντρωση προσμίξεων n-τύπου ή p-τύπου, το πάχος διηλεκτρικού, η μετατόπιση της Vflatband και η τιμή του Dit.
4. Ζητάμε τη ρουτίνα GENERAL.
5. Βάζουμε με την εντολή POINT του Merlin αρχικές τιμές.
6. Θέτουμε τα όρια των τιμών των μεταβλητών αυτών με τις εντολές LMARGIN και RMARGIN
7. Σταθεροποιούμε μεταβλητές που δεν αλλάζουν με την εντολή FIX
8. Ζητάμε την αυτόματη επίλυση με επιλογή της βέλτιστης ρουτίνας από το Merlin (AUTO)
9. Το Merlin ξεκινάει, καλεί το Sample.f το οποίο με τη σειρά του καλεί το SIM-MOS.exe, υπολογίζεται το άθροισμα της διαφοράς των τετραγώνων και η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να προκύψουν οι βέλτιστες τιμές (Διάγραμμα 4.1).

4.4. Αναφορές

[4.1] <http://merlin.cs.uoi.gr/mrlintro.html>

[4.2] <http://merlin.cs.uoi.gr/mclintro.html>

[4.3] MERLIN-2.0 - Enhanced and programmable version, D.G. Papageorgiou, C.S. Chassapis and I.E. Lagaris, *Comput. Phys. Commun.*, 52 (1989) 241-247.

[4.4] <http://www.ims.demokritos.gr/INVEST/Qitfit.htm>

[4.5] The Merlin Control Language for Strategic Optimization, D.G. Papageorgiou, I.N. Demetropoulos and I.E. Lagaris, *Comput. Phys. Commun.* 109 (1998) 250-275.

5. ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

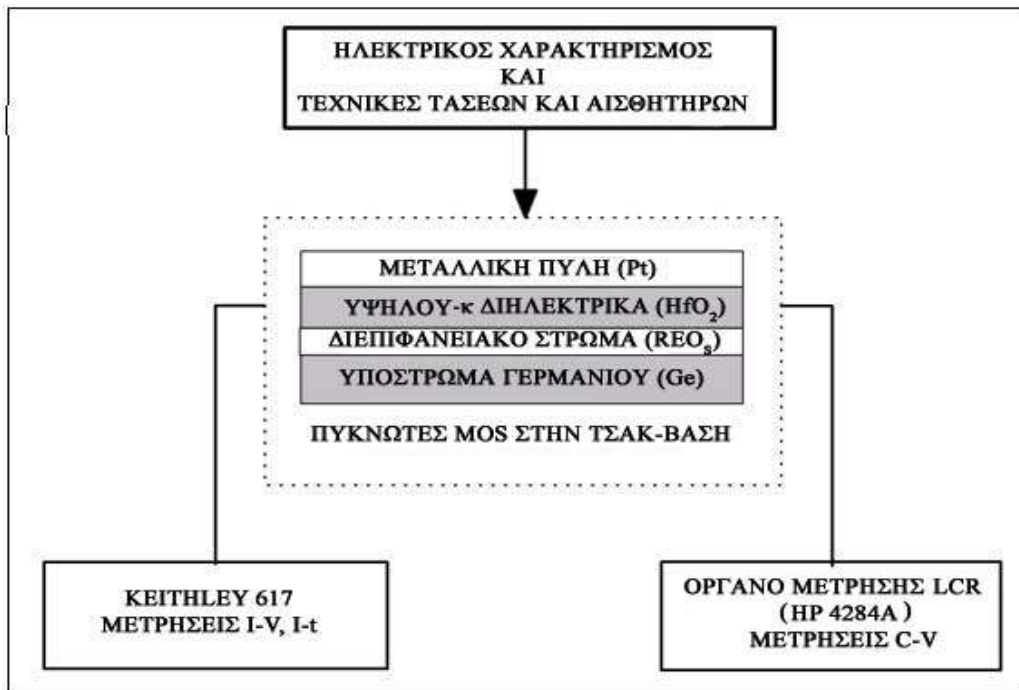
5.1. Πειραματικές Διατάξεις και Μετρήσεις

5.1.1. MOS Ηλεκτρικός χαρακτηρισμός και πειραματική διάταξη

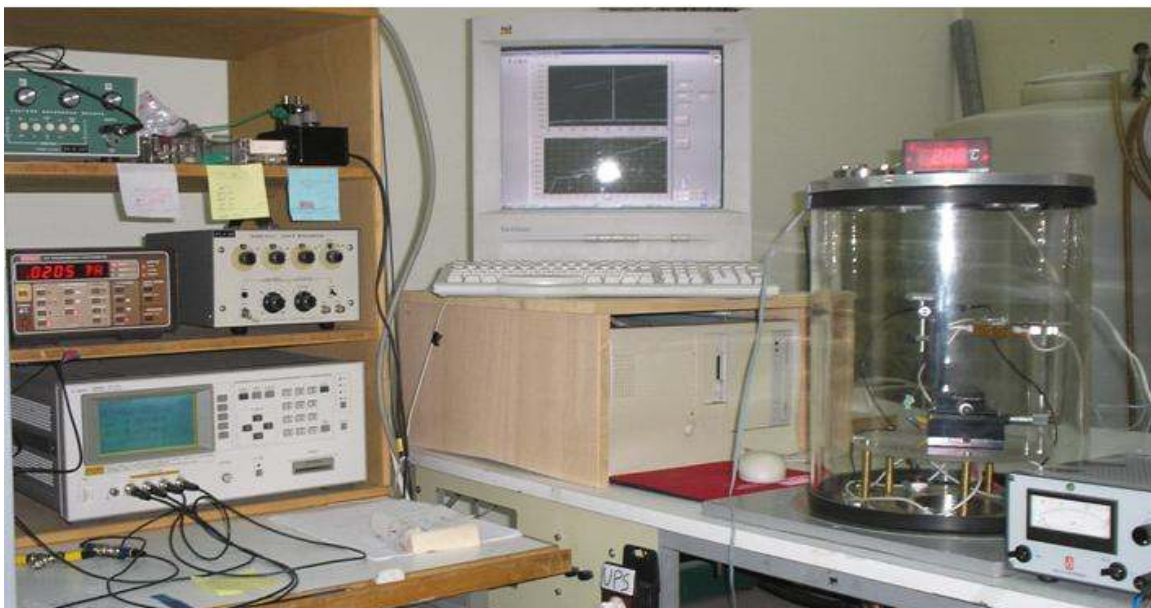
5.1.1.1. Εισαγωγή

Για τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά και μετρήσεις αξιοπιστίας των οξειδίων σπάνιων γαιών (REOs) ως διηλεκτρικών και/ή διεπιφανειακών στρωμάτων σε συνδυασμό με υλικά υψηλού-κ π.χ. διστρωματικές δομές πύλης (gate stacks), τα οποία περιγράφονται στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιήθηκε ένα ηλεκτρόμετρο Keithley 617, ένα όργανο μέτρησης LCR πολλαπλών συχνοτήτων (HP 4284A) και ένα σύστημα έλεγχου της θερμοκρασίας που αναπτύχθηκε στο εργαστήριο (σχήμα 5.1). Τα δείγματα θερμάνθηκαν σε ένα θερμαινόμενη τσακ-βάση (chuck) με τη βοήθεια ρυθμιστή θερμοκρασίας και επίσης διατηρήθηκαν σε σταθερή θερμοκρασία και σε θερμοκρασία δωματίου ανάμεσα στις μετρήσεις.

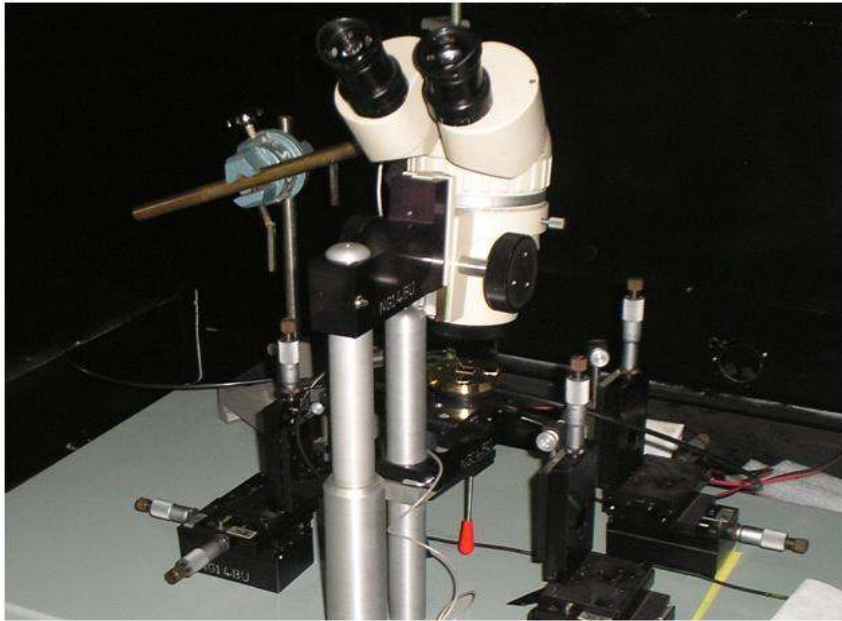
Στο σχήμα 5.1 παρουσιάζεται διάγραμμα της διαδικασίας των μετρήσεων ενώ η λεπτομερής απεικόνιση της πειραματικής διάταξης στο εργαστήριο πραγματοποιείται στο σχήμα 5.2.



