

UNIVERSITÄT DER BUNDESWEHR MÜNCHEN

Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik

Charakterisierung und Modellierung der
Leckstrommechanismen in modernen
DRAM high-k Materialien

Oliver Blank

Vorsitzender des Prüfungsausschusses: Prof. Dr.-Ing. H. Baumgärtner

1. Berichterstatter: Prof. Dr.rer.nat. I. Eisele

2. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. J. Schulze

Tag der Prüfung 24.03.2006

Mit der Promotion erlangter akademischer Grad:

Doktor-Ingenieur

(Dr.-Ing.)

Neubiberg, den 18. April 2006

Inhaltsverzeichnis

ZUSAMMENFASSUNG	iii
1 EINLEITUNG.....	1
2 BEKANNTE LECKSTROMMECHANISMEN IN ISOLATOREN.....	3
2.1 Leckströme in perfekten Isolatoren	3
2.1.1 Tunnelströme.....	4
2.1.1.1 Leckstromrelevante Ladungsträger	4
2.1.1.2 Banddiagramm einer E/I/E-Struktur.....	7
2.1.1.3 Transmissionskoeffizient.....	9
2.1.1.4 Analytische Behandlung von Tunnelströmen	10
2.1.1.4.1 Direktes Tunneln (DT)	11
2.1.1.4.2 Fowler-Nordheim-Tunneln (FNT)	12
2.1.1.5 Numerische Behandlung von Tunnelströmen	13
2.1.2 Thermisch aktivierte Ströme: Schottky-Emission	14
2.2 Leckströme in Isolatoren mit Defekten	16
2.2.1 Defektunterstütztes Tunneln	17
2.2.2 Thermisch aktivierte Prozesse: Poole-Frenkel-Emission.....	19
2.2.3 Vergleich von defektunterstütztem Tunneln und Poole-Frenkel-Emission	21
2.3 Zeitabhängige Effekte.....	26
2.3.1 Dielektrische Relaxation	26
2.3.2 Trapping Effekte	27
3 NEUES LECKSTROMMODELL.....	32
3.1 Multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT): Gleichmäßiger Trapabstand.....	32
3.2 Statistisch verteilter Trapabstand.....	34
3.3 Multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT): Vergleich von gleichmäßiger und statistischer Trapverteilung	39
4 MESSTECHNIK	42
5 MESSERGEBNISSE UND SIMULATION	44
5.1 Aluminiumoxid (Al₂O₃)	44
5.1.1 Chemical vapor deposition (CVD)-Al ₂ O ₃	44
5.1.1.1 Physikalische Untersuchungen	44
5.1.1.2 J(V)-Charakteristik der Proben mit Al-Elektrode.....	47

5.1.1.3	Diskussion der verwendeten Parameter	49
5.1.1.4	Temperaturabhängigkeit des Leckstromes	50
5.1.1.5	Elektrodenabhängigkeit	52
5.1.1.6	Zuverlässigkeitsuntersuchung	53
5.1.1.7	Zusammenfassung CVD-Al ₂ O ₃	56
5.1.2	Atomic layer deposition (ALD)-Al ₂ O ₃	57
5.1.2.1	n ⁺ -poly Silizium-Elektrode	57
5.1.2.2	Poole-Frenkel (PF)-Fit der berechneten Tunneldaten	62
5.1.2.3	Titannitrid (TiN)-Elektrode	65
5.1.3	Durchbruchmodell von Al ₂ O ₃	67
5.2	Tantalpentoxid (Ta₂O₅)	72
5.3	Praseodymoxid (Pr₂O₃)	75
5.4	Siliziumdioxid (SiO₂)	76
6	AUSBLICK	80
	ANHANG	82
	A1 Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	82
	A2 Abbildungsverzeichnis	86
	A3 Literaturverzeichnis	91

Zusammenfassung

Um bei einer Reduzierung der Flächen von DRAM-Kondensatoren und der Betriebsspannung die Kapazität erhalten zu können, kann die Isolatorschichtdicke nur so weit reduziert werden, bis der direkte Tunnelstrom durch den Isolator zu einem zu großen Ladungsverlust und/oder einer unzureichenden Zuverlässigkeit des DRAMs führt. Durch Verwendung von high-k Dielektrika mit einer Dielektrizitätskonstanten $\epsilon(\text{high-k})$ kann die Schichtdicke $d(\text{high-k})$ im Vergleich zur Schichtdicke von dem bisher verwendeten Si_3N_4 um das Verhältnis $d(\text{high-k}) = d(\text{Si}_3\text{N}_4) \epsilon(\text{high-k}) / \epsilon(\text{Si}_3\text{N}_4)$ bei gleich bleibender spezifischer Kapazität vergrößert werden (bei Vernachlässigung von Grenzflächeneffekten wie dem Einfluss dünner SiO_2 -Schichten an der Grenzfläche). Dadurch wird der direkte Tunnelstrom reduziert. Allerdings treten bei den hier untersuchten high-k Materialien andere, leckstromerhöhende Probleme, wie kleinere Bandlücke bzw. Potentialbarriere, kleinere effektive Elektronenmassen und Traps in der Bandlücke, auf.

Die Bestimmung von Potentialbarriere und effektiver Elektronenmasse mit Hilfe des temperatur- und/oder dickenabhängigen Leckstromverhaltens kann für Isolatoren, in denen keine Traps existieren, durch Anwendung bekannter Leckstrommodelle wie Fowler-Nordheim Tunneln und Direktes Tunneln erfolgen. Für den Leckstrom durch Isolatoren mit Traps in der Bandlücke existieren nur Modelle, die den Leckstrom unzureichend – über wenige Größenordnungen und/oder mit zu vielen Fitparametern – beschreiben. Sowohl bei Leckstromsimulationen über wenige (<4) Größenordnungen als auch bei Verwendung von Leckstrommodellen mit zu vielen Fitparametern ist der Fit nicht eindeutig, da entweder verschiedene Parameter oder verschiedene Leckstrommodelle dieselbe $J(V)$ -Charakteristik beschreiben können. Die hohen Anforderungen, die dadurch für die Messtechnik und für das Leckstrommodell gestellt werden, wurden im Rahmen dieser Arbeit aufgezeigt und gelöst.

Ein neues Leckstrommodell (multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT) Modell), welches auf alle traphaltigen Isolatoren anwendbar ist, wurde eingeführt. Das Modell wird durch die nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment über 12 Größenordnungen im Strom in mehreren Isolatoren ($\text{CVD-Al}_2\text{O}_3$, Ta_2O_5 und SiO_2) bestätigt. Dies ist der weiteste Bereich, der für Leckstrommessungen bzw. Leckstromsimulationen bisher veröffentlicht wurde. Darüber hinaus wird sogar ein Parameter weniger als bei den anderen TAT-Modellen benötigt! Um das dennoch große Parameterfeld zu bestimmen, wurden die Leckströme (von $\text{CVD-Al}_2\text{O}_3$) sowohl für verschiedene Temperaturen als auch für verschiedene Isolatorschichtdicken und verschiedenen Materialien der emittierenden Elektrode gemessen, und mit ein und denselben Parametern mit Hilfe des MSTAT-Modells berechnet.

Bei den bisher bekannten trap-assisted-tunneling (TAT) Modellen werden immer nur 2-Step Prozesse betrachtet. Der bei hohen Trapkonzentrationen sehr große Fehler (Faktor $>10^6$, Vergleich Kapitel 3.3), der in diesen TAT-Modellen durch die Vernachlässigung von Tunnelprozessen zwischen den Traps gemacht wird, wird im MSTAT-Modell, bei dem auch mehrere Steps berücksichtigt werden, vermieden.

Außerdem wurde der Einfluss der räumlichen Verteilung der Traps auf den Leckstrom untersucht. Da die tatsächliche räumliche Verteilung der Traps im Allgemeinen nicht bekannt ist, ist es absolut notwendig, den Einfluss der örtlichen Verteilung der Traps auf das Leckstromverhalten zu untersuchen. Die Stromdichte J_{MSTAT} durch einen Isolator, in dem alle Trapabstände konstant sind, wurde mit der Stromdichte J_{MSTATr} durch denselben Isolator mit statistisch angeordneten Traps verglichen. Um letzteren zu berechnen, wurden alle möglichen Übergänge des Ladungsträgers berücksichtigt. Damit der damit verbundene Rechenaufwand bewältigt werden konnte, wurde nur ein kleines Teilvolumen des Isolators betrachtet. Der daraus resultierende Leckstrom wurde mit Hilfe grundlegender Statistik auf das ganze Volumen des Isolators extrapoliert. Die Stromdichten J_{MSTAT} und J_{MSTATr} wurden für die in Kapitel 5.1.1 vorgestellte CVD- Al_2O_3 -Isolatorschicht zwischen zwei Al-Elektroden für verschiedene elektrische Felder als Funktion der Trapkonzentration zwischen $10^{17}\text{cm}^{-3} < N_T < 10^{22}\text{cm}^{-3}$ berechnet. Die gute Übereinstimmung beider Stromdichten zeigt, dass die Annahme konstanter Trapabstände eine gute Näherung ist.

Das MSTAT-Modell wurde erfolgreich auf Al/CVD- Al_2O_3 /p-Si- (Kapitel 5.1.1), Nb/ SiO_2 /p-Si- (Kapitel 5.4) und Ru/ Ta_2O_5 /Ru- (Kapitel 5.2) Strukturen angewandt, was die erfolgreiche Anwendbarkeit des MSTAT-Modell auf alle Isolatoren mit Traps in der Bandlücke bestätigt.

Durch Ersetzen von hochdotiertem poly-Si als Elektroden von DRAM-Kondensatoren mit Metallen, die temperaturstabil bis 1050°C sind (entspricht der höchsten Temperatur im DRAM-Prozess), kann ein Kapazitätsgewinn erreicht werden, da im Metall im Gegensatz zum poly-Si keine Spannung abfällt (elektrisches Feld im Isolator wird erhöht). Deswegen und wegen den niedrigeren Widerständen von Metallen gegenüber poly-Si, werden geeignete Metalle für den Einsatz als Elektroden in DRAM-Kondensatoren erforscht. Ein weiterer Vorteil von Metallelektroden ist, dass sich kein kapazitätsminderndes SiO_2 zwischen Elektrode und high-k sich bildet, was bei poly-Si der Fall ist (Vergleich Kapitel 5.1.2.1). Der Einfluss von TiN in TiN/ALD- Al_2O_3 / Si_3N_4 /n-Si-Strukturen und von Nb in Nb/ SiO_2 /p-Si-Strukturen auf das Leckstromverhalten wurde untersucht und mit dem Leckstrom, der bei Verwendung von n^+ -poly Si anstatt TiN und von Al anstatt Nb resultiert, verglichen. Sowohl in den Proben mit n^+ -poly Si als auch in den Proben mit Al ist der dominante Leitungsmechanismus der quantenmechanische Tunneleffekt ohne Annahme von Traps in der Bandlücke des Isolators. Bei Verwendung von TiN und Nb erhält man in beiden Fällen einen erhöhten Leckstrom. Leckstromsimulationen zeigen, dass im Fall von TiN die Potentialbarriere und die effektive Elektronenmasse im Al_2O_3 gegenüber den Proben mit n^+ -poly-Si Elektroden reduziert wird (Kapitel 5.1.2.3). Im Fall von Nb werden Traps in der Bandlücke von SiO_2 generiert, was durch erfolgreiches Anwenden des MSTAT-Modells auf die gemessenen Leckstromdaten folgt (Kapitel 5.4).

Auch Ru könnte ein geeignetes temperaturstabiles Metall für den Einsatz in DRAM-Kondensatoren sein. Die gemessenen $J(V)$ -Daten von Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Proben mit unterschiedlichen Ta_2O_5 -Schichtdicken stimmen mit dem berechneten MSTAT-Strom (Modell modifiziert, indem die Traps durch Coulombpotentiale beschrieben werden) über 10 Größenordnungen im Leckstrom nahezu perfekt überein (Kapitel 5.2).

Die Temperaturabhängigkeit des Leckstromes in high-k Materialien wurde gemessen und modelliert. Selbst bei relativ großer Temperaturabhängigkeit ($J(400\text{K})/J(300\text{K}) > 10$) erhält man als dominanten Leitungsmechanismus den quantenmechanischen Tunneleffekt. Dies wurde an n^+ -poly Si/SiO_x/ALD-Al₂O₃/Si₃N₄/n-Si-Strukturen mit verschiedenen Al₂O₃-Schichtdicken verifiziert.