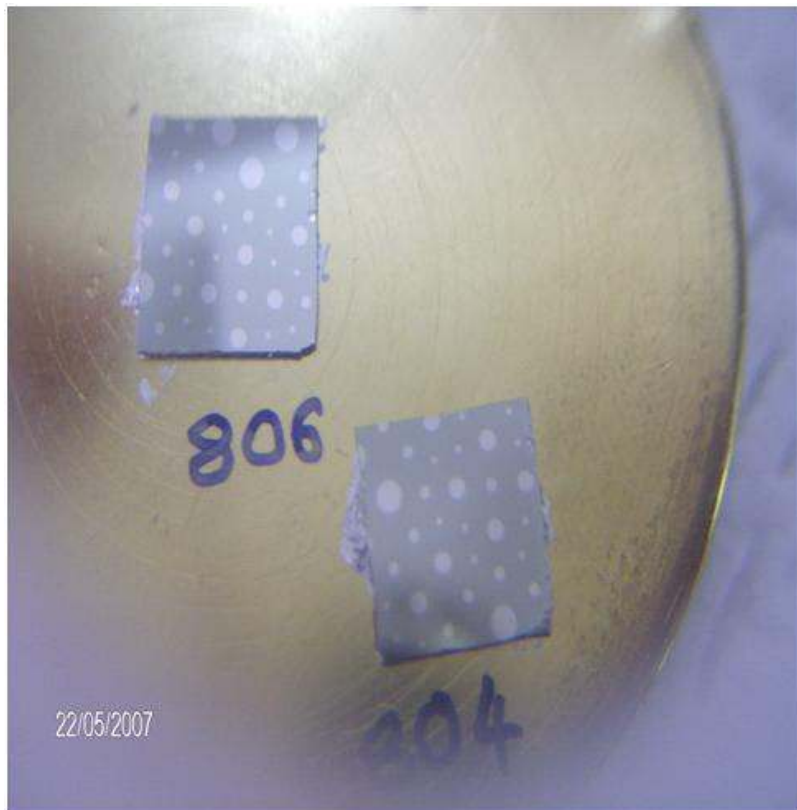
Σχήμα 5.1: Σχηματικό διάγραμμα του συστήματος μέτρησης



Σχήμα 5.2 (α): Σύστημα Μέτρησης



Σχήμα 5.2 (β): Τοποθέτηση ακίδας σε σκοτεινό θάλαμο ακίδας (probe station)

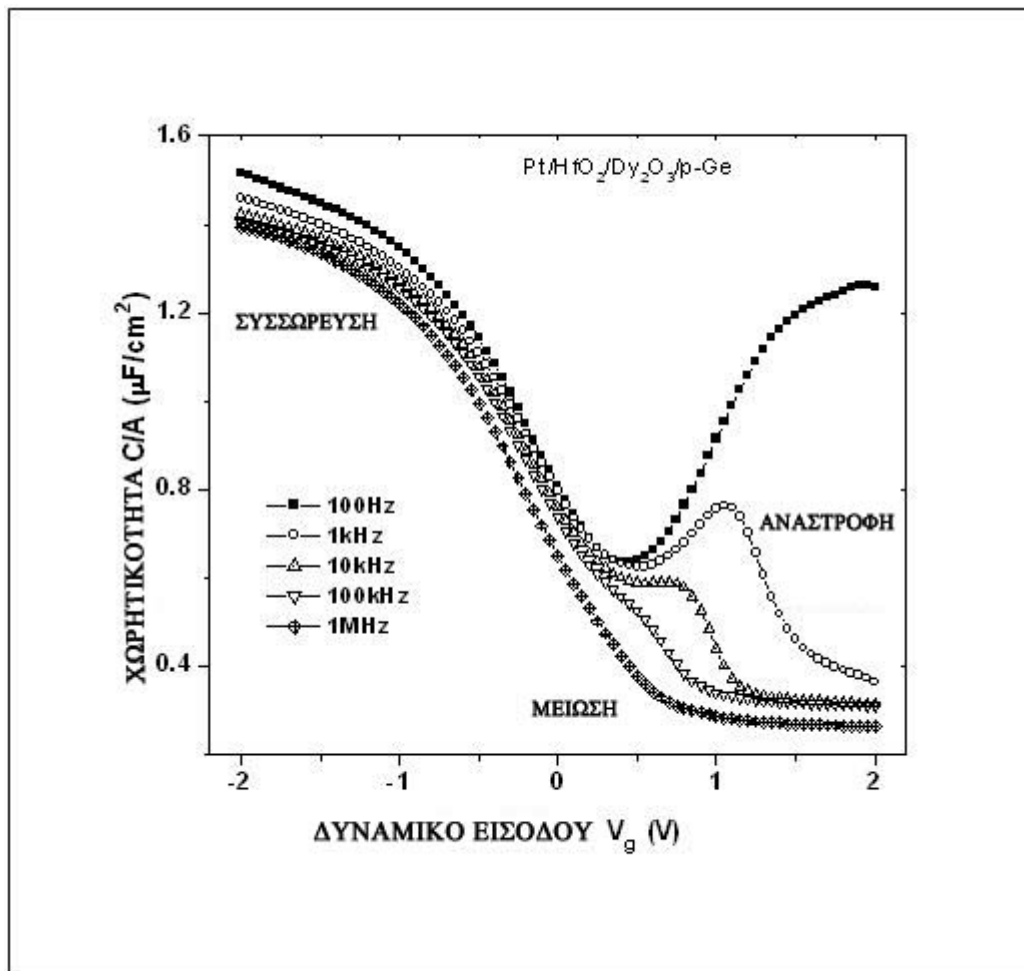


Σχήμα 5.2 (γ): δείγματα (Pt/CeO₂/p-Ge)

5.1.1.2. Μετρήσεις Χωρητικότητας-Τάσης (C-V)

Ο ηλεκτρικός έλεγχος της χωρητικότητας και της αγωγιμότητας σύμφωνα με το δυναμικό που εφαρμόστηκε στο ηλεκτρόδιο της εισόδου (C-V και G-V αντίστοιχα) πραγματοποιήθηκε με έναν αναλυτή εμπέδησης HP 4284A.

Μια ακίδα τοποθετήθηκε σε επαφή με την επάνω επιφάνεια του πυκνωτή και μία δεύτερη στην κάτω επαφή που είναι κατασκευασμένη από κράμα In-Ga πάνω σε υποστρώματα γερμανίου. Μικρός αριθμός πυκνωτών (διαμέτρου 200-300 μm) τοποθετήθηκε για τον έλεγχο της αξιοπιστίας και καμπύλες C-V δημιουργήθηκαν για συχνότητες 20 Hz έως 1MHz (σχήμα 5.3) με βήμα δυναμικού 0.05V σε κάθε μέτρηση.



Σχήμα 5.3: Η χαρακτηριστική καμπύλη χωρητικότητας-δυναμικού των Pt/HfO₂/DyO₃/p-Ge σε διάφορες συχνότητες (100Hz-1MHz) σε θερμοκρασία δωματίου 295K.

Το ισοδύναμο πάχος οξειδίου (EOT) προέκυψε από τις υψηλής συχνότητας καμπύλες C-V με τη χρήση του προγράμματος προσομοίωσης MOS-SIM το οποίο λύνει τις εξισώσεις Poisson και Schrödinger λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα κβαντικού περιορισμού. Τα δεδομένα εισόδου στο πρόγραμμα MOS-SIM είναι τα δεδομένα C-V για την υψηλή συχνότητα και σαν έξοδος προκύπτει η EOT. Τα φορτία του οξειδίου που είναι παγιδευμένο, $Q_{ox} = C_{ox} \Delta V_{FB}$ [5.2] και το ΔV_{FB} λόγω των διαδοχικών CVS προκύπτουν από την ανάλυση των καμπύλων C-V σε χωρητικότητα flatband (C_{FB}). Πριν την τάση (stress), στις καινούριες διατάξεις, οι καμπύλες C-V προέκυψαν από την αναστροφή στη συσσώρευση και αντίθετα έτσι ώστε να αποφευχθεί το φαινόμενο της μεγάλης μείωσης [5.3].

Για την ακρίβεια υποθέτουμε ότι η αλλαγή στην αύξηση του δυναμικού flatband προκύπτει λόγω της αλληλεπίδρασης του παγιδευμένου φορτίου που εντοπίζεται στους σωρούς/υποστρώματα της διεπιφάνειας και του φορτίου που αναπτύσσεται στο κενό των οξειδίων. Το παγιδευμένο φορτίο ΔN_{ox} μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση

$$\Delta N_{\text{ox}} = -\frac{C_{\text{ox}}}{qA} \Delta V_{\text{FB}} \quad (5.1)$$

Όπου ΔV_{FB} είναι η αύξηση του δυναμικού flatband, C_{ox} η χωρητικότητα στο οξείδιο, q το αρχικό φορτίο και A το εμβαδό επιφάνειας του πυκνωτή.

5.2. Πειραματικά Δεδομένα και Καμπύλες Απόκρισης

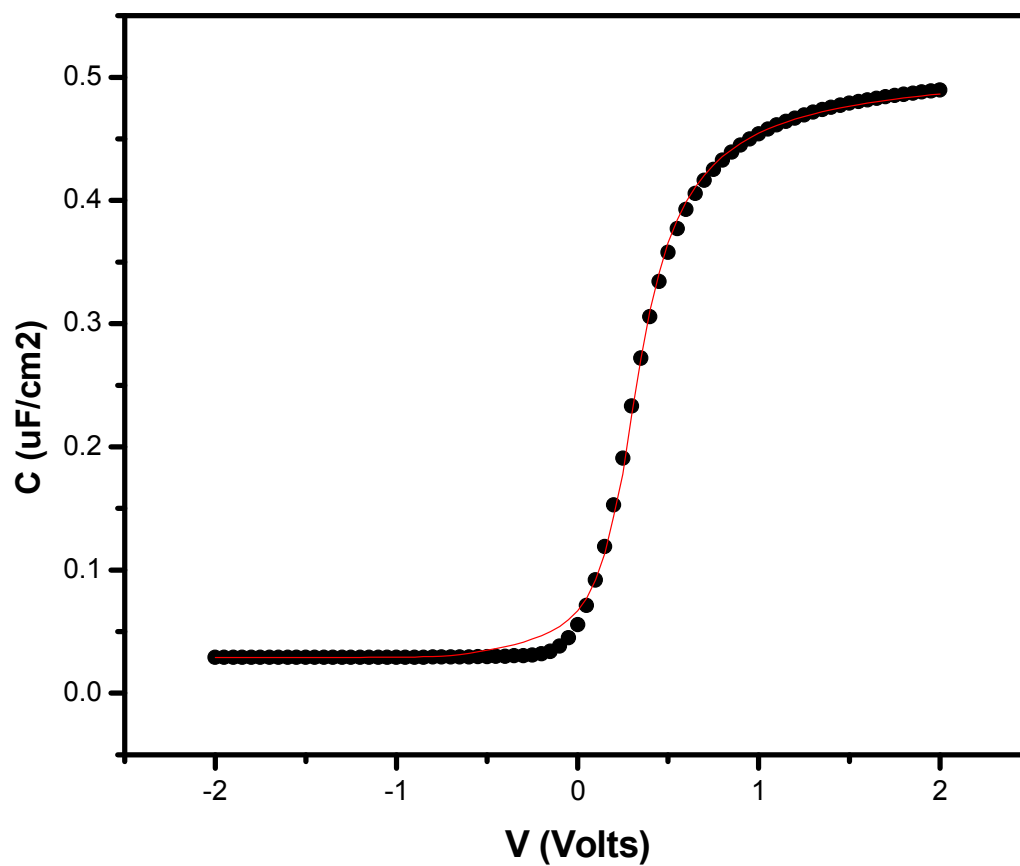
Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται η σύγκριση των πειραματικών δεδομένων με τα θεωρητικά δεδομένα, όπως αυτά προέκυψαν από το πρόγραμμα MOS-SIM και την ελαχιστοποίηση των αντίστοιχων παραμέτρων από το Merlin. Για τις ανάγκες της παρούσας Διατριβής αναλύθηκαν 5 δείγματα (ανεπτυγμένα τόσο Πυρίτιο όσο και σε Γερμάνιο), προ και κατόπιν ανοπήσεως και σε διαφορετικές συχνότητες.