Den in der Literatur häufig angenommenen Poole-Frenkel (PF) Effekt, mit dem man starke Temperaturabhängigkeiten im Leckstrom erhält, wurde als dominanter Leitungsmechanismus in dünnen high-k Isolatoren ausgeschlossen. Zunächst konnte durch scheinbar erfolgreiches Anfitzen von berechneten Tunnelströmen gezeigt werden, dass der PF-Effekt temperaturabhängige $J(V)$ -Daten falsch interpretiert (Kapitel 5.1.2.2). Hier ist noch zu beachten, dass die in der Literatur aufgeführten PF-Fits nur über 3 bis 4 Größenordnungen im Leckstrom realisiert sind. Leckströme über 3 oder 4 Größenordnungen können offensichtlich mit verschiedenen Modellen beschrieben werden oder durch verschiedene Fitparameter, was alle bisher durchgeführten PF-Fits in Frage stellt. Im Gegensatz hierzu beschreibt der quantenmechanische Tunneleffekt den Leckstrom über den gesamten Messbereich (bei den ALD-Al₂O₃ Proben sind das 8 Größenordnungen).

Zum tieferen Verständnis der Leckstrommechanismen in high-k Isolatoren wurden die konkurrierenden Prozesse – Tunneln und thermische Emission aus einem Trap – verglichen (Kapitel 2.2.3). Hierzu wurden die Emissionsraten hergeleitet und für zwei verschiedene Isolatoren (Al₂O₃ und Si₃N₄) als Funktion des elektrischen Feldes berechnet. Die relevanten Parameter wie Traptiefe und dynamische Dielektrizitätskonstante wurden aus [6] und [9] übernommen. In beiden Fällen dominiert die Emission durch den Tunneleffekt deutlich gegenüber der thermischen (PF-) Emission. Damit ist bewiesen, dass der PF-Effekt irrelevant für das Leckstromverhalten dünner Isolatoren ist.

Des Weiteren wurde ein Durchbruchmodell in Al₂O₃ vorgestellt, welches das experimentelle Durchbruchverhalten hinsichtlich des Zusammenhangs von Durchbruchzeit und Stromdichte widerspiegelt (Kapitel 5.1.3). Im Gegensatz zum Zusammenhang $t_{BD} \sim J^{-1}$, welcher bei SiO₂ experimentell beobachtet wird und durch einen Ein-Elektron-Schädigungsmechanismus (jedes einzelne Elektron trägt zur Schädigung bei) erklärt werden kann, erhält man experimentell bei Al₂O₃ folgenden Zusammenhang: $t_{BD} \sim J^{2.3}$. Ein Zusammenhang $t_{BD} \sim J^2$ kann durch einen Mechanismus, bei dem die Schädigung durch zwei Elektronen, die gleichzeitig in einem angeregten Zustand sind, beschrieben werden. Für die Zustände kommen die in Al₂O₃ intrinsischen Farbzentren (O-Fehlstellen) in Frage. Über Ratengleichungen wurde die Funktion $t_{BD}(J)$ hergeleitet und der Zusammenhang $t_{BD} \sim J^2$ bestätigt. Abschätzungen der Durchbruchzeit mit Hilfe der hergeleiteten Funktion $t_{BD}(J)$ liefern realistische Werte, welche dem Experiment näherungsweise entsprechen.

1 Einleitung

Um Halbleiterbauelemente wie „dynamic random access memories“ (DRAM's) kostengünstiger herstellen zu können, wird die Siliziumfläche pro Bauelement reduziert. Beim DRAM werden sowohl der Transistor und die elektrischen Leitungen als auch der DRAM-Kondensator „geshrinkt“. Die folgende Diskussion bezieht sich auf den DRAM-Kondensator.

Bei der Reduzierung der Siliziumfläche pro DRAM-Kondensator und der Betriebsspannung wird die Kapazität

$$C = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{A}{d} \quad [1-1]$$

konstant gehalten. Dies wurde bei vergangenen DRAM Generationen durch Verkleinerung der Isolatorschichtdicke (Si_3N_4 mit $\epsilon_r=7.5$) d realisiert. Dadurch bleibt sowohl die Ladungsdichte (auf den Kondensatorplatten, Vergleich Gleichung [1-1]) als auch das elektrische Feld (im Isolator, Vergleich $F=V/d$) von DRAM-Generation zu DRAM-Generation konstant.

Die Isolatorschichtdicken erreichen nun allerdings Werte, bei denen der direkte Tunnelstrom der begrenzende Faktor für die Entladung des Speicherkondensators und damit für die Datenhaltungszeit ist. In **Abbildung 1-1** ist das Schaltbild einer DRAM-Speicherzelle dargestellt. Ein Zellenfeld wird durch eine Matrix aus sogenannten Wort- und Bitleitungen gebildet. Jede Speicherzelle sitzt an der Kreuzung einer Wort- und Bitleitung. Zum Schreiben, Lesen und refreshen wird der Speicherkondensator über den durch die Wortleitung angesteuerten Auswahltransistor mit der Bitleitung verbunden. Wegen dem durch Leckströme verursachten Ladungsverlust wird die Ladung in periodischen Zeitintervallen mit dem „Refresh-Vorgang“ erneuert.

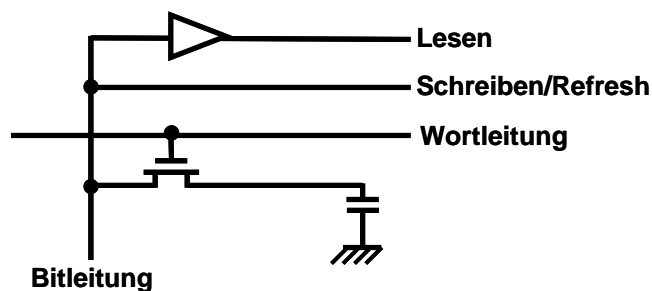


Abbildung 1-1: Schematische Darstellung des Schaltbildes einer DRAM-Speicherzelle

Neben der Verkleinerung der Isolatorschichtdicke (was bei den kommenden DRAM-Generationen zum erhöhten direkten Tunnelstrom führt) kann man gemäß Gleichung [1-1] bei Flächenreduktion die Kapazität erhalten, indem andere Isolatoren mit höherer Dielektrizitätskonstante ϵ_r – so genannte high-k Materialien – eingesetzt werden. Als weitere Möglichkeit das Verhältnis DRAM-Kondensator/Waferfläche zu erhöhen wird der Speicherkondensator in DRAMS durchwegs in die 3. Dimension gefaltet.

1 Einleitung

Man nützt die 3.Dimension und legt die Kondensatorflächen senkrecht zur Siliziumoberfläche – entweder in die Tiefe bzw. in das Si-Substrat (Trench-Zelle von Infineon patentiert und realisiert) oder in die Höhe (Stack-Zelle von Samsung patentiert und realisiert). Dadurch wird die aktive Fläche im Vergleich zur benutzten Siliziumfläche deutlich erhöht. Die durch Plasmaätzen entstehenden Trenchkondensatoren erreichen ein Aspektverhältnis von 70. Im Gegensatz zur DRAM-Prozessierung mit dem Trenchkonzept, bei welchem der Isolator des DRAM-Kondensators am Prozessbeginn vor der Aktivierung von dotierten Gebieten (bei 1050°C) abgeschieden wird, erfolgt die Isolatorabscheidung im Stackkonzept erst nach dem letzten Hochtemperaturprozess. Die Isolatoren im Trench haben also die Einschränkung der Belastbarkeit bei hohen Temperaturen. Dadurch sind Isolatoren wie Ta₂O₅, welche bei hohen Temperaturen ihre isolierenden Eigenschaften verlieren, für den Einsatz im Trench nicht geeignet. Bei der Auswahl geeigneter high-k Isolatoren für das Trenchkonzept muss der Einfluss hoher Temperaturen auf den Isolator stets berücksichtigt werden.

Ziel dieser Arbeit ist das physikalische Verständnis des Ladungstransportes in high-k Dielektrika. Die Leckstrommechanismen durch nahezu defektfreie Isolatoren wie thermisches SiO₂ sind genau untersucht und verstanden. Ganz anders ist es bei den high-k Dielektrika, deren Leckstrom im Allgemeinen durch Defekte in der Bandlücke hervorgerufen wird. Dieser defektunterstützte Leckstrom ist bisher kaum untersucht bzw. verstanden. Dieses Verständnis ist jedoch notwendig für die Optimierung der Herstellungsprozesse und erlaubt nach Einführung eines geeigneten Leckstrommodells die Bestimmung von leckstromrelevanten Parametern. Das Modell und die Kenntnis der Parameter erlauben eine Vorhersage der Leckströme von Proben und reduzieren den Aufwand für die Probenherstellung und damit Zeit und Kosten.

Um ein physikalisches Leckstrommodell anhand von experimentellen Daten verifizieren zu können, ist eine umfassende elektrische Charakterisierung der Isolatoren erforderlich. Im Vergleich zu bisherigen Arbeiten wird deshalb der Messbereich für temperaturabhängige Strom-Spannungs-Kennlinien deutlich erweitert (Kapitel 4). Darüber hinaus werden die $I(V)$ -Kennlinien für verschiedenen Isolatorschichtdicken und Elektrodenmaterialien gemessen, wodurch die eindeutige Modellierung aufgrund der Vielzahl an unbekanntem Parametern erst ermöglicht wird.

Es wird ein neues Leckstrommodell eingeführt (Kapitel 3), mit dem optimale Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht wird (Kapitel 5.1.1, 5.2 und 5.4). Hier wird unter anderem der Einfluss der räumlichen Trapverteilung auf den Leckstrom untersucht, was bisher zum ersten Mal gelungen ist (Kapitel 3.3). Die bereits vorhandenen Beschreibungsmöglichkeiten der Leckströme durch dünne Isolatoren werden in kompakter Weise dargestellt (Kapitel 2). Ein seit 1938 scheinbar erfolgreich benutztes Leckstrommodell (Poole-Frenkel Emission) wird kritisch diskutiert und schließlich als Leckstrommechanismus in dünnen Isolatoren ausgeschlossen (Kapitel 2.2.3 und 5.1.2). Darüber hinaus wird das experimentell beobachtete Durchbruchverhalten von Aluminiumoxid physikalisch erklärt (Kapitel 5.1.3). Folgende Isolatoren wurden hinsichtlich ihrer Leckstromeigenschaften charakterisiert: Al₂O₃, Ta₂O₅, Pr₂O₃ und SiO₂. Auch der Einfluss verschiedener Elektrodenmaterialien (durch Vergleich mit einer poly-Si- bzw. Al-Elektrode) auf das Leckstromverhalten (TiN/Al₂O₃ in Kapitel 5.1.2.3, Nb/SiO₂ in Kapitel 5.4) wurde untersucht.

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Die bisher bekannten Leckstrommechanismen werden in diesem Kapitel vorgestellt. In Isolatoren ohne Defekte sind die Modelle schon lange bekannt, allgemein anerkannt und experimentell bestätigt. Die Leckstrommechanismen in Isolatoren, in denen genügend Defekte existieren, so dass der durch sie hervorgerufene Leckstrom dominiert, sind nicht vollständig verstanden und untersucht. Auf diesem Gebiet existieren bereits viele zum Teil empirische Ansätze, die allerdings die Experimente nur bedingt beschreiben.

Der Leckstrom in dünnen Isolatoren kommt ganz allgemein entweder durch den quantenmechanischen Tunneleffekt oder durch einen thermisch aktivierten Prozess zustande.

Der Tunneleffekt beschreibt den Übergang von Teilchen durch ein klassisch verbotenes Gebiet. Das Teilchen ist in unserem Fall ein Ladungsträger (Elektron oder Loch), welcher von einer Elektrode durch einen Isolator in die andere Elektrode tunnelt. Dieser Prozess hängt von der energetischen Verteilung der Ladungsträger in beiden Elektroden und dem Transmissionskoeffizienten ab. Der Transmissionskoeffizient selbst hängt von der Energie der Leitungsbandkante (für Elektronenleitung) bzw. der Valenzbandkante (für Löcherleitung) des Isolators relativ zu den Fermienergien der Elektroden, welche durch das elektrische Feld im Isolator beeinflusst werden, von der effektiven Masse des Ladungsträgers im Isolator (effektive Massennäherung) und von vorhandenen Traps im Isolator ab. Die energetische Verteilung der Ladungsträger kann durch das Produkt der Fermi-Dirac-Verteilung und der Zustandsdichte der Ladungsträger beschrieben werden, solange das untersuchte System nur Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ (Fermionen) besitzt und im thermischen Gleichgewicht ist.