Το Merlin πραγματοποίησε την προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων σε σχέση με τα θεωρητικά, μεταβάλλοντας τις παραμέτρους για τη χωρητικότητα διηλεκτρικού, τη συγκέντρωση προσμίξεων n-τύπου (ή p-τύπου), τη μετατόπιση της Vflatband και την τιμή του Dit. Ο περιορισμός των παραμέτρων ήταν σχετικά μικρός, δηλαδή οι παράμετροι κυμαίνονται ανάμεσα στις κάτωθι τιμές: Για τη χωρητικότητα διηλεκτρικού: 0.01 έως 4 $\mu\text{F}/\text{cm}^2$, για το Dit: 10^{11} έως $10^{13} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$, Για το V_{fb} -1 έως 1 Volt και για τη συγκέντρωση προσμίξεων (Na ή Nd αντίστοιχα) 10^{15} έως 10^{16} . Ο χρόνος εκτέλεσης της ρουτίνας ελαχιστοποίησης κυμάνθηκε σε λίγα λεπτά για κάθε δείγμα.

Τα δομικά χαρακτηριστικά των δειγμάτων φαίνονται στον ακόλουθο πίνακα

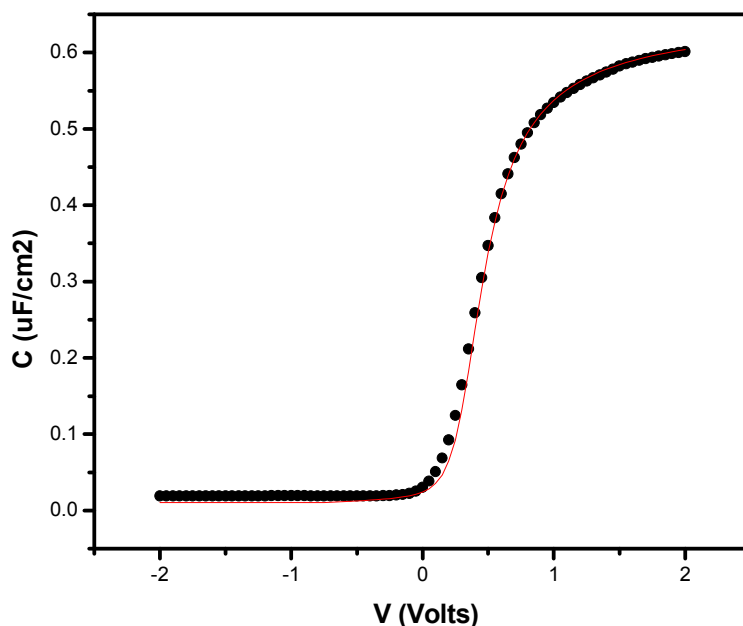
Δείγμα	869	871	1048	1075	1079
Πάχος	10 nm	10nm	20nm	19,6nm	23,5nm
Υπόστρωμα	n-Ge	n-Ge	p-Si	p-Si	p-Si
Tdep	225 ^o C	150 ^o C	225 ^o C	225 ^o C	225 ^o C
Οξειδιο πύλης (high k)	La ₂ O ₃ (10nm)	La ₂ O ₃ (10nm)	ZrO ₂ (20nm)	ZrO ₂ (20nm)	ZrO ₂ (24nm)
Διεπιφανειακό στρώμα	-	-	SiON (1.5 nm)	SiON (1.5 nm)	SiON (1.5 nm)

5.2.1. Δείγμα 869 (Ge) non-annealed, 1 MHz

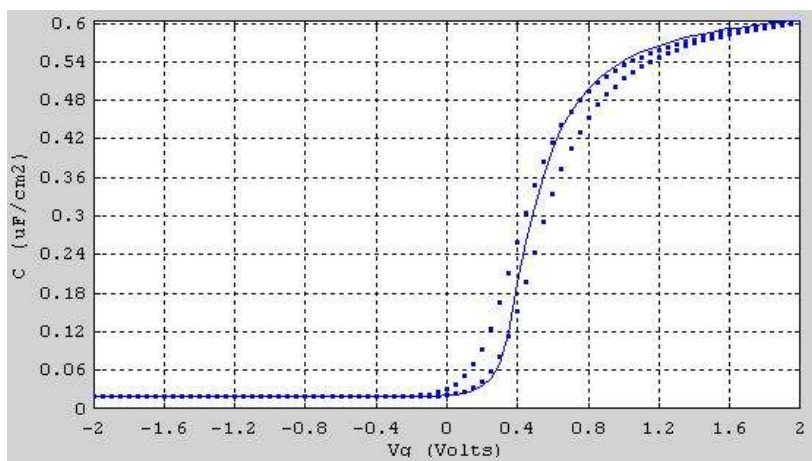


C_{ox} ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	N_d (cm^{-3})	V_{fb} (V)	D_{it} ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.6	10^{16}	0.21	$7 \cdot 10^{11}$	6.5

5.2.2. Δείγμα 871 (Ge) annealed, 1 MHz

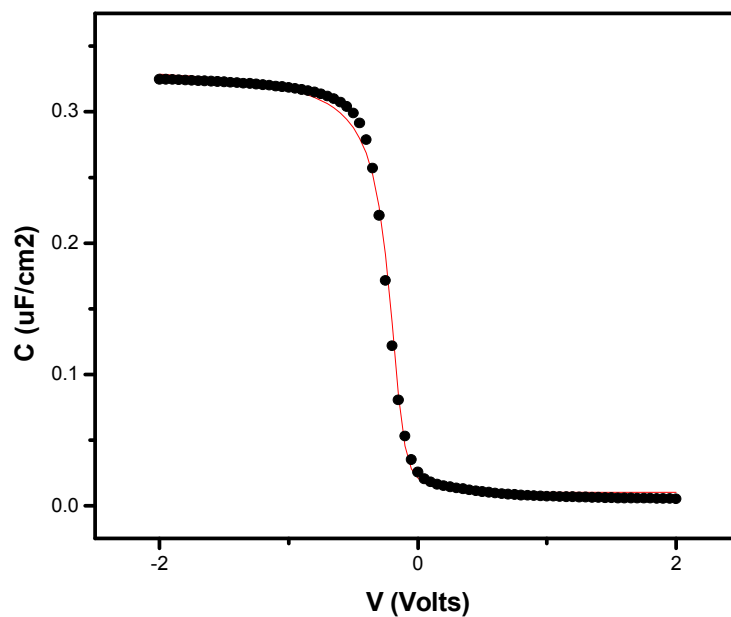


Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Nd (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.77	10^{15}	0.13	$6 \cdot 10^{12}$	5.1

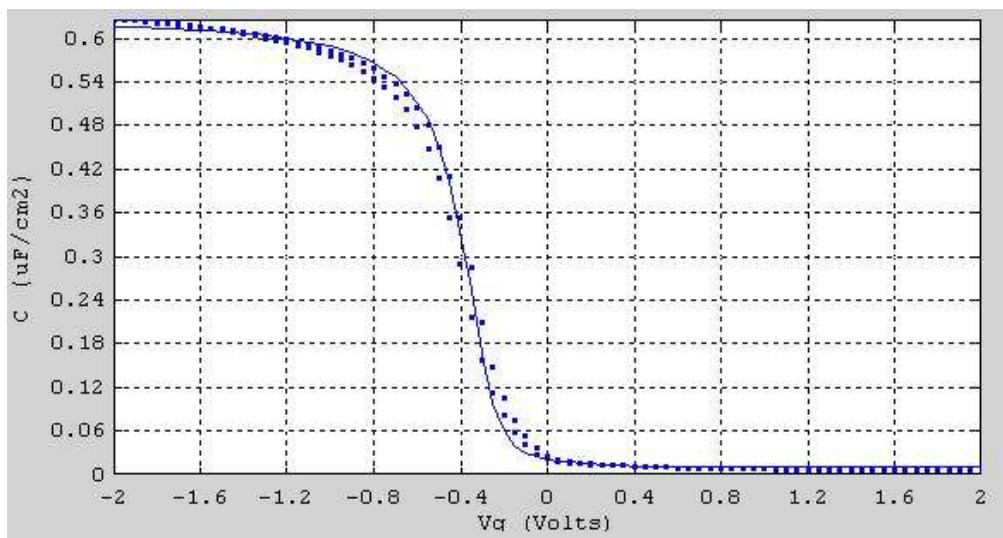


Παρατίθεται παραπάνω εικόνα που λήφθηκε από μια από τις βέλτιστες προσαρμογές δεδομένων με χρήση του προγράμματος MIS-FIT [5.1] για το ίδιο δείγμα. Παρά τις εκτενείς και χρονοβόρες προσπάθειες που πραγματοποιήθηκαν με αλλαγή των παραμέτρων από τον χρήστη, η διαφορά στην επιτυχία προσαρμογής της καμπύλης είναι φανερή. Αντίστοιχα το κέρδος χρόνου ήταν σημαντικό.