Der Transmissionskoeffizient kann durch Lösen der Schrödinger-Gleichung exakt bestimmt werden. Es existieren mehrere Methoden, um den Transmissionskoeffizienten mit Hilfe von Näherungen zu berechnen. Dazu gehören die Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) Näherung, die Gundlach Methode, die Transfer-Matrix Methode und die Quantum Transmitting Boundary Methode. Diese verschiedenen Näherungen wurden in [1] verglichen. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich die WKB-Näherung verwendet, da der durch die WKB-Näherung verursachte Fehler weitaus kleiner ist als der, welcher durch die unbekannt Parameter verursacht wird.

Thermisch aktivierte Prozesse sind Prozesse, bei denen ein Ladungsträger infolge seiner thermischen Energie klassisch eine Potentialbarriere überwindet. Hierzu verwendet man die klassische Maxwell-Boltzmann-Verteilung.

2.1 Leckströme in perfekten Isolatoren

Ein Isolator ist bezüglich des Leckstroms perfekt, wenn der durch Defekte (Elektronenzustände in der Bandlücke des Isolators) verursachte Leckstrom vernachlässigbar ist. Die Tunnelströme und die thermisch aktivierten Ströme werden im Folgendem eigenständig und in möglichst kompakter Form - auch für Schichtsysteme

bestehend aus N Isolatoren - hergeleitet. Dieses Kapitel gibt einen Gesamtüberblick mit vollständigen Herleitungen über Leckstrommechanismen und enthält zum Teil neue und kürzere Herleitungen im Vergleich zu anderen Veröffentlichungen. Die hier vorgestellten Grundlagen sind essentiell für das Verständnis des Ladungstransports in Isolatoren, insbesondere für das Verständnis des neuen Leckstrommodells, welches in Kapitel 3 vorgestellt wird.

2.1.1 Tunnelströme

Die Tunnelstromdichte erhält man, wenn man die Anzahl der Ladungsträger (in der emittierenden Elektrode), welche pro Sekunde und pro Einheitsfläche auf die Barriere treffen $N(E)$, mit der Elementarladung e und dem Transmissionskoeffizient $D(E)$ multipliziert und über die Energie integriert:

$$J = e \int_{E_1}^{E_2} D(E)N(E)dE . \quad [2-1]$$

Der Transmissionskoeffizient D hängt von der Energie des Ladungsträgers E , vom Banddiagramm des Kondensators und von der effektiven Masse des Ladungsträgers im Isolator ab. Die Supply Funktion $N(E)$ ist die Differenz des Produktes von Verteilungsfunktion und Zustandsdichte in beiden Elektroden. Sie beschreibt die energieabhängige Anzahl leckstromrelevanter Ladungsträger.

2.1.1.1 Leckstromrelevante Ladungsträger

Leckstromrelevante Ladungsträger sind Ladungsträger, die in der emittierenden Elektrode auf den Isolator treffen und auf der gegenüberliegenden Elektrode einen Zustand finden (Abbildung 2-1).

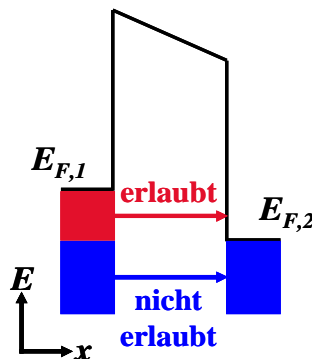


Abbildung 2-1: Schematische Darstellung einer Elektrode/Isolator/Elektrode (E/I/E) - Struktur bei $T=0K$. Die Ladungsträger mit Energien im roten Bereich sind die leckstromrelevanten Ladungsträger. Nur diese können aus der emittierenden Elektrode 1 elastisch tunneln. Die Elektronen mit Energien im blauen Bereich finden in der Akzeptor-Elektrode 2 keinen freien Zustand, da die Zustände bis zum Fermilevel besetzt sind.

Die Ladungsträgerdichte in einer Elektrode erhält man durch Multiplikation der energetischen Verteilung der Ladungsträger und der Zustandsdichte:

$$N(E)dE = f(E)Z(E)dE . \quad [2-2]$$

Da es im Phasenraum in einem Volumen h^3 exakt zwei Zustände für Fermionen gibt, lässt sich die Zustandsdichte wie folgt ausdrücken:

$$Z(\vec{p}) = \frac{2}{h^3} dp_x dp_y dp_z . \quad [2-3]$$

Die Anzahl der Ladungsträger, die parallel zur Tunnelrichtung pro Sekunde und pro Einheitsfläche mit einem Impuls parallel zur Tunnelrichtung innerhalb von dp_x auf den Isolator treffen erhält man durch Ersetzen von $Z(E)$ mit $Z(\vec{p})$ und anschließender Multiplikation von Gleichung [2-2] mit der Geschwindigkeitskomponente parallel zur Tunnelrichtung und Integration über dp_y und dp_z :

$$N(E_x)dE_x = \frac{2}{h^3} v_x dp_x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(E) dp_y dp_z . \quad [2-4]$$

Mit $mdE_x = p_x dp_x$ und $p_x = mv_x$ und durch Verwendung von Polarkoordinaten

$$p_{\perp} = \sqrt{p_y^2 + p_z^2} , \quad p_y = p_{\perp} \cos(\varphi) , \quad p_z = p_{\perp} \sin(\varphi) , \quad \varphi = \arctan\left(\frac{k_z}{k_y}\right) , \quad [2-5]$$

erhält man mit $dE_{\perp} = m p_{\perp} d p_{\perp}$ schließlich:

$$N(E_x) = \frac{4\pi m}{h^3} \int_0^{\infty} f(E) dE_{\perp} . \quad [2-6]$$

Die Supply Funktion ergibt sich nun aus der Differenz der Ladungsträgerverteilungen in den beiden Elektroden:

$$N(E_x) = \frac{4\pi m}{h^3} \int_0^{\infty} (f_1(E) - f_2(E)) dE_{\perp} . \quad [2-7]$$

Die Funktionen $f_1(E)$ und $f_2(E)$ werden bei Tunnelprozessen ausschließlich durch die Fermi-Dirac-Verteilung, welche die Verteilung von Fermionen im thermischen Gleichgewicht wiedergibt, beschrieben:

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

$$f_i(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F,i}}{kT}\right)}, \quad i = 1, 2 \quad [2-8]$$

Mit der Aufspaltung der Ladungsträgerenergie in eine zur Tunnelrichtung parallelen und senkrechten Komponente $E = E_x + E_\perp$ und der Beziehung $N(E_x) h^3 / 4\pi m = \xi_1(E_x) - \xi_2(E_x)$ folgt für die Funktionen $\xi_{1,2}(E_x)$:

$$\xi_i(E_x) = \int_0^\infty f_i(E) dE_\perp = \int_0^\infty \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{(E_x + E_\perp - E_{F,i})}{kT}\right)} dE_\perp, \quad i = 1, 2 \quad [2-9]$$

Mit Hilfe von

$$\int \frac{dx}{1 + \exp(ax)} = \text{const} + \frac{1}{a} \ln\left(\frac{1}{1 + \exp(-ax)}\right) \quad [2-10]$$

lässt sich die Beziehung [2-9] analytisch integrieren und es folgt:

$$\xi_i(E_x) = kT \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_{F,i}}{kT}\right)\right). \quad [2-11]$$

Aus den Gleichungen [2-7] und [2-11] ergibt sich die Supply-Funktion zu:

$$N(E_x) = \frac{4\pi m_{el}}{h^3} kT \ln\left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_{F,1}}{kT}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_{F,2}}{kT}\right)}\right) \quad [2-12]$$

Hier ist zu beachten, dass bei angelegter Spannung V die Fermienergie der Akzeptor-Elektrode um eV erniedrigt wird, so dass für Ladungsträgerenergien nahe $E_{F,1}$ die Verteilungsfunktion $f_2(E)$ gegenüber $f_1(E)$ vernachlässigt werden kann. Des Weiteren wird bei der effektiven Massennäherung die Masse des Ladungsträgers m durch seine effektive Masse m_{el} in der emittierenden Elektrode ersetzt. Bei Metallelektroden gilt $m_{el} = m_0$ und bei Siliziumelektroden werden wir den gemittelten Wert (effektive Masse des Ladungsträger ist von der Kristallrichtung, in die es sich bewegt abhängig) von $m_{el} = m_{Si} = 0.33m_0$ verwenden.

2.1.1.2 Banddiagramm einer E/I/E-Struktur

Die Ladungsträger tunneln von einem Metall oder Halbleiter durch eine oder mehrere Isolatorschichten in ein Metall oder in einen Halbleiter. Da der Transmissionskoeffizient von der Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante der Isolatorschicht relativ zu den Fermienergien der Elektroden abhängt, ist es notwendig das Banddiagramm der E/I/E-Struktur zu betrachten. Im Folgenden betrachten wir ausschließlich Metallelektroden mit zwei Isolatorschichten und setzen den energetischen Nullpunkt gleich der Leitungsbandkante mit der größten Energie, welches im Folgenden die Leitungsbandkante des Isolators 2 sein wird (Abbildung 2-2). Bei Halbleiterelektroden müssen zusätzlich die Bandverbiegung und die Grenzflächenzustände berücksichtigt werden.

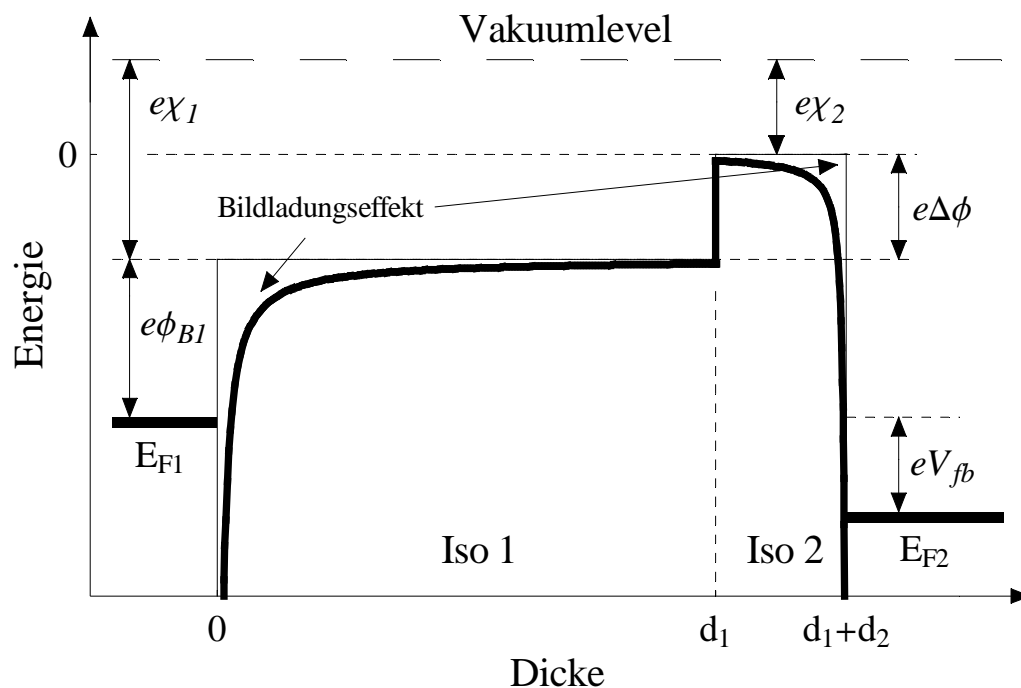


Abbildung 2-2: Banddiagramm einer E/I/E-Struktur mit zwei verschiedenen Isolatoren und Metallelektroden bei angelegter Flachbandspannung (Erläuterung des Bildladungseffektes siehe Text).

Es gelten folgende Relationen:

$$W = e\phi_B + e\chi, \quad \Delta\phi = \chi_1 - \chi_2 = \delta E_{CB}(\text{Iso1/ Iso2}), \quad eV_{fb} = E_{F,2} - E_{F,1} \quad [2-13]$$

Die elektrischen Felder in den Isolatoren lassen sich mit Hilfe des Gausschen Gesetzes $F_i = Q/(\epsilon_0\epsilon_i A)$ und den, aus den Kirchhoffschen Gesetzen folgenden Zusammenhang $C^{-1} = C_1^{-1} + C_2^{-1}$, der die Gesamtkapazität C von einem System, in welchem zwei Kondensatoren mit Kapazitäten C_1 und C_2 in Reihe geschaltet sind, beschreibt, wie folgt darstellen:

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

$$F_i = \frac{-V + V_{fb}}{\varepsilon_i \left(\frac{d_1}{\varepsilon_1} + \frac{d_2}{\varepsilon_2} \right)}, \quad i = 1, 2, \quad [2-14]$$

wobei V die an der emittierenden Elektrode angelegte Spannung ist.