5.2.3. Δείγμα 1048 (Si) annealed, 1 MHz

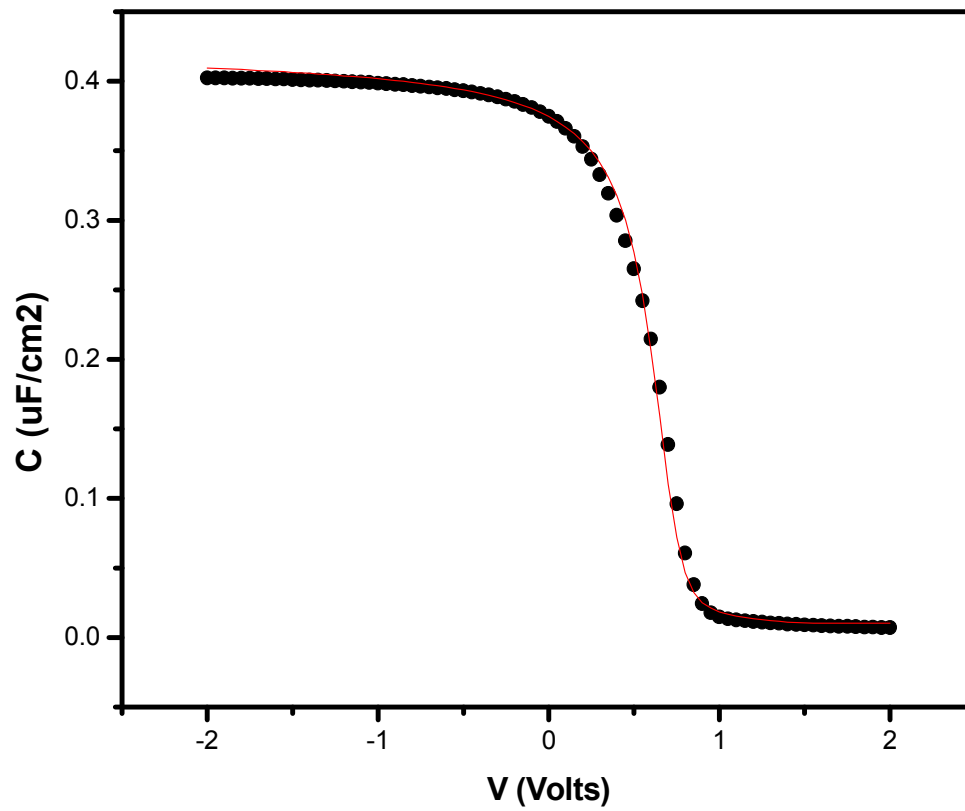


Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Na (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.39	10^{15}	0.12	$5 \cdot 10^{11}$	9.9



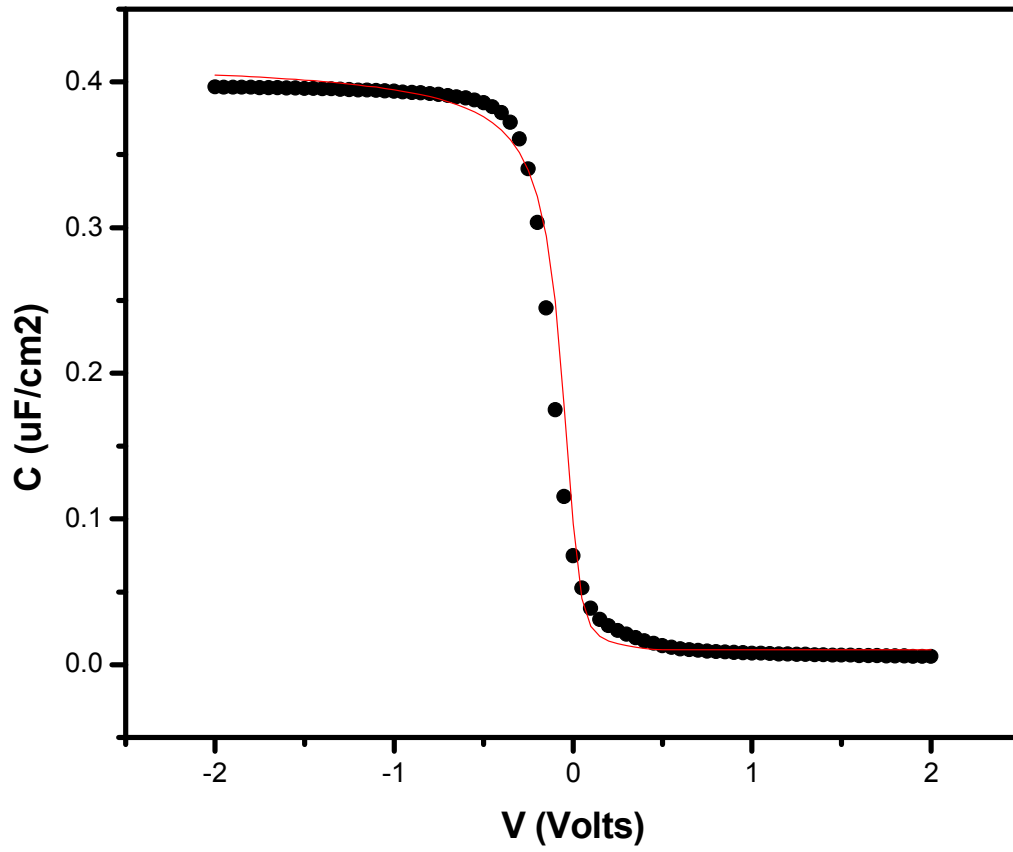
Παρατίθεται παραπάνω εικόνα που λήφθηκε από μια από τις βέλτιστες προσαρμογές δεδομένων με χρήση του προγράμματος MIS-FIT [5.1] για το ίδιο δείγμα. Και πάλι παρατηρείται σημαντική διαφορά στην προσαρμογή αλλά και στο συνολικό απαιτούμενο χρόνο.

Δείγμα 1048 (Si) non-annealed, 1 MHz



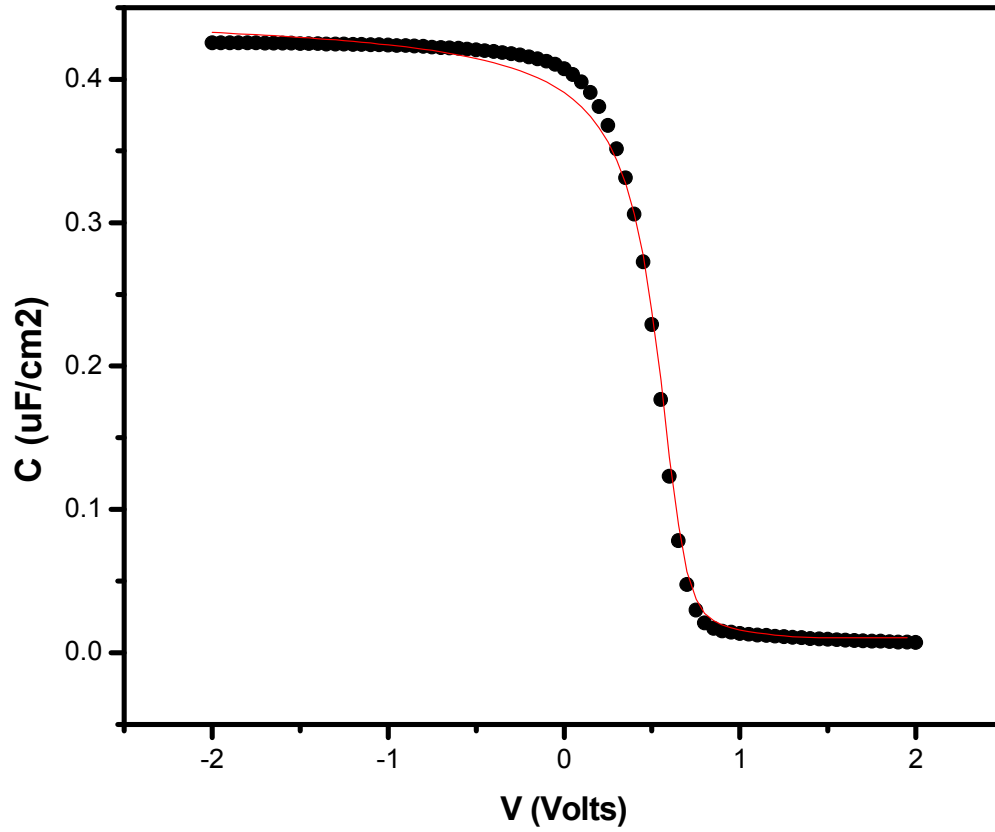
C_{ox} ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	N_a (cm^{-3})	V_{fb} (V)	D_{it} ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.5	10^{15}	0.74	$1 \cdot 10^{11}$	7.8