Der tunnelnde Ladungsträger am Ort x induziert in der emittierenden Elektrode bzw. induziert in der Akzeptor-Elektrode eine Ladungsverteilung, welche durch einen Ladungsträger umgekehrten Vorzeichens bei $-x$ bzw. $2(d_1+d_2)-x$ beschrieben werden kann (Bildladungseffekt hängt von der Dielektrizitätskonstante des Elektrodenmaterials ab, wobei hier für Metallelektroden $\varepsilon \rightarrow \infty$ verwendet wird). Das resultierende Bildladungspotential (in Metallelektroden)

$$eV_{if,1} = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0\varepsilon_{d,1}|x|}, \quad eV_{if,2} = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0\varepsilon_{d,2}|x - (d_1 + d_2)|} \quad [2-15]$$

addiert sich zur potentiellen Energie des Isolators 1 bzw. 2 und erniedrigt somit die Potentialbarriere. Hier wird der Einfluss der Bildkraft an der Grenzfläche von der Elektrode 1 auf den Isolator 2 und von der Elektrode 2 auf den Isolator 1 vernachlässigt. Die dynamische Dielektrizitätskonstante ε_d hängt von der Geschwindigkeit des Ladungsträgers bzw. von der Frequenz seiner emittierten Strahlung (optischer Bereich) und vom umgebenden Material ab.

Aus den Gleichungen [2-14] und [2-15] folgt das Banddiagramm der E/I/E-Struktur bzw. die potentiellen Energien der Leitungs- bzw. Valenzbandkanten von Isolator 1 und 2:

$$eV_{isol1} = -eF_1x + eV_{if,1} - e\Delta\phi, \quad eV_{isol2} = -eF_2x - eF_1d_1 + eV_{if,2}. \quad [2-16]$$

Bei N Isolatorschichten erhält man als elektrisches Feld in Isolator j mit Berücksichtigung der Flachbandspannung (Austrittsarbeitendifferenz der beiden Elektroden) V_{fb}

$$F_i = \frac{-V + V_{fb}}{\varepsilon_i \sum_{j=1}^N \frac{d_j}{\varepsilon_j}}, \quad [2-17]$$

wobei d_j die Dicke und ε_j die Dielektrizitätskonstante des Isolators j darstellt.

Mit $d_0=0$, $\Delta\phi_i = \phi_{max} - \phi_i$ ($e\phi_{max} = W - e\chi_{min}$), wobei ϕ_i die Potentialbarriere bezüglich des Isolators i ist, und den Gleichungen [2-15] bis [2-17] folgt für das Banddiagramm eines Systems mit i Isolatoren:

$$eV_{iso,i} = -eF_i x - \sum_{j=1}^{i-1} eF_j d_j + eV_{if,1} + eV_{if,2} - \Delta\phi_i ,$$

$$eV_{if,2} = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_{d,2} \left| x - \sum_{j=1}^N d_j \right|} , \quad \sum_{j=1}^{i-1} d_j < x \leq \sum_{j=1}^i d_j . \quad [2-18]$$

2.1.1.3 Transmissionskoeffizient

In dieser Arbeit wird der Transmissionskoeffizient ausschließlich mit Hilfe der WKB-Näherung bestimmt. Die WKB-Näherung ist gültig für Tunnelprozesse über große Distanzen d , für die gilt: $d \gg \frac{\hbar}{2p}$, wobei p der Impuls des tunnelnden Teilchens ist

[3]. Bei der WKB-Näherung werden Reflexionen vernachlässigt. Je dünner die Isolatoren und je höher die Anzahl der Isolatoren bzw. Grenzflächen des Gesamtsystems, desto größer ist also der Fehler, der durch Verwendung der WKB-Näherung gemacht wird. Aufgrund der Komplexität der in dieser Arbeit untersuchten Systeme und durch den damit verbundenen, großen Rechenaufwand, wird selbst bei Strukturen mit drei verschiedenen Isolatoren und minimalen Schichtdicken von 0.4nm (Vergleich Kapitel 5.1.2), die WKB-Näherung verwendet, da diese gegenüber den Methoden Transfer-Matrix und Quantum Transmitting Boundary, welche unter anderem Reflexionen berücksichtigen, deutlich weniger Rechenaufwand erfordert. Auch bei Mehrfachtunnelprozessen, bei denen die Ladungsträger z.B. von Trap zu Trap tunneln (Vergleich Kapitel 3) wird hier die WKB-Näherung verwendet, obwohl die Tunneldistanzen dabei zum Teil kleiner als 1nm sind. Die Gültigkeit der WKB-Näherung in Abhängigkeit der Schichtdicke bzw. der Tunneldistanz wurde in [4] untersucht. Der Vergleich des Stromes, welcher durch numerisches Lösen der Schrödinger-Gleichung resultiert, mit dem Strom, den man mit Hilfe der WKB-Näherung erhält, durch eine SiO₂-Schicht zeigt, dass der Fehler bei Verwendung der WKB-Näherung für Schichtdicken zwischen 1.5nm und 5nm vernachlässigbar ist [4].

Aus der Schrödinger-Gleichung erhält man mit Hilfe einer quasiklassischen Näherung den WKB-Transmissionskoeffizient

$$D(E) = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{eV_{iso} - E} dx\right) , \quad [2-19]$$

wobei m_{iso} die effektive Masse des Ladungsträgers im Isolator ist. Allerdings ist die effektive Masse des Ladungsträgers in einem Isolator im Allgemeinen nicht bekannt und ist somit ein Fitparameter. Als Näherung werden nur Tunnelprozesse, deren Übergänge in Richtung des elektrischen Feldes (x -Richtung) stattfinden, betrachtet. Dadurch ist nur die Energiekomponente E_x relevant für den Tunnelprozess bzw. für den

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Transmissionskoeffizienten und die Gesamtenergie E kann durch E_x ersetzt werden. Bei N Isolatorschichten erhält man:

$$D(E_x) = \exp\left(-\sum_{i=1}^N \frac{2\sqrt{2m_{iso,i}}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{eV_{iso,i} - E_x} dx\right), \quad a = \sum_{j=1}^{i-1} d_j, \quad b = \sum_{j=1}^i d_j, \quad [2-20]$$

wobei $m_{iso,i}$ die effektive Masse des Ladungsträgers im Isolator i darstellt.

Die Transmissionskoeffizienten und somit die Tunnelströme einer E/I/E-Struktur werden in dieser Arbeit nur für Strukturen mit einem Isolator analytisch gelöst. Bei Strukturen mit zwei oder mehreren Isolatoren wird der Tunnelstrom ausschließlich numerisch berechnet, da die numerische gegenüber der analytischen Behandlung (wie in Kapitel 2.1.1.5 beschrieben wird) mehrere Vorteile bietet. Da bei Verwendung von high-k Dielektrika auf Silizium sich entweder eine SiO_2 -Schicht bildet oder man eine Si_3N_4 -Schicht auf dem Siliziumsubstrat zur Vermeidung der Bildung einer SiO_2 -Schicht abscheidet, und man es somit meistens mit zwei oder mehreren Isolatoren zu tun hat, wurden alle Berechnungen in dieser Arbeit numerisch durchgeführt.

2.1.1.4 Analytische Behandlung von Tunnelströmen

Der Vorteil Tunnelströme mit Hilfe analytischer Gleichungen zu berechnen, liegt in dem damit verbundenen, geringeren Rechenaufwand gegenüber der numerischen Behandlung und der einfacheren Bestimmung der Fitparameter (z.B. durch einen Fowler-Nordheim-Plot).

Ist die an der E/I/E-Struktur angelegte Spannung (abzüglich der Flachbandspannung) kleiner als die Potentialbarriere spricht man von Direktem Tunneln (DT). In diesem Fall tunneln die Ladungsträger in das Leitungsband (Elektronen) bzw. in das Valenzband (Löcher) des Substrats. Bei größerer Spannung tunneln die Ladungsträger ins Leitungsband bzw. ins Valenzband des Isolators; man spricht von Fowler-Nordheim-Tunneln (FNT) (Abbildung 2-3).

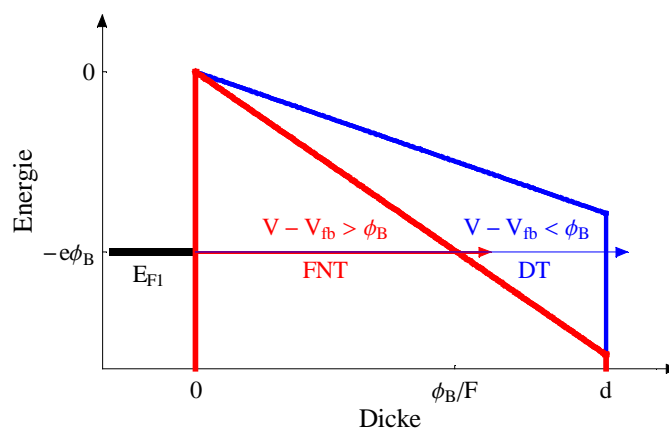


Abbildung 2-3: Schematische Darstellung von **DT** und **FNT**. Bei DT tunneln die Ladungsträger durch einen Potentialwall der Dicke d und bei FNT durch einen Potentialwall der Dicke ϕ_B/F .

Im Folgenden werden die Gleichungen für DT und FNT bei $T=0K$ und ohne Berücksichtigung des Bildkraftpotentials hergeleitet. Für $T>0K$ und mit Berücksichtigung des Bildkraftpotentials müssen diese Gleichungen korrigiert werden.

2.1.1.4.1 Direktes Tunneln (DT)

Zur Vereinfachung setzen wir $V_{fb}=0V$. Mit Vernachlässigung von $f_2(E)$ (in der Akzeptor-Elektrode sind alle Zustände unbesetzt) gegenüber $f_1(E)$ und mit $T=0K$ folgt aus der Gleichung [2-12] für die Supply-Funktion:

$$N(E_x) \stackrel{E_x < E_F}{=} \frac{4\pi m_{el}}{h^3} (E_F - E_x), \quad N(E_x) \stackrel{E_x > E_F}{=} 0. \quad [2-21]$$

Zunächst setzen wir den energetischen Nullpunkt in die Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators, so dass $E_F = -e\phi_B$. Nach Ersetzung von E durch E_x und durch die Vernachlässigung des Bildladungspotentials, ergibt sich der Transmissionskoeffizient für Ladungsträger durch eine Isolatorschicht mit der Schichtdicke d aus Gleichung [2-19] zu:

$$\begin{aligned} D_{DT}(E_x) &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{h} \int_0^d \sqrt{-eFx - E_x} dx\right) \\ &= \exp\left(\frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3e\hbar F} \left((-E_x)^{3/2} + (-E_x - edF)^{3/2}\right)\right), \end{aligned} \quad [2-22]$$

wobei $eV_{iso} = -eFx$ verwendet wurde.

Damit sich das Produkt der Gleichungen [2-21] und [2-22] analytisch über E_x integrieren lässt, entwickelt man Gleichung [2-22] in einer Taylorreihe um $E_x = -e\phi_B$ bis zum zweiten Term (gute Näherung, da die am Tunnelprozess beteiligten Ladungsträger Energien nahe der Fermienergie besitzen) und erhält schließlich:

$$\begin{aligned} D_{DT}(E_x) &= \exp(a + b(E_x + e\phi_B)), \\ a &= \frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3e\hbar F} \left((e\phi_B - edF)^{3/2} - (e\phi_B)^{3/2}\right), \quad b = \frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{e\hbar F} \left(\sqrt{e\phi_B} - \sqrt{e\phi_B - edF}\right) \end{aligned} \quad [2-23]$$

Setzt man die Gleichungen [2-21] und [2-23] in die Gleichung [2-1], wobei in Gleichung [2-21] E_F durch $-e\phi_B$ und dF durch V ersetzt werden kann ergibt sich die Stromdichte zu:

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

$$\begin{aligned}
 J_{DT} &= \frac{4\pi m_{el} e^{-e\phi_B}}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(a + b(E_x + e\phi_B)) (-e\phi_B - E_x) dE_x = \frac{4\pi m_{el} e}{h^3} \frac{1}{b^2} \exp(a) \\
 &= \frac{e^3 m_{el} F^2}{8\pi \hbar m_{iso} (\sqrt{e\phi_B} - \sqrt{e\phi_B - eV})^2} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3ehF} \left((e\phi_B)^{3/2} - (e\phi_B - eV)^{3/2}\right)\right) \quad [2-24]
 \end{aligned}$$

Die untere Integrationsgrenze müsste eigentlich $E_{F,2}$ sein, da die Elektronen mit Energien $E < E_{F,2}$ in der Akzeptor-Elektrode keine freien Zustände finden (Vergleich **Abbildung 2-1**). Bei $T=0K$ und $E_{F,1} >> E_{F,2}$ ist $-\infty$ jedoch eine gute Näherung, da die am Tunnelprozess beteiligten Ladungsträger Energien um $E_{F,1}$ haben.

2.1.1.4.2 Fowler-Nordheim-Tunneln (FNT)

Der FNT-Strom kann ähnlich wie der DT-Strom hergeleitet werden. Hier ändert sich nur die obere Integrationsgrenze des Integrals von Gleichung [2-22]. Anstatt d hat man hier ϕ_B/F (siehe **Abbildung 2-3**) als obere Integrationsgrenze, woraus sich folgender Transmissionskoeffizient ergibt:

$$\begin{aligned}
 D_{FNT}(E_x) &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{\hbar} \int_0^{\phi_B/F} \sqrt{-eFx - E_x} dx\right) \\
 &= \exp\left(\frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3e\hbar F} \left((-E_x)^{3/2} + (-E_x - e\phi_B)^{3/2}\right)\right) \quad [2-25]
 \end{aligned}$$

Nach Entwicklung um $E_x = -e\phi_B$ von Gleichung [2-25] bis zum zweiten Term einer Taylorreihe erhält man:

$$\begin{aligned}
 D_{FNT}(E_x) &= \exp(a + b(E_x + e\phi_B)), \\
 a &= -\frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3e\hbar F} (e\phi_B)^{3/2}, \quad b = -\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{e\hbar F} \sqrt{e\phi_B} \quad [2-26]
 \end{aligned}$$

Der FNT-Strom ergibt sich jetzt äquivalent wie der DT-Strom zu:

$$\begin{aligned}
 J_{FNT} &= \frac{4\pi m_{el} e^{-e\phi_B}}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(a + b(E_x + e\phi_B)) (-e\phi_B - E_x) dE_x = \frac{4\pi m_{el} e}{h^3} \frac{1}{b^2} \exp(a) \\
 &= \frac{e^2 m_{el} F^2}{8\pi \hbar m_{iso} \phi_B} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m_{iso}}}{3ehF} (e\phi_B)^{3/2}\right) \quad [2-27]
 \end{aligned}$$

Bei Berücksichtigung des Bildladungspotentials sind die Tunnelströme im Allgemeinen nicht analytisch darstellbar. Man benötigt dann sowohl im Vorfaktor als auch im Exponenten von den Gleichungen [2-24] und [2-27] Funktionen, welche von

elliptischen Integralen abhängen [2]. Für Temperaturen $T > 0\text{K}$ erhält man einen genäherten Korrekturterm, mit dem die Vorfaktoren in den Gleichungen [2-24] und [2-27] multipliziert werden [2]. Will man das Bildladungspotential und/oder die Temperaturabhängigkeit berücksichtigen, ist es einfacher und exakter die Tunnelströme numerisch zu lösen.

2.1.1.5 Numerische Behandlung von Tunnelströmen

Berechnet man den Tunnelstrom numerisch hat es folgende Vorteile:

- die komplette Temperaturabhängigkeit ohne zusätzliche Näherung ist im Strom enthalten; auch die Schottky-Emission (Kapitel 2.1.2).
- das Bildladungspotential kann problemlos berücksichtigt werden.
- die Ströme durch beliebig viele Isolatorschichten können ohne erhöhten Rechenaufwand bestimmt werden.

Der numerische Tunnelstrom berechnet sich wie Gleichung [2-1], wobei im allgemeinen Fall $D(E)$ mit der Gleichung [2-20] und $N(E)$ mit der Gleichung [2-12] zu berechnen ist. Die Integrationsgrenzen E_1 und E_2 sind im allgemeinen Fall $-\infty$ und $+\infty$. Bei der numerischen Integration müssen diese endliche Werte besitzen, da der Rechenaufwand linear mit $E_2 - E_1$ steigt.

Die Integrationsgrenze E_1 kann gleich der Fermienergie der Akzeptor-Elektrode $E_1 = E_{F,2}$ gesetzt werden, da die Elektronen mit Energien $E_x < E_{F,2}$ in der Akzeptor-Elektrode keinen freien Zustand finden (Vergleich Abbildung 2-1). Bei angelegter Spannung V (an emittierender Elektrode) erniedrigt sich die Fermienergie der Akzeptor-Elektrode um $-eV$, so dass mit Berücksichtigung der Flachbandspannung V_{fb} für die Integrationsgrenze E_1 gilt: $E_1 = E_{F,1} - V_{fb} - eV$.

Die Integrationsgrenze E_2 kann bei Barrieren größer 1.7eV ($\phi_B = 1.7\text{eV}$ ist die kleinste Barriere, die in dieser Arbeit verwendet wurde) und den in dieser Arbeit verwendeten Schichtdicken und effektiven Elektronenmassen bei Raumtemperatur gleich der Energie der Leitungsbandkante des Isolators E_B (o.B.d.A wird diese Energie gleich Null gesetzt $E_B = 0\text{eV}$) gesetzt werden, da bei Raumtemperatur für das Verhältnis der Supply-Funktionen bei den Energien E_B und $E_{F,1}$ näherungsweise (Vernachlässigung der Verteilungsfunktion $f_2(E)$, Vergleich Kapitel 2.1.1.1 und Gleichung [2-12]) gilt:

$$\frac{N(E_x = E_B = 0\text{eV})}{N(E_x = E_{F,1} = -1.7\text{eV})} = \frac{\ln\left(1 + \exp\left(-\frac{0\text{eV} + 1.7\text{eV}}{kT}\right)\right)}{\ln\left(1 + \exp\left(-\frac{-1.7\text{eV} + 1.7\text{eV}}{kT}\right)\right)} \approx 9 \cdot 10^{-30} . \quad [2-28]$$

Das Verhältnis der Transmissionskoeffizienten bei Energien E_B und $E_{F,1}$ für eine Isolatorschicht mit einer Schichtdicke $d = 5.8\text{nm}$, einer effektiven Elektronenmasse $m_{\text{eff}} = 0.42m_0$ und einer Barriere von $\phi_B = 1.7\text{eV}$ ist gegeben durch:

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

$$\frac{D(d = 5.8\text{nm}, m_{\text{eff}} = 0.38 \cdot 10^{-30} \text{kg}, E_B = 0\text{eV})}{D(d = 5.8\text{nm}, m_{\text{eff}} = 0.38 \cdot 10^{-30} \text{kg}, E_{F,1} = -1.7\text{eV})} = \frac{1}{\exp\left(-\frac{2\sqrt{2} \cdot 0.38 \cdot 10^{-30}}{\hbar} \int_0^{5.8\text{nm}} \sqrt{0 + 1.7\text{eV}} dx\right)} \approx 2 \cdot 10^{-22} . \quad [2-29]$$

Aus diesem repräsentativen (Parameter wie in Kapitel 5.1.2 verwendet) Beispiel folgt, dass gilt:

$$N(E_{F,1}) \cdot D(E_{F,1}) \gg N(E) \cdot D(E) \quad \forall E > E_B , \quad [2-30]$$

so dass der Beitrag der Elektronen mit Energien $E > E_B$ zum Gesamtstrom vernachlässigt werden kann und somit das Integrationslimit E_2 gleich der Energie der Leitungsbandkante gesetzt werden kann: $E_2 = E_B$.

2.1.2 Thermisch aktivierte Ströme: Schottky-Emission

Bei der Schottky-Emission (wird auch als thermische Emission bezeichnet) berechnet man die Anzahl der Ladungsträger in der emittierenden Elektrode, die pro Sekunde und Einheitsfläche auf die Potentialbarriere (, welche durch das Bildladungspotential unter Einwirkung des elektrischen Feldes reduziert wird) treffen und, die eine größere Energie als die Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators E_{iso} haben (kann also klassisch gelöst werden).

$$J_{\text{Schottky}} = e \int_{E_x > E_{iso}} N(E_x) dE_x \quad [2-31]$$

Dieser thermisch aktivierte Prozess beinhaltet eine klassische Behandlung, weswegen im Gegensatz zu den Tunnelströmen hier die Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$f(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$ benutzt wird, so dass mit $E = E_x + E_{\perp}$ aus Gleichung [2-6] folgt:

$$N(E_x) = \frac{4\pi m}{h^3} \int_0^{\infty} \exp\left(\frac{E_F - E_x - E_{\perp}}{kT}\right) dE_{\perp} = \frac{4\pi m kT}{h^3} \exp\left(\frac{E_F - E_x}{kT}\right) \quad [2-32]$$

Mit Berücksichtigung des Bildladungspotentials erhält man folgendes Banddiagramm:

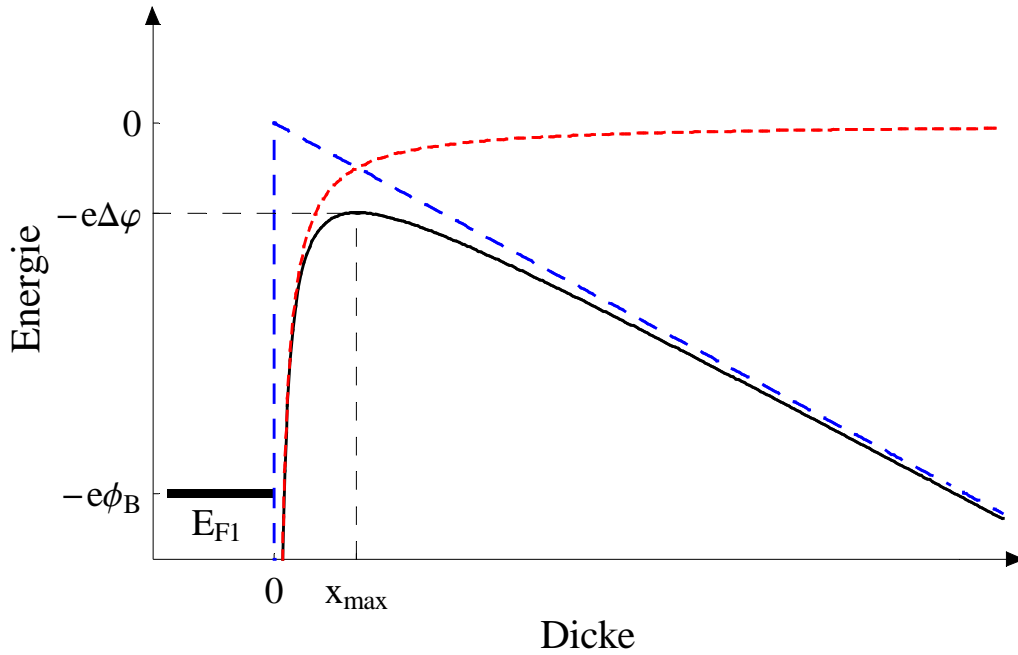


Abbildung 2-4: Das Banddiagramm einer E/I/E-Struktur zur Bestimmung der Schottky-Emission. Die Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolaturs (durchgehende Linie), welche sich aus der Addition des **Bildladungspotentials** (fein gestrichelte Linie) und des **elektrostatischen Potentials** (grob gestrichelte Linie) ergibt, hat bei x_{max} das Maximum $-e\Delta\varphi$.

Nach Differentiation der Gleichung [2-18] ($i=N=1$, $V_{if,2}=0$) erhält man durch Nullstellensuche:

$$x_{max} = \sqrt{\frac{e}{16\pi\epsilon_0\epsilon_d F}} \Rightarrow e\Delta\varphi = e\sqrt{\frac{eF}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d}}, \quad [2-33]$$

wobei $-e\Delta\varphi$ die Potentialbarrierenerniedrigung für die Ladungsträger darstellt. Mit den Gleichung [2-31] bis [2-33] und aus dem gewählten Koordinatensystem (Nullpunktenergie im Leitungsband des Isolaturs siehe **Abbildung 2-1**) folgt für den Schottky-Strom:

$$\begin{aligned} J_{Schottky} &= \frac{4\pi m_{el} kT}{h^3} \int_{-e\Delta\varphi}^{\infty} \exp\left(-\frac{e\phi_B + E_x}{kT}\right) dE_x = \frac{4\pi m_{el} k^2 T^2}{h^3} \exp\left(-\frac{e\phi_B - e\Delta\varphi}{kT}\right) \\ &= A^* T^2 \exp\left(-\frac{e\phi_B - e\sqrt{\frac{eF}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d}}}{kT}\right), \end{aligned} \quad [2-34]$$

mit A^* als Richardson-Konstante. Man beachte, dass der Schottky-Strom bei der numerischen Berechnung von Tunnelströmen mit inbegriffen ist.