5.2.4. Δείγμα 1075 (Si) annealed, 1 MHz



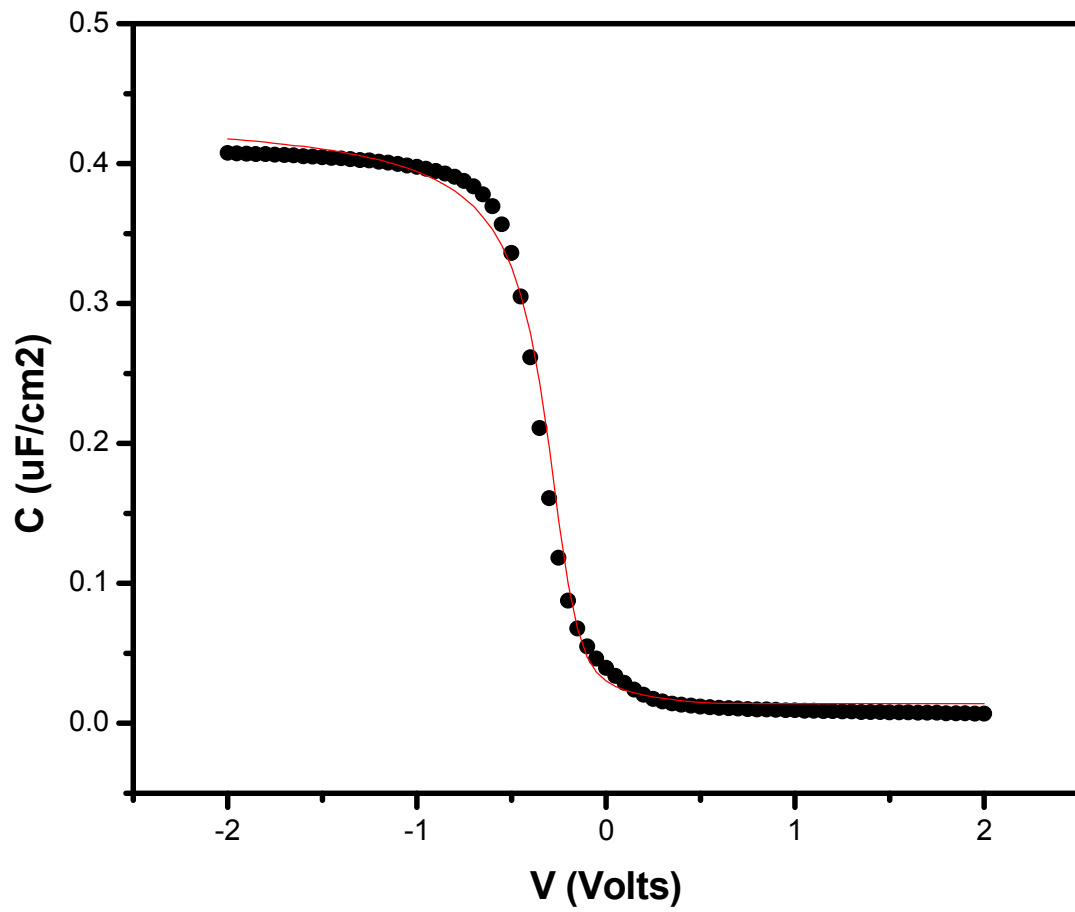
C_{ox} ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	N_a (cm^{-3})	V_{fb} (V)	D_{it} ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.49	10^{15}	0.1	$9 \cdot 10^{11}$	7.9

5.2.5. Δείγμα 1075 (Si) non-annealed, 1 MHz



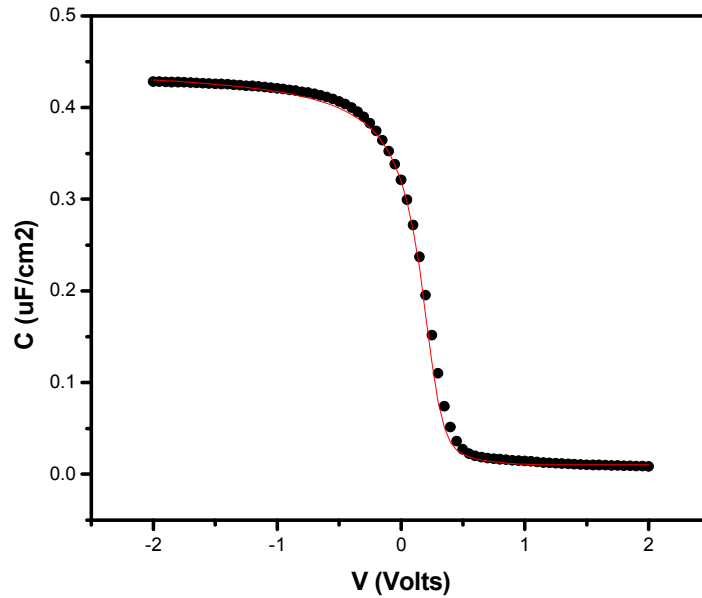
Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Na (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.53	10^{15}	0.69	$3 \cdot 10^{11}$	7.4

5.2.6. Δείγμα 1079 (Si) annealed, 1 MHz

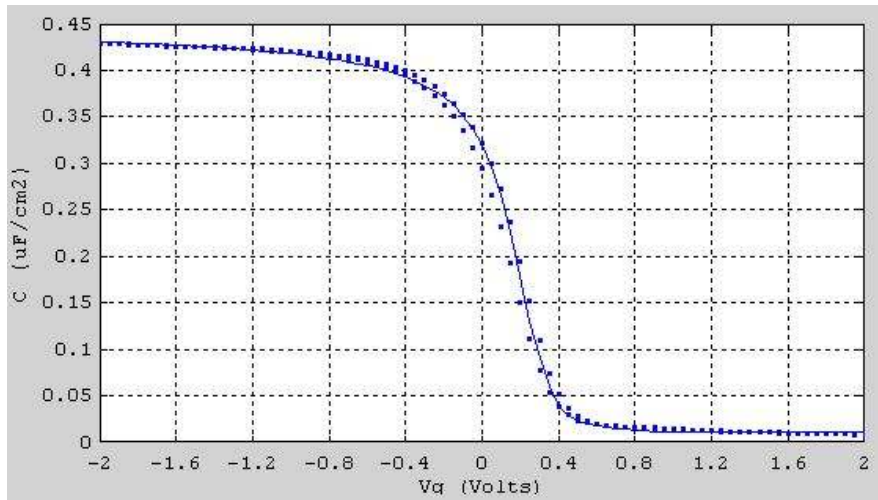


Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Na (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.52	$2 \cdot 10^{15}$	0.225	$8 \cdot 10^{11}$	7.5

5.2.7. Δείγμα 1079 (Si) non-annealed, 1 MHz

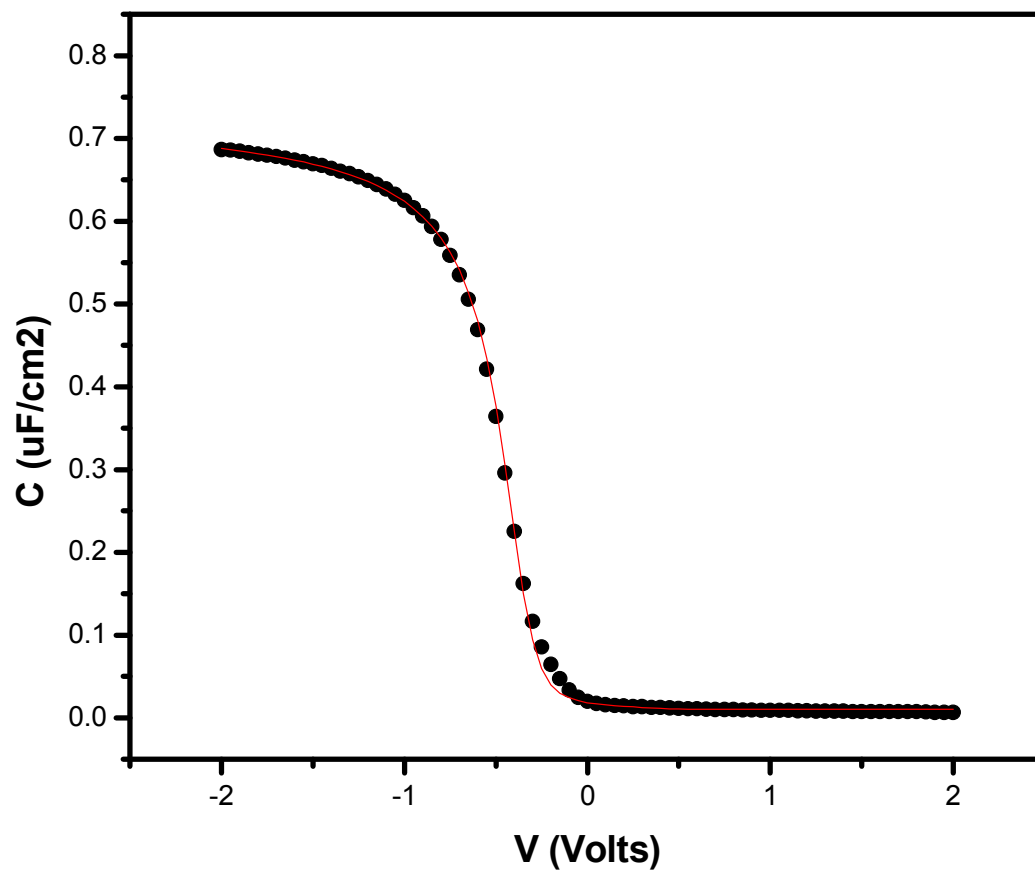


Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Na (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.53	10^{15}	0.3	$1 \cdot 10^{11}$	7.4



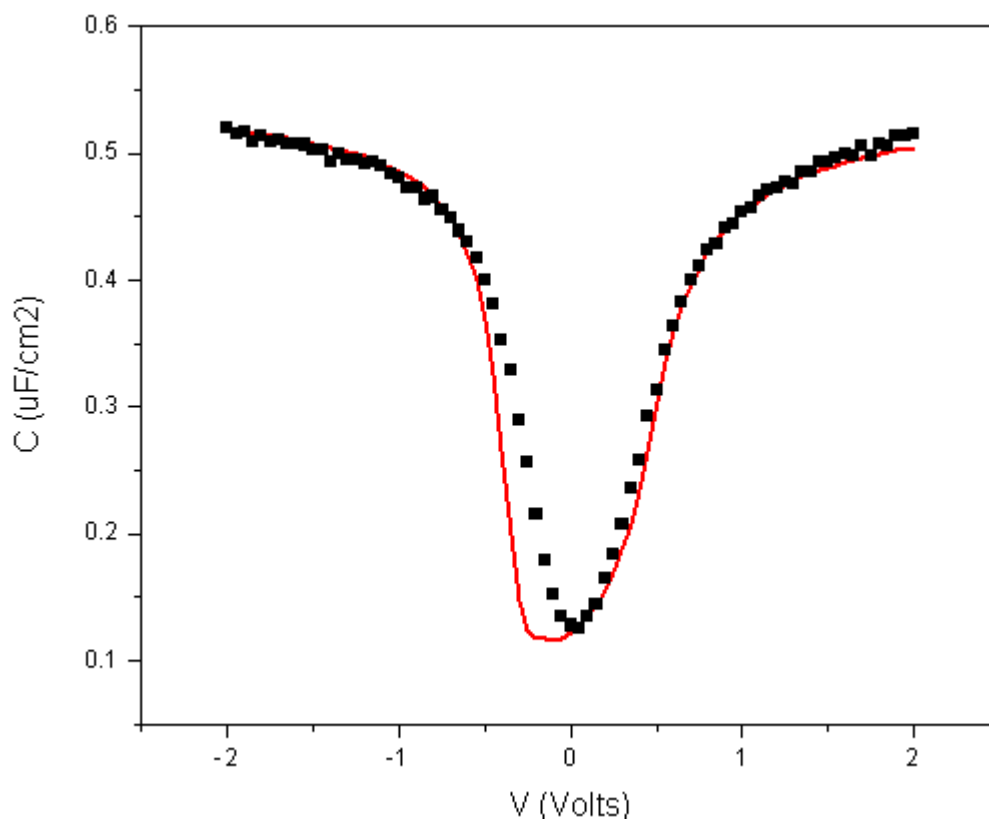
Και στην περίπτωση αυτή, η σύγκριση με μία από τις βέλτιστες προσαρμογές δεδομένων με χρήση του προγράμματος MIS-FIT [5.1] για το ίδιο δείγμα, αποδεικνύει την καλύτερη λειτουργία του κώδικα MOS-SIM.

5.2.8. Δείγμα 1079 (Si) annealed, 10 KHz



Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Na (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT
0.9	10^{15}	0.24	$2 \cdot 10^{12}$	4.4

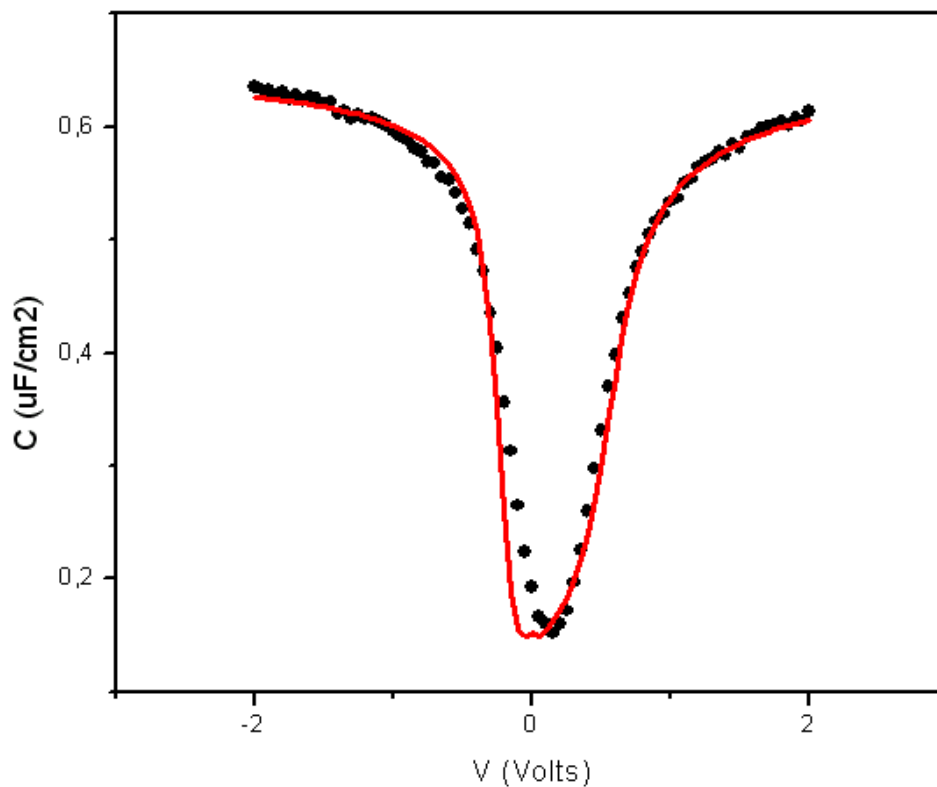
5.2.9. Δείγμα 869 (Ge) annealed, 20 Hz



C_{ox} ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	N_d (cm^{-3})	V_{fb} (V)	D_{it} ($\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$)	EOT (nm)
0.65	$5 \cdot 10^{16}$	0.45	10^{12}	5.9

Στη συγκεκριμένη περίπτωση παρουσιάζεται η προσαρμογή σε χαμηλές συχνότητες (20 Hz) η οποία αποτελεί και σημαντική διαφορά υπέρ του MOS-SIM σε σχέση με το MIS-FIT. Από το τελευταίο απουσίαζε εντελώς η δυνατότητα προσαρμογής σε καμπύλες χαμηλών συχνοτήτων. Ο τρόπος με τον οποίο έγινε δυνατή η προσαρμογή αυτή είναι με την υιοθέτηση του κβαντικού μοντέλου στη συσσώρευση και την αναστροφή και του κλασσικού μοντέλου στην περιοχή απογύμνωσης.

5.2.10. Δείγμα 871 (Ge) annealed, 20 Hz



Cox ($\mu\text{F}/\text{cm}^2$)	Nd (cm^{-3})	Vfb (V)	Dit ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)	EOT (nm)
0.8	10^{17}	0.5	10^{12}	4.9

Και στο δείγμα 871 παρουσιάζεται η προσαρμογή σε χαμηλές συχνότητες (20 Hz) η οποία αποτελεί και σημαντική διαφορά υπέρ του MOS-SIM σε σχέση με το MIS-FIT. Από το τελευταίο απουσίαζε εντελώς η δυνατότητα προσαρμογής σε καμπύλες χαμηλών συχνοτήτων. Ο τρόπος με τον οποίο έγινε δυνατή η προσαρμογή αυτή είναι και πάλι με την υιοθέτηση του κβαντικού μοντέλου στη συσσώρευση και την αναστροφή και του κλασσικού μοντέλου στην περιοχή απογύμνωσης.

5.3. Αναφορές

[5.1] G. Apostolopoulos, G. Vellianitis, A. Dimoulas, J. C. Hooker, and T. Conard, Appl. Phys.Lett., 84, 260, (2004).

[5.2] M. S. Rahman, E. K. Evangelou, A. Dimoulas, G. Mavrou, S. Galata, "Anomalous Charge Trapping and Detrapping Dynamics in Cerium Oxide grown on Germanium substrate" J. Appl. Phys., 103, 064514 (2008).

[5.3] D. K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York (1998).

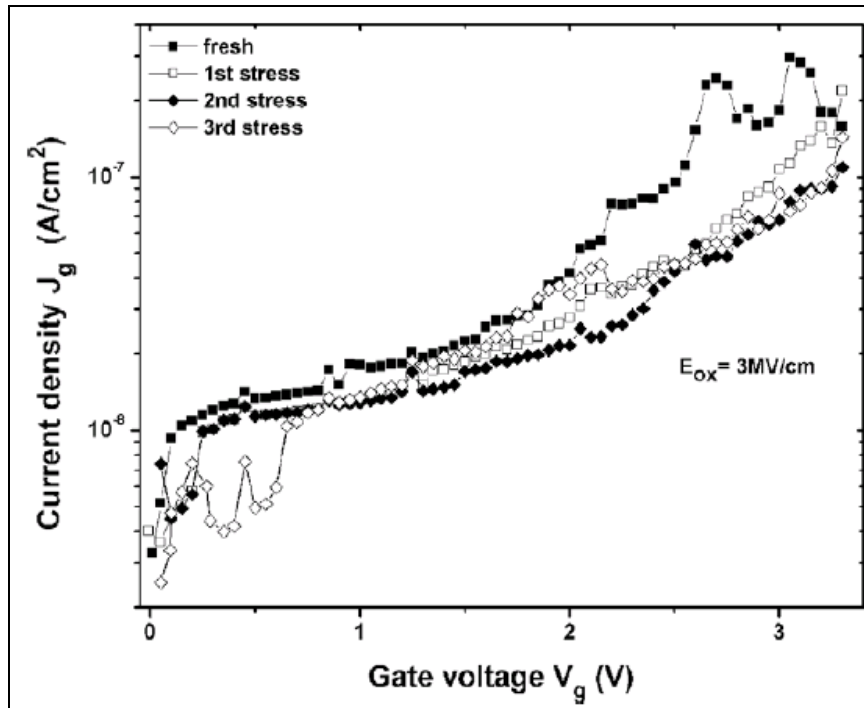
6. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

6.1. Εφαρμογές σε έρευνα

Η μεθοδολογία και το λογισμικό που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας διδακτορικής διατριβής, τόσο για την ελαχιστοποίηση και προσαρμογή των δεδομένων όσο και για την πρωτογενή λήψη τους στα πειράματα, χρησιμοποιήθηκαν για περαιτέρω έρευνα και ακαδημαϊκές εργασίες σύμφωνα με τα όσα περιγράφονται παρακάτω [6.1]-[6.12].

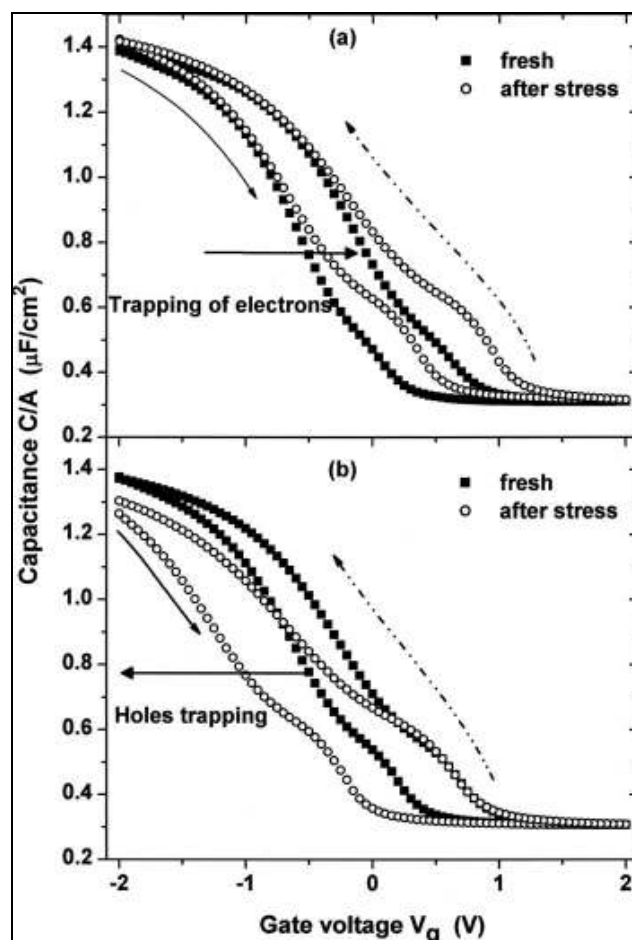
Πιο συγκεκριμένα, στην εργασία [6.1] μελετήθηκαν θέματα αξιοπιστίας Pt/HfO₂/Dy₂O₃/n-Ge MOS διατάξεων κάτω από διάφορες συνθήκες καταπόνησης. Βρέθηκαν πολύ καλά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά στους μικρο-πυκνωτές που οφείλονται πιθανώς στη δημιουργία του διεπιφανειακού επιπέδου οξειδίων σπάνιων γαιών (rare earth oxide interfacial layer). Το εγχυόμενο φορτίο (injected charge - Q_{inj}) σε υψηλές σταθερές τάσης καταπόνησης (CVS) παράγει ρεύμα διαρροής οφειλόμενο στην καταπόνηση (stress-induced leakage current-SILC) το οποίο υπακούει σε νόμο ισχύος (power-law). Παρατηρήθηκε επίσης συσχετισμός μεταξύ του παγιδευμένου φορτίου στο οξείδιο και του SILC: σε χαμηλά πεδία καταπόνησης παρουσιάζεται συσσώρευση φορτίου και όχι SILC ενώ σε υψηλότερα πεδία παρουσιάζεται SILC αλλά λίγα παγιδευμένα φορτία μόνο.