2.2 Leckströme in Isolatoren mit Defekten

Die Leckstromdichte in Isolatoren mit Defekten setzt sich aus der Stromdichte J_{mD} , welche durch die Defekte verursacht wird, und der Stromdichte, welche fließen würde, hätte der Isolator keine Defekte J_{oD} , zusammen.

Ein Defekt in einem Isolator, auch Trap genannt, wird durch einen Ort x_T und durch einen Energielevel (bzw. durch eine Traptiefe $e\phi_T$) beschrieben. Das Trap ist ein Zustand für die Ladungsträger mit einem bestimmten Einfangquerschnitt σ_T . Die Traptiefe $e\phi_T$ (Vergleich **Abbildung 2-5**) ist die Differenz der Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante und der Grundzustandsenergie des Trappotentials (siehe blaue Linie in **Abbildung 2-5**).

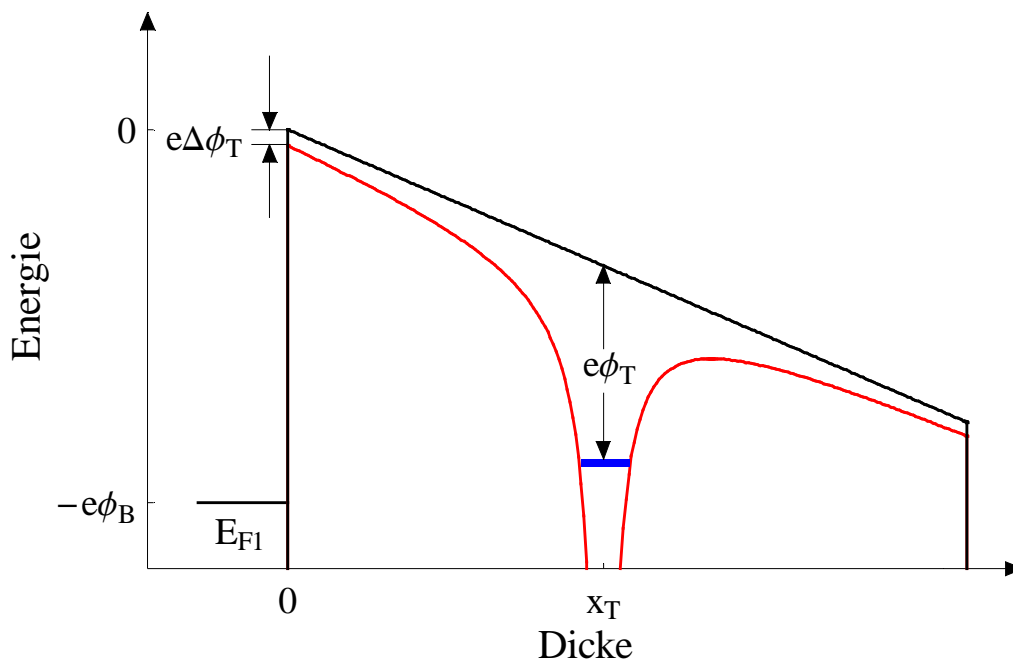


Abbildung 2-5: Banddiagramm eines Isolatoren mit einem Trap am Ort x_T . Die schwarze Kurve ist die Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolatoren ohne, und die rote Kurve mit Einfluß des Traps. Durch das Potential des Traps (hier Coulombpotential) wird die Potentialbarriere um $e\Delta\phi_T$ erniedrigt. Der Eigenzustand des Ladungsträgers im Trappotential hat eine um $e\phi_T$ (Traptiefe) kleinere Energie als die Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolatoren.

Wäre das Trappotential exakt bekannt, könnte man die Eigenzustände bzw. den Grundzustand des Ladungsträgers im Trappotential berechnen. In diesem Fall könnte man sich auch die Mühe machen den Einfangquerschnitt als Funktion der Ladungsträgerenergie zu bestimmen. Da das Trappotential im Allgemeinen nicht bekannt ist, wird das Trappotential oft ganz vernachlässigt und der Einfangquerschnitt wird als Konstante betrachtet. Im Folgenden wird ein Modell über defektunterstütztes Tunneln – „trap-assisted tunneling“ (TAT) - vorgestellt, welches als Vorläufer des in dieser Arbeit entwickelten Leckstrommodells betrachtet werden kann. Andere defektunterstützte Leckstrommodelle werden hier nicht diskutiert. Als thermisch aktivierten Prozess wird nur Poole-Frenkel(PF)-Emission diskutiert, welcher dann beim Vergleich mit dem defektunterstützten Leckstrommodell in Frage gestellt wird. Andere

thermisch aktivierte Prozesse wie Hopping-Leitung oder Ionenleitung werden deswegen nicht vorgestellt.

2.2.1 Defektunterstütztes Tunneln

Beim TAT tunneln die Ladungsträger aus der emittierenden Elektrode in ein Trap (in **Abbildung 2-6** durch den Transmissionskoeffizienten D_1 dargestellt), woraus sie in das Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators oder der Akzeptor-Elektrode tunneln (in **Abbildung 2-6** durch den Transmissionskoeffizienten D_2 dargestellt). In der Literatur existieren verschiedene Beschreibungsmöglichkeiten bzw. Annahmen bezüglich der energetischen Verteilung der Traps, die im Allgemeinen nicht bekannt ist. Sowohl die Annahme von diskreten Traplevels [5] als auch die Annahme einer kontinuierlichen energetischen Verteilung der Traps [6] sind in der Literatur zu finden. Auch die Behandlung des Trappotentials in Veröffentlichungen ist nicht einheitlich. Es wird entweder vernachlässigt [6] oder wie das Potential eines H-Atoms behandelt (z.B. in [5] und bei allen Veröffentlichungen über den PF-Effekt z.B. in [9]). Es gibt verschiedene Modelle um TAT zu beschreiben, wobei die getroffenen Annahmen von den untersuchten Proben bzw. deren Leckstromverhalten abhängt. In Kapitel 3 wird ein allgemeines Leckstrommodell eingeführt, das für alle Isolatoren anwendbar ist. Die räumliche Verteilung der Traps ist ebenso wenig bekannt wie die energetische. Im Folgenden wird die Form des Trappotentials vernachlässigt und eine energetische Verteilung der Trapverteilung $N_T(E_x)$ in einem Trapband angenommen. Des Weiteren wird ausschließlich ein Zwei-Stufen-Prozess betrachtet (siehe **Abbildung 2-6**) [6], wobei eine räumliche Verteilung der Traps mit konstantem Trapabstand angenommen wird.

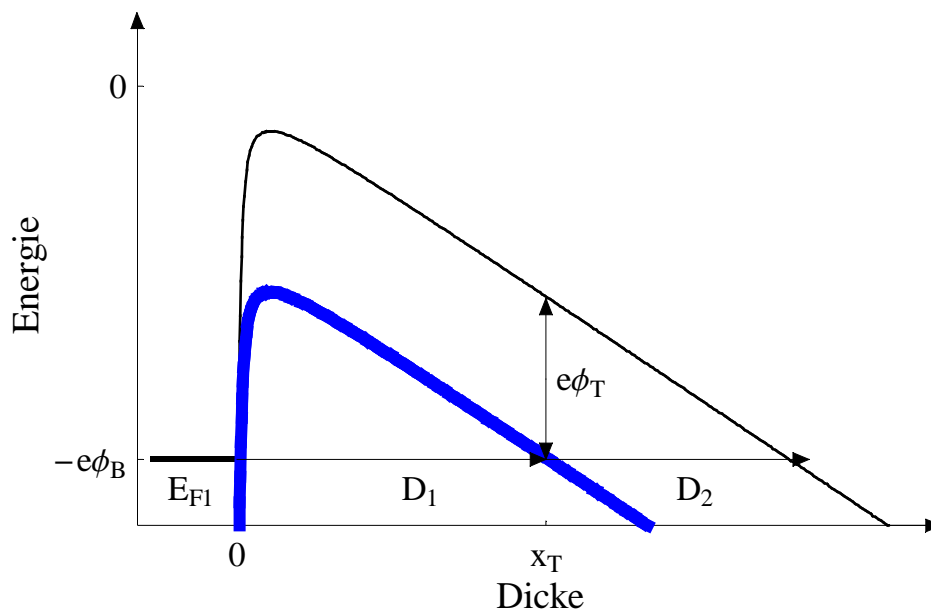


Abbildung 2-6: Banddiagramm eines Isolators (schwarze Linie) mit einem Trapband (schematisch, blaue Linie). Die mittlere Energie des Trapbandes liegt um $e\phi_T$ unterhalb dem Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators. Die Ladungsträger tunneln zunächst in das Trapband und dann in das Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators oder der Akzeptor-Elektrode.

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Der totale Transmissionskoeffizient D_{tot} , der aus den beiden Tunnelprozessen mit den Transmissionskoeffizienten D_1 und D_2 (siehe **Abbildung 2-6**) resultiert, wird im Folgenden unter Berücksichtigung der Besetzungswahrscheinlichkeit des Traps am Ort x_T hergeleitet:

Für die Tunnelrate (Anzahl der Tunnelereignisse) R_1 (Tunnelrate für den Übergang von der emittierenden Elektrode in das Trapband) und für die Tunnelrate R_2 (Tunnelrate für den Übergang vom Trapband in die Akzeptor-Elektrode) gelten folgende Relationen [5]:

$$\begin{aligned} R_1 &\propto (1-f)D_1, & D_1 &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{\hbar} \int_0^{x_T} \sqrt{eV_{iso} - E_x} dx\right), \\ R_2 &\propto fD_2, & D_2 &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{\hbar} \int_{x_T}^d \operatorname{Re}\left(\sqrt{eV_{iso} - E_x}\right) dx\right), \end{aligned} \quad [2-35]$$

wobei f die Besetzungswahrscheinlichkeit der Traps ist. Der Transmissionskoeffizient D_2 hat als obere Integrationsgrenze d falls $V-V_{fb} < \phi_B$ und ϕ_B/F falls $V-V_{fb} > \phi_B$. Bei der numerischen Berechnung von D_2 kann für beide Fälle d als obere Integrationsgrenze benutzt werden, wenn nur der Realteil $\operatorname{Re}\left(\sqrt{eV_{iso} - E_x}\right)$ berechnet wird.

Aufgrund der Gleichgewichtsbedingung $R_1=R_2=R$, ergibt sich die Besetzungswahrscheinlichkeit und daraus mit Hilfe der Gleichung [2-35] der totale Transmissionskoeffizient D_{tot} zu:

$$f = \frac{D_1}{D_1 + D_2} \Rightarrow D_{tot} = \frac{D_1 D_2}{D_1 + D_2} \quad [2-36]$$

Wird der Einfangquerschnitt als Konstante betrachtet erhält man für den TAT-Strom:

$$J_{TAT} = e\sigma_T \int_{-\infty}^{\infty} N_T(E_x) N(E_x) D_{tot}(E_x) dE_x, \quad [2-37]$$

wobei die Wahrscheinlichkeit des Einfangs eines Ladungsträgers in $\sigma_T \int_{-\infty}^{\infty} N_T(E_x) dE_x$ und in dem totalen Transmissionskoeffizienten, der die Besetzungswahrscheinlichkeit berücksichtigt, zum Ausdruck kommt. Bei der numerischen Berechnung müssen die Integrationsgrenzen wieder eingeschränkt werden (Vergleich Kapitel 2.1.1.5). In der Arbeit [6] wurde als energetische Trapverteilung eine Gauß-Verteilung mit geringer Verbreiterung verwendet. Der Gesamtstrom folgt aus Addition von Gleichung [2-37] und dem Strom J_{oD} , welcher nicht über Traps fließt.

Bei Strukturen mit einem Isolator gibt es mit diesem TAT-Modell 6 Fitparameter: ϕ_B , m_{iso} , ε_d , N_T , σ_T und ϕ_T , wobei hier die Verbreiterung der Gaußverteilung als Fitparameter vernachlässigt wird.

2.2.2 Thermisch aktivierte Prozesse: Poole-Frenkel-Emission

Bei der PF-Emission betrachtet man ausschließlich die Emission eines Ladungsträgers aus seinem Grundzustand in einem Coulombpotential (siehe **Abbildung 2-7**), wobei der Grundzustand ein Fitparameter ist und nicht aus einer quantenmechanischen Rechnung folgt.

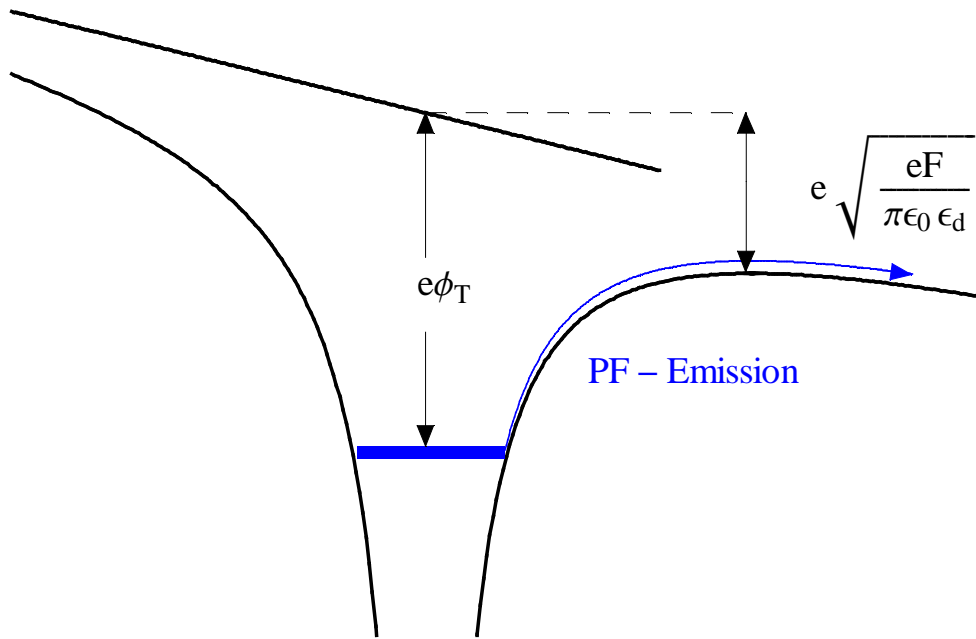


Abbildung 2-7: Schematische Darstellung der PF-Emission (blauer Pfeil) aus dem Grundzustand eines Coulombpotentials (blaue Linie).

Durch die Überlagerung von dem Coulombpotential und dem Potential der Leitungs- bzw. Valenzbandkante wird die Potentialbarriere $e\phi_T$, die der Ladungsträger im Trap zu überwinden hat, erniedrigt. Ähnlich wie bei der Schottky-Emission ergibt sich die Erniedrigung zu:

$$\frac{d}{dx}\left(-eFx - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d x}\right) = 0 \Rightarrow x_{\max} = \sqrt{\frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d F}} \Rightarrow -e\sqrt{\frac{eF}{\pi\epsilon_0\epsilon_d}}, \quad [2-38]$$

wobei auch hier wie beim Bildladungspotential die dynamische Dielektrizitätskonstante verwendet werden muss, da der Ladungsträger die Umgebung des Traps im Allgemeinen bereits verlassen hat, bevor sich eine Polarisation ausbilden kann. Die Aufenthaltsdauer eines Ladungsträgers im Einflussbereich des Trappotentials beträgt ca. 10fs. Deswegen tragen nur die Anteile der dielektrischen Funktion mit Frequenzen $>1/10\text{fs}$ zur Polarisation bzw. zur Barriererniedrigung bei, weswegen die dynamische Dielektrizitätskonstante verwendet werden muss.

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Bei Erhöhung des elektrischen Feldes im Isolator sinkt die Potentialbarriere der getrappten Ladungsträger, wodurch die Anzahl der thermisch emittierten Ladungsträger steigt. Hieraus resultiert der PF-Strom:

$$J_{PF} = C_1 F \exp \left(- \frac{e\phi_T - e \sqrt{\frac{eF}{\pi\epsilon_0\epsilon_d}}}{kT} \right), \quad [2-39]$$

wobei die Konstante C_1 unter anderem von der Trappkonzentration abhängt. Die Gleichung [2-39] ist eine unvollständige Formel, da hier der Strom in das Trap, welcher u.a. von der Potentialbarriere abhängt, nicht berücksichtigt wird. Der Poole-Frenkel-Effekt ist ein reiner „Bulk-Effekt“.

Außerdem ist das Modell nicht konsistent:

Für ein gegebenes Trappotential existieren eindeutig definierte Eigenzustände. Bei der PF-Emission sind diese Eigenzustände – im Gegensatz zum Trappotential, welches stets durch das Wasserstoff-Potential beschrieben wird – jedoch Fitparameter. Der Grundzustand $E_0(\epsilon_d)$ in einem Wasserstoff-Potential, welches sich in einem umgebenden Material mit einer dynamischen Dielektrizitätskonstante ϵ_d und mit einer effektiven Elektronenmasse m_{eff} befindet, ist näherungsweise [7]:

$$E_0(\epsilon_d) = - \frac{m_{eff} e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{\epsilon_d^2} \approx - \frac{m_{eff}}{m_0} \frac{13.6eV}{\epsilon_d^2}. \quad [2-40]$$

In [9] wurde für Si_3N_4 die Poole-Frenkel-Emission als dominanter Leckstrommechanismus berichtet mit $\epsilon_d=5.5$ und $e\phi_T=1.3eV$, was im Widerspruch zu Gleichung [2-40] steht, da mit $\epsilon_d=5.5$, $m_{eff} \leq m_0$ und mit der Gleichung [2-40] das Traplevel $\phi_T \leq 0.45V$ sein müsste. Bei der korrekten Behandlung der thermischen Emission eines Ladungsträgers aus einem Trap muss das Trappotential, das definierte Eigenzustände (, welche die Traptiefe festlegen) besitzt, als einziger Fitparameter betrachtet werden.

Außerdem verändert sich das Coulombpotential durch das elektrische Feld, was zu einer Abhängigkeit der Traptiefe vom elektrischen Feld im Isolator führt. Dieser Stark-Effekt wird bei der PF-Emission vollkommen vernachlässigt, was allerdings eine gute Näherung ist. Denn für die Energieverschiebung ΔE des Grundzustandes eines Coulombpotentials, welches sich in einem Material mit einer dynamischen Dielektrizitätskonstanten ϵ_d befindet, gilt:

$$\Delta E = -9\pi\epsilon_0\epsilon_d^3 a_0^3 F^2. \quad [2-41]$$

Mit $F=5MV/cm$ und $\epsilon_d=5.5$ erhält man $\Delta E \approx 10meV$. Bei einer Traptiefe von $\phi_T=1.3V$ ist der Fehler, welcher durch Vernachlässigung des Stark-Effektes entsteht, kleiner als 1%.

2.2.3 Vergleich von defektunterstütztem Tunneln und Poole-Frenkel-Emission

In diesem Abschnitt werden die TAT-Emissionsrate und die PF-Emissionsrate abgeschätzt und verglichen. Dieser grundlegende Vergleich der beiden konkurrierenden Prozesse „tunneln“ und „thermische Emission“ wurde noch nie zuvor durchgeführt, obwohl dies für die Charakterisierung des Leckstromverhaltens in Isolatoren mit Defekten unablässig ist.

Um die TAT-Emissionsrate und die PF-Emissionsrate berechnen zu können, benötigt man die Wahrscheinlichkeit des Tunnelns und der thermischen Emission eines Ladungsträgers aus einem Trap und die Anzahl der Möglichkeiten pro Sekunde eines Ladungsträgers dies zu tun. Im Gegensatz zu den oben besprochenen leckstromrelevanten Ladungsträger (Kapitel 2.1.1.1) handelt es sich hier um einen einzigen Ladungsträger mit diskreter Energie, der nicht im thermischen Gleichgewicht ist. Zur Vereinfachung kann man den energetischen Nullpunkt in das Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators (, welches der Isolator ohne Trap hätte) am Ort des Traps x_T setzen (siehe **Abbildung 2-8**).

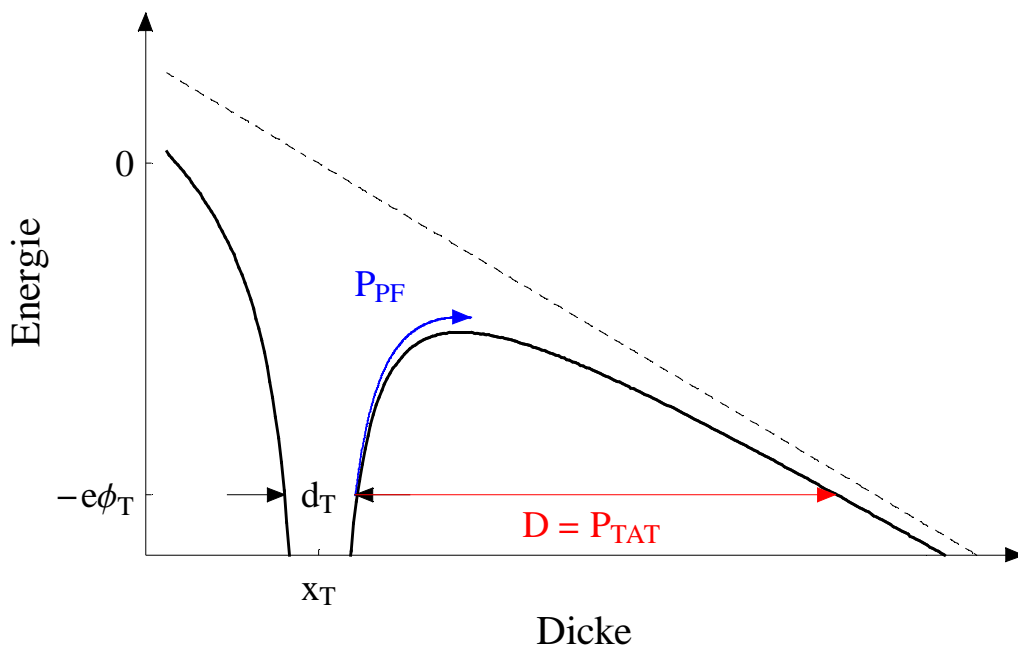


Abbildung 2-8: Banddiagramm eines Isolators mit einem Trap bei verschobenem Koordinatensystem zum Vergleich von PF-Emission und Tunneln.

Aus der Gleichung [2-35] folgt mit $E_x = -e\phi_T$ die Wahrscheinlichkeit für den Tunnelprozess $P_{TAT} = D_2$ eines Ladungsträgers aus dem Trap:

$$P_{TAT} = \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{iso}}}{\hbar} \int_0^{d-x_T} \operatorname{Re}\left(\sqrt{-eFx - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d x} + e\phi_T}\right) dx\right). \quad [2-42]$$

Hier ist zu beachten, dass wie bei DT und FNT der Ladungsträger entweder in das Leitungs- bzw. Valenzband der Akzeptor-Elektrode ($d-x_T < \phi_T/F$) oder in das Leitungs-

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

bzw. Valenzband des Isolators ($d-x_T > \phi_T/F$) tunnelt, weswegen P_T für $d-x_T < \phi_T/F$ explizit von $d-x_T$ abhängig ist.