Με χρήση του λογισμικού που αναπτύχθηκε σε Labview και του Keithley 617, σε κάθε κύκλο καταπόνησης το δυναμικό της πύλης διακοπτόταν για λίγο προκειμένου να μετρηθεί η πυκνότητα ρεύματος σε σχέση με την τάση (J_g-V_g - Σχήμα 6.1) και η πυκνότητα ρεύματος σε σχέση με το χρόνο (J_g-t) ενώ παράλληλα λήφθηκαν και υψηλής συχνότητας (hf) καμπύλες χωρητικότητας-τάσης (C-V) οπότε και με χρήση του MOS-SIM υπολογίστηκε η μετατόπιση του δυναμικού flatband (DV_{fb}). Οι μετρήσεις C-V λήφθηκαν με το όργανο Agilent 4284A LCR meter. Αντίστοιχα, με τη βοήθεια του MOS-SIM υπολογίστηκε το φορτίο του παγιδευμένου φορτίου οξειδίου (Q_{ot}) από τη μετατόπιση του δυναμικού flatband.



Σχήμα 6.1: Τυπικές καμπύλες J_g - V_g πριν και μετά την καταπόνηση σε χαμηλό πεδίο

Στην εργασία [6.2] μελετήθηκαν φαινόμενα χαλάρωσης σε συνάρτηση με την τάση (voltage dependent relaxation effects) και τα χαρακτηριστικά της παγίδευσης φορτίων (charge trapping) σε διατάξεις MOS Pt/HfO₂/Dy₂O₃/p-Ge δομής. Οι διατάξεις υποβλήθηκαν σε καταπόνηση σταθερής τάσης (constant voltage stress) και επέδειξαν φαινόμενα χαλάρωσης (relaxation effects) σε όλη την περιοχή των εφαρμοζόμενων δυναμικών καταπόνησης (-1 V έως -5 V). Η παγίδευση φορτίου ήταν αμελητέα σε ασθενή πεδία καταπόνησης ενώ σε υψηλότερα πεδία (>4 MV/cm) ήταν σημαντική. Επίσης, ενδιαφέρον ήταν το γεγονός ότι το παγιδευμένο φορτίο ήταν αρνητικό σε μικρά πεδία και θετικό σε υψηλότερα



Σχήμα 6.2: Υψηλής συχνότητας C-V ($f = 100$ kHz) πριν και μετά την εφαρμογή 10 διαδοχικών CVS περιόδων των 500 δευτερολέπτων η κάθε μία στο δείγμα B (Pt-5 nm HfO/2nm Dy₂O₃/ p-Ge). Το δυναμικό καταπόνησης είναι μικρό στο (α) και μέτριο στο (β). Θετική μετατόπιση του V_{FB} στο α μαρτυρά την παγίδευση ηλεκτρονίων στα οξείδια ενώ η αρνητική μετατόπιση στο b, το αντίστροφο.

Οι τυπικές καμπύλες C-V του MOS πυκνωτή με τα συγκεκριμένα διηλεκτρικά πύλης (απεικονίζονται στο σχήμα 2) λήφθηκαν και αναλύθηκαν με τη βοήθεια του εξειδικευμένου λογισμικού. Η σάρωση ήταν από συγκέντρωση προς αναστροφή και αντίστροφα προκειμένου να μετρηθούν τα παγιδευμένα φορτία αμέσως μετά την παύση του παλμού καταπόνησης. Υπολογίζοντας τις κβαντομηχανικές διορθώσεις με τη βοήθεια του MOS-SIM προέκυψαν τιμές EOT 2.68 και 1.93 nm για τα δείγματα A και B. Επίσης, η υστέρηση της καμπύλης C-V ήταν αρκετά

μεγάλη, στα 400 mV στο μέσο του χάσματος (midgap) μαρτυρώντας μια μεγάλη πυκνότητα «αργών» παγίδων διεπιφάνειας ακόμα και σε συχνότητες των 100 kHz. Οι καμπύλες I-V έδειξαν πολύ μικρά ρεύματα διαρροής, 10 nAcm^2 στην τιμή τάσης VFB -1 V

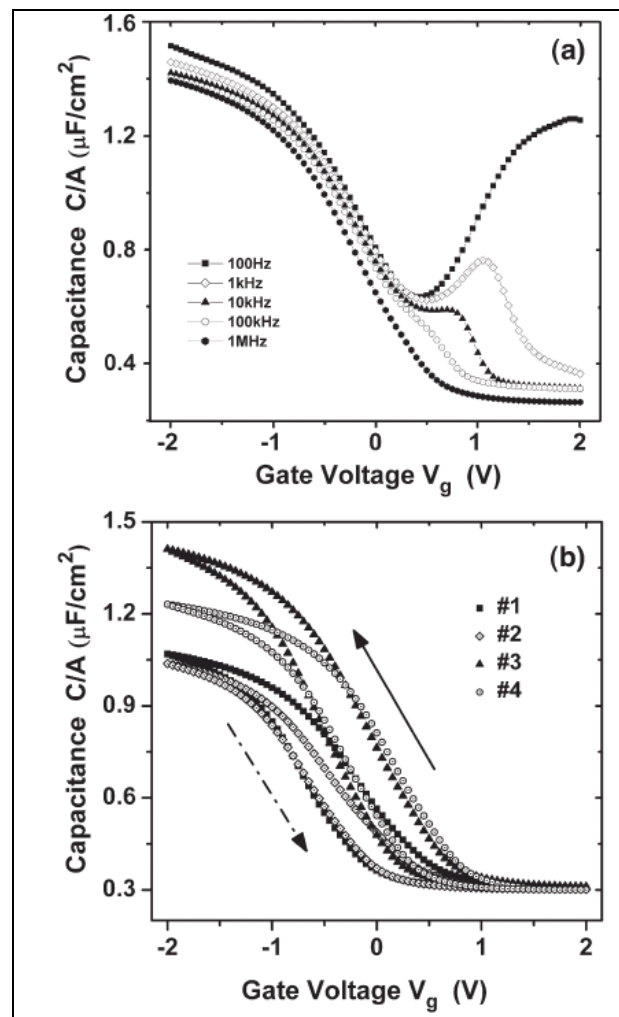
Ιδιαίτερα ενδιαφέρον από την ανάλυση της υψηλής συχνότητας C-V ήταν το γεγονός ότι όταν η τάση καταπόνησης ήταν χαμηλή τότε το παγιδευμένο φορτίο στο οξειδίο ήταν αρνητικό (θετική VFB μετατόπιση) ενώ σε μέτριες τιμές τάσης καταπόνησης η αρνητική μετατόπιση της C-V φανερώνει θετικά παγιδευμένα φορτία. Ίδια αποτελέσματα παρατηρήθηκαν και για μονό επίπεδο Dy_2O_3 .

Ακολούθως, στην εργασία [6.3] μελετήθηκαν οι μηχανισμοί μεταφοράς ρεύματος (current transport mechanism) διατάξεων μετάλλου-οξειδίου-ημιαγωγού μορφής $\text{Pt/CeO}_2/\text{p-Ge}$. Σε χαμηλά και μεσαία ηλεκτρικά πεδία (~ 0.1 έως 0.9 MV/cm) ο κύριος μηχανισμός αγωγής ρεύματος ήταν η εκπομπή Schottky ενώ σε ισχυρότερα πεδία (~ 1.2 έως 2.1 MV/cm) κυριαρχεί η αγωγιμότητα τύπου Poole–Frankel.

Με τη βοήθεια του MOS-SIM, η ενεργή διηλεκτρική σταθερά (effective dielectric constant) των πολυκρυσταλικών υμενίων CeO_2 υπολογίστηκε από τα χαρακτηριστικά της καμπύλης C-V υψηλής συχνότητας (100 KHz) στην τιμή 25.5 στη συσσώρευση. Επομένως το ισοδύναμο πάχος οξειδίου (equivalent oxide thickness) προσδιορίστηκε στα 16.2 \AA συνυπολογίζοντας και τα κβαντικά φαινόμενα. Σε θερμοκρασία δωματίου, η σχετική καμπύλη C-V υποδεικνύει την παρουσία “slow states” ενώ σε υψηλότερες θερμοκρασίες υπάρχει διασπορά στην απογύμνωση και την αναστροφή. Η τιμή του D_{it} στο μεσοδιάστημα (midgap) υπολογίστηκε από τις αντίστοιχες καμπύλες C-V στην τιμή $1 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ σε θερμοκρασία δωματίου

Τέλος, στην εργασία [6.4] μελετήθηκαν οι δομικές και ηλεκτρικές ιδιότητες διόδων MOS που συνδυάζουν στρώματα HfO_2 και Dy_2O_3 συνολικού πάχους περίπου 10nm. Ειδικότερα για τις μετρήσεις ηλεκτρικού χαρακτηρισμού σε δείγματα

Pt/HfO₂/Dy₂O₃/p-Ge MOS διόδων βρέθηκε η παρουσία μικρής-μέτριας πυκνότητας διεπιφανειακών ατελειών ($2\text{--}5 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$) και χαμηλό CET (1.9 nm) και πυκνότητα ρεύματος διαρροής περίπου 15 nA/cm₂ σε $V_g = V_{FB} - 1V$. Τα χαρακτηριστικά CET, Dit και η υστέρηση λήφθηκαν με τη βοήθεια των προγραμμάτων λήψης πειραματικών δεδομένων (Σχήμα 6.3) και αναλύθηκαν με τη βοήθεια του MOS-SIM.



Σχήμα 6.3: (a) Καμπύλη Χωρητικότητας-Τάσης (C-V_g) σε διαφορετικές συχνότητες (100 Hz έως 1 MHz). (b) Βρόχοι υστέρησης C-V_g κατά τη φορά σάρωσης από αναστροφή προς συσσώρευση και πίσω, στη συχνότητα του 1 MHz.

6.2. Αναφορές

- [6.1] M. S. Rahman, E. K. Evangelou, I. I. Androulidakis and A. Dimoulas, Study of stress-induced leakage current (SILC) in HfO₂/Dy₂O₃ high-κ gate stacks on Germanium, *Microelectronics Reliability*, 49 (2009), pp 26-31, Jan. 2009
- [6.2] M. S. Rahman, E. K. Evangelou, I. I. Androulidakis, A. Dimoulas, G. Mavrou, P. Tsipas, Investigation of voltage dependent relaxation, charge trapping and stress-induced leakage current (SILC) effects in HfO₂/Dy₂O₃ gate stacks grown on Ge(1 0 0) substrates. *The Journal of Vacuum Science and Technology B* 27(1), pp 439-442, Feb. 2009
- [6.3] M. S. Rahman, E. K. Evangelou, I. I. Androulidakis and A. Dimoulas, Current Transport Mechanism in High-k Cerium Oxide Gate Dielectrics Grown on Germanium Substrates, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 12 (5) pp H165-H168, Mar. 2009
- [6.4] E. K. Evangelou, M. S. Rahman, I. I. Androulidakis, A. Dimoulas, G. Mavrou, D. F. Anagnostopoulos, R. Valicu, G. L. Borchert, Structural and Electrical Properties of HfO₂ / Dy₂O₃ Gate Stacks on Ge Substrate, (υπό δημοσίευση στο *Thin Solid Films*)
- [6.5] M. S. Rahman, E. K. Ευαγγέλου, I. I. Ανδρουλιδάκης, Μετρήσεις αξιοπιστίας διατάξεων MOS ανεπτυγμένων πάνω σε Γερμάνιο. 22ο Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης & Επιστήμης Υλικών, Πάτρα 24-27/09/2006
- [6.6] E.K. Evangelou, I. Androulidakis, G. Papalambropoulos, M.S. Rahman, D. F. Anagnostopoulos and A. Dimoulas, Optimization of Electrical Characteristics of HfO₂/Dy₂O₃ Gate Stacks Grown on Germanium Substrates, Πρακτικά 24ου Πανελληνίου Συνεδρίου Φυσικής Στερεάς Κατάστασης & Επιστήμης Υλικών, σελ 191-192, Σεπτ. 2008
- [6.7] M. S. Rahman, E. K. Evangelou, I. I. Androulidakis, B. Katsifas, Interface State Dynamics and Reliability of MOS devices - Cerium Oxide based on

Germanium Substrate, 4th International Workshop on "Nanosciences & Nanotechnologies"(NN07), Thessaloniki-Greece, 16-18/7/2007

[6.8] M.S. Rahman, E.K. Evangelou, D.F. Anagnostopoulos, I. I. Androulidakis, G.L.Borchert and R.Valicu, Structural and Electrical properties of HfO₂ / Dy₂O₃ gate stacks on Ge(100) (αναρτημένη εργασία – poster). International Symposium on Metastable and Nano Materials, Corfu, 26-30/08/2007

[6.9] M.S. Rahman, E.K. Evangelou, I.I. Androulidakis, S. Galata, G. Mavrou, A. Dimoulas, and D.F. Anagnostopoulos, Reliability characteristics of rare earth oxides and their gate stacks on germanium substrate, 23ο Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης & Επιστήμης Υλικών, Αθήνα, 23-26/9/2007

[6.10] M.S. Rahman, E.K. Evangelou, I.I. Androulidakis, A. Dimoulas, G. Mavrou, P. Tsipas, Investigation of voltage dependent trap generation, charge trapping and stress induced leakage current (SILC) in high-κ HfO₂/Dy₂O₃ gate stacks on Ge (100) MOS devices, (Αναρτημένη εργασία – Poster), 15th Workshop on Dielectrics in Microelectronics, Bad Saarow, Germany, 23-25/06/2008.

[6.11] E.K. Evangelou, I. Androulidakis, G. Papalambropoulos, M.S. Rahman, D. F. Anagnostopoulos and A. Dimoulas, Optimization of Electrical Characteristics of HfO₂/Dy₂O₃ Gate Stacks Grown on Germanium Substrates, 24ο Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης & Επιστήμης Υλικών, Ηράκλειο, 21-24/9/2008

[6.12] I.I.Androulidakis, M.S.Rahman, E.K.Evangelou, A.Dimoulas, N.Konofaos, "Charge Trapping Detrapping Characteristics in Cerium Oxides grown on Germanium Substrates", 6th International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies-NN09, Thessaloniki, Greece, 13-15 July 2009

7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η Παρούσα Διατριβή εκπονήθηκε στα πλαίσια του υποέργου 155 του ΠΕΝΕΔ 2003 στο πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών στις Σύγχρονες Ηλεκτρονικές Τεχνολογίες του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Στόχος ήταν να γραφτεί κατάλληλος κώδικας ο οποίος θα υπολογίζει τις χαρακτηριστικές χωρητικότητας – τάσης (C-V) διατάξεων MOS, ανεπτυγμένων σε υποστρώματα Πυριτίου και Γερμανίου τα οποία χρησιμοποιούν high-k διηλεκτρικά πύλης. Τα σημαντικά προβλήματα που θέλαμε να επιλύσουμε ήταν η δυνατότητα ενσωμάτωσης προγράμματος ελαχιστοποίησης παραμέτρων με αυτόματο τρόπο καθώς επίσης και να προσθέσουμε στοιχεία για τον υπολογισμό των C-V τα οποία να λαμβάνουν υπόψη το φαινόμενο του stretch-out. Αυτό έγινε δυνατό με κώδικα αυτοσυνεπούς επίλυσης των εξισώσεων Schrödinger – Poisson και διασύνδεσή του με κατάλληλο κώδικα με το λογισμικό ελαχιστοποίησης Merlin. Αξίζει να σημειωθεί ότι αντίθετα με τη χρονοβόρα χειροκίνητη προσαρμογή δεδομένων (fitting) η ελαχιστοποίηση των παραμέτρων λαμβάνει χώρα πολύ γρήγορα χωρίς να είναι απαραίτητος ο υπερβολικός περιορισμός (constrain) των μεταβλητών.

8. ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΔΟΥΛΕΙΑ

Στα μελλοντικά σχέδια επέκτασης του κώδικα, περιλαμβάνεται και η δυνατότητα προσαρμογής δεδομένων G-V. Ως προς το προγραμματιστικό μέρος, μελλοντικά μπορεί να λάβει χώρα η συγχώνευση του κώδικα υλοποίησης του μοντέλου στο Merlin (με συγγραφή-μετάφραση του κώδικα σε γλώσσα Fortran) ώστε να εξαλειφθεί η ανάγκη κλήσεων συστήματος οι οποίες καθυστερούν σημαντικά την εκτέλεση. Στο ίδιο μήκος κύματος, και προκειμένου να εξασφαλισθεί η καλύτερη επικοινωνία Merlin και MOS-SIM, ο κώδικας του τελευταίου μπορεί να γραφεί με τη μορφή δυναμικών βιβλιοθηκών DLL οι οποίες θα καλούνται από τη Fortran.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1: ΚΩΔΙΚΑΣ VISUAL C++

Ο κώδικας του MOS-SIM περιέχεται σε χωριστό έντυπο παράρτημα λόγω της μεγάλης έκτασής του. Επίσης παρέχεται και σε ηλεκτρονική μορφή η οποία επιρέπει την καλύτερη κατανόηση της αντικειμενοστραφούς σχεδίασής του και της αλληλοσύνδεσης των λειτουργικών του μονάδων και υποπρογραμμάτων.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2: ΚΩΔΙΚΑΣ FORTRAN

```
C -----
      FUNCTION FUNMIN ( X, N )
C -----
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION X(N)

      CHARACTER*18 par0
      CHARACTER*30 par1
      CHARACTER*30 par2
      CHARACTER*30 par3
      CHARACTER*30 par4
      CHARACTER*30 par5
      CHARACTER*30 par6
      CHARACTER*30 par7
      CHARACTER*30 par7b
      CHARACTER*30 par8
      CHARACTER*300 command
      CHARACTER*300 c

      DIMENSION xexp(100),yexp(100),xi(100),yi(100)

      i=0
      open(10, file='expdata')
      do while(.not.eof(10))
      i=i+1
10      read(10,*) , xexp(i),yexp(i)
      enddo
      close(10)

      M=i
      write(*,*) xexp(1), xexp(M)
      par0='.\MOS-SIM.exe'

      write(par1,*) , xexp(1)
      write(par2,*) , xexp(M)
      write(par3,*) , X(1)
      write(par4,*) , X(2)
      write(par5,*) , X(3)
      write(par6,*) , X(4)
      write(par7,*) , X(5)
      write(par7b,*) , X(6)

      command=''
      par8='e3odos'

      c=par0//par1//par2//par3//par4//par5//par6//par7//par7b//'>'//par8
      command=c

      write (*,*) command
      call system(command)
      open (20,file=par8)
      fun=0
      do 20 i=1,M
          read(20,*) xi(i),yi(i)
          fun=fun+(yi(i)-yexp(i))**2
20      write(*,*) ,yi(i),yexp(i), (yi(i)-yexp(i))**2, fun
          continue
      close(20)

      FUNMIN=fun

      write(*,*) fun
      END
```


ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 3: ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ LABVIEW

Στις παρακάτω λήψεις οθόνης (screenshots) απεικονίζονται ορισμένες από τις διεπαφές των προγραμμάτων σε Labview τα οποία χρησιμοποιήθηκαν για τον έλεγχο των οργάνων προκειμένου να γίνει η λήψη των πειραματικών δεδομένων, τόσο για μετρήσεις C-V όσο και για μετρήσεις I-V.