Die Wahrscheinlichkeit der thermischen Emission eines Ladungsträgers aus dem Trap ist gegeben durch (Vergleich Kapitel 2.2.2):

$$P_{PF} = \exp\left(-\frac{e\phi_T - e\sqrt{\frac{eF}{\pi\epsilon_0\epsilon_d}}}{kT}\right). \quad [2-43]$$

Da die TAT-Emissionsrate I_{TAT} bzw. PF-Emissionsrate I_{PF} proportional zum Produkt von der Wahrscheinlichkeit des Tunnelns P_{TAT} bzw. der thermischen Emission P_{PF} und der Frequenz, mit welcher der Ladungsträger auf die Potentialbarriere trifft ν_{TAT} , bzw. der Phonon-Emissionsrate ν_{PF} ist, folgt für das Verhältnis:

$$I_{TAT} = CP_{TAT}\nu_{TAT}, \quad I_{PF} = CP_{PF}\nu_{PF} \Rightarrow \frac{I_{TAT}}{I_{PF}} = \frac{P_{TAT}\nu_{TAT}}{P_{PF}\nu_{PF}} \quad [2-44]$$

Die Frequenz, mit welcher der Ladungsträger auf die Potentialbarriere trifft lässt sich mit Hilfe der Geschwindigkeit des Ladungsträgers im Trap v_T und der Trapdicke d_T (Vergleich **Abbildung 2-8**) wie folgt annähern:

$$\nu_{TAT} = \frac{v_T}{2d_T} \quad [2-45]$$

Für die Bestimmung der Ladungsträgersgeschwindigkeit im Trap benötigt man den Erwartungswert der kinetischen Energie eines Ladungsträgers im Grundzustand eines Coulombpotentials in einem Material mit ϵ_d :

$$\langle E_{kin} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{1,0,0}^2 (E_0 - E_{pot}) d\vec{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{-2|x|}{a_0\epsilon_d}\right)}{\pi a_0^3 \epsilon_d^3} \left(-\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{\epsilon_d^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d x} \right) d\vec{x}, \quad [2-46]$$

wobei $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m_0}$ der Bohrradius ist. Mit Verwendung von Kugelkoordinaten ergibt sich die Gleichung [2-46] zu:

$$\begin{aligned}
 \langle E_{kin} \rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{-2|r|}{a_0 \varepsilon_d}\right)}{\pi a_0^3 \varepsilon_d^3} \left(-\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{\varepsilon_d^2} + \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_d |r|} \right) r^2 dr \\
 &= \frac{e^4 m_0}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{\varepsilon_d^2}.
 \end{aligned} \tag{2-47}$$

Mit $\langle E_{kin} \rangle = \frac{1}{2} m_0 \langle v^2 \rangle$ und $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = v_T$ folgt für die Ladungsträgergeschwindigkeit:

$$v_T = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar} \frac{1}{\varepsilon_d} \tag{2-48}$$

Aus $\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_d} \frac{1}{2} d_T = e\phi_T$ bzw. $d_T = \frac{e}{8\pi \varepsilon_0 \varepsilon_d \phi_T}$ folgt mit Hilfe von Gleichung [2-45] für

die Frequenz, mit welcher der Ladungsträger auf die Potentialbarriere trifft:

$$v_{TAT} = \frac{e\phi_T}{\hbar} \tag{2-49}$$

Hier ist zu beachten, dass die Gleichung [2-49] nur gilt, wenn kein elektrisches Feld im Isolator vorliegt. Beim folgenden Vergleich, wird dies allerdings für $F \neq 0$ vernachlässigt.

Die Phonon-Emissionsrate ν_{PF} lässt sich wie folgt abschätzen [8]:

$$\nu_{PF} = \frac{C^2 m_{iso} kT \bar{\nu}}{\pi c_s^2 \hbar^3 \rho} = \frac{C^2 m_{iso} kT}{2\pi c_s^2 \hbar^3 a_0 \varepsilon_d \rho}, \tag{2-50}$$

wobei C eine Konstante ist und die Wellenzahl $\bar{\nu}$ als $2a_0 \varepsilon_d$ gesetzt wurde. Eine grobe Abschätzung liefert mit $\phi_T = 1V$, $C = 10^{-19} J$, $m_{iso} = m_0/2$, $\rho = 4g/cm^3$ und $\varepsilon_d = 2$:

$$\frac{\nu_{TAT}}{\nu_{PF}} \approx \frac{10^{15}}{10^{12}} = 1000. \tag{2-51}$$

Aus der Tatsache, dass der Ladungsträger ca. 1000mal öfter die Möglichkeit zum Tunneln als zur thermischen Emission hat folgt, dass der Ladungsträger für $P_{TAT} > 10^{-3}$ keine Möglichkeit zur thermischen Emission hat.

Um die TAT-Emissionsrate mit der PF-Emissionsrate vergleichen zu können, müssen P_{TAT} und P_{PF} berechnet werden. Im Folgenden wird dies für Si_3N_4 und Al_2O_3 , bei denen PF-Emission als dominanter Leitungsmechanismus deklariert wurde ([9] und [6]), getan. Mit Hilfe der Gleichungen [2-42] und [2-43] und, mit den in [9] bzw. [6]

bestimmten Fitparametern (siehe Tabelle 1), erhält man das in **Abbildung 2-9** dargestellte Verhalten.

Für $d-x_T < \phi_T/F$, d.h. wenn der Ladungsträger ins Leitungs- bzw. Valenzband der Akzeptor-Elektrode tunnelt, hängt die Tunnelwahrscheinlichkeit explizit von $d-x_T$ ab (siehe **Abbildung 2-9a**). Da die Si_3N_4 -Schichten aus [9] sehr dick sind, wurde hier nur der Fall $d-x_T > \phi_T/F$ berücksichtigt. Da der Ladungsträger 1000mal öfter die Möglichkeit zum Tunneln als zur thermischen Emission hat (Vergleich Gleichung [2-51]), ist $I_{PF}=I_{TAT}$ wenn $1000P_{PF}=P_{TAT}$. Aus **Abbildung 2-9** folgt, dass bei Dicken $d-x_T \geq \phi_T/F$ für $F > F_{krit}=1.36\text{MV/cm}$ im Al_2O_3 bzw. für $F > F_{krit}=1.47\text{MV/cm}$ im Si_3N_4 die TAT-Emissionsrate dominiert. Ist z.B. $d-x_T=4.5\text{nm}$ dominiert die TAT- Emissionsrate bei allen elektrischen Felder. Damit die Bedingung $d-x_T \geq \phi_T/F$ erfüllt ist, muss im Al_2O_3 $d-x_T \geq \phi_T/F_{krit}=8.82\text{nm}$ und im Si_3N_4 $d-x_T \geq \phi_T/F_{krit}=8.84\text{nm}$ gelten. Da die maximale Schichtdicke der in [6] untersuchten Isolatoren 6nm ist, dominiert in Al_2O_3 bei allen elektrischen Feldern der Tunnelstrom aus dem Trap. Die in [9] untersuchten Schichten sind dick genug, damit für $F < 1.47\text{MV/cm}$ die PF-Emissionsrate dominieren kann. Allerdings wurde die PF-Emission in dieser Arbeit für elektrische Felder zwischen 4MV/cm und 7MV/cm deklariert. Bei $F=4\text{MV/cm}$ gilt allerdings $P_{TAT}/P_{PF}=4 \cdot 10^5$, wodurch der PF-Strom nur für $v_{PF} \geq 4 \cdot 10^5 v_{TAT}$, was allerdings unphysikalisch ist, größer als der TAT-Strom wäre. Selbst bei einem großen Fehler in der Abschätzung der „Escape“-Frequenzen v_{PF} und v_{TAT} dominiert der Tunnelstrom gegenüber dem PF-Strom im Si_3N_4 bei Raumtemperatur und $F=4\text{MV/cm}$. Im Klartext heißt das, dass in dem Bereich des elektrischen Feldes, in dem der Strom als PF-Emission identifiziert wurde und auch die Fitparameter festgelegt wurden, der PF-Strom vernachlässigt werden kann.

Tabelle 1: Materialeigenschaften von Si_3N_4 und Al_2O_3 , die durch eine PF-Diskussion festgelegt wurden.

Material	Referenz	ϕ_T [V]	ϵ_d	m_{iso} [m_0]	Schichtdicken [nm]
Si_3N_4	[9]	1.3	5.5	0.5	30-300
Al_2O_3	[6]	1.2	1.8	0.45	3.6-6.0

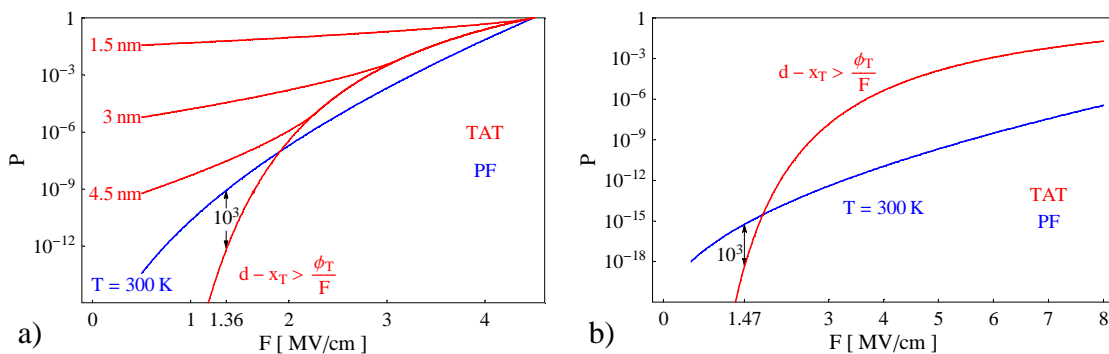


Abbildung 2-9: Vergleich der Tunnelwahrscheinlichkeit (rot) (für verschiedene Dicken $d-x_T$) mit der Wahrscheinlichkeit der thermischen Emission (blau) (bei $T=300\text{K}$) eines Ladungsträgers aus einem Coulombpotential in einer bestimmten Traptiefe ϕ_T als Funktion des elektrischen Feldes. a) Hier befindet sich das Coulombpotential in Al_2O_3 , welches bei einer PF-Untersuchung die Parameter aus Tabelle 1 hat [6]. b) Hier befindet sich das Coulombpotential in Si_3N_4 , welches bei einer PF-Untersuchung die Parameter aus Tabelle 1 hat [9].

Aus dem obigen Vergleich folgt, dass die PF-Emission nur für relativ dicke Isolatoren (nicht DRAM relevant) und nur bei relativ kleinen elektrischen Feldern (bei denen allerdings in den obigen Beispielen ein anderer Leitungsmechanismus deklariert wurde, da dort der PF-Formalismus nicht anwendbar war) gegenüber der TAT-Emissionsrate dominiert. Selbst bei höheren Temperaturen dominiert der TAT-Strom. In **Abbildung 2-10** ist das elektrische Feld F_{trans} , ab welchem der TAT-Strom dominiert als Funktion der Temperatur für das Si_3N_4 aus [9] und für das Al_2O_3 aus [6] dargestellt. Für elektrische Felder $F < F_{trans}$ dominiert der PF-Strom. Bei hohen Temperaturen ist F_{trans} für Si_3N_4 deutlich größer als für Al_2O_3 . Dies erklärt sich durch den Unterschied in den Parametern ε_d , ϕ_T und m_{eff} von Si_3N_4 und Al_2O_3 . Je kleiner ε_d , ϕ_T und je größer m_{eff} desto größer ist F_{trans} .

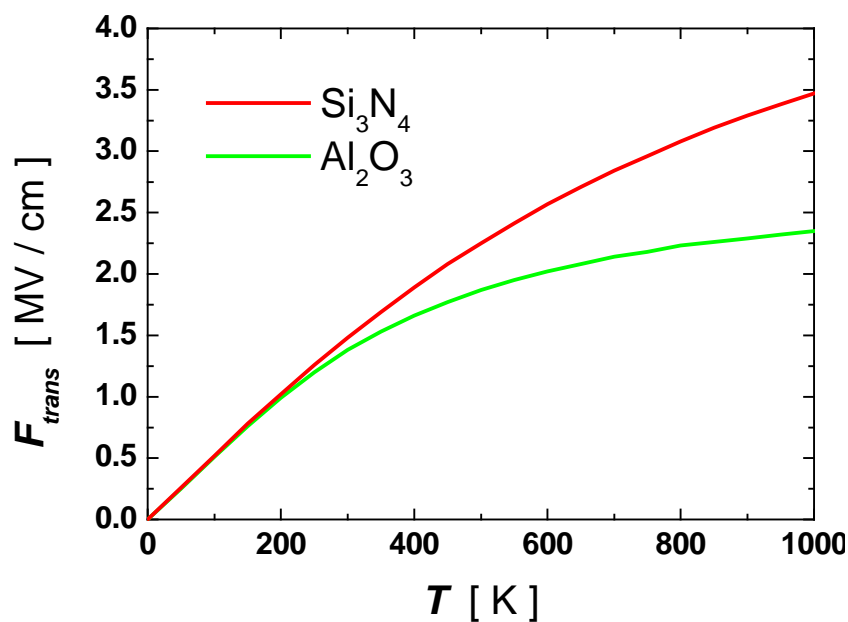


Abbildung 2-10: Das elektrische Feld F_{trans} , ab welchem der TAT-Strom dominiert als Funktion der Temperatur für das Si_3N_4 aus [9] und für das Al_2O_3 aus [6]. Für elektrische Felder $F < F_{trans}$ dominiert der PF-Strom.

Der PF-Formalismus wird häufig angewandt, um vor allem die Temperaturabhängigkeit der Leckströme gerecht zu werden. Diese Temperaturabhängigkeit kann allerdings auch mit Tunnelprozessen beschrieben werden, was in Kapitel 5.1.2.1 gezeigt wird. In Kapitel 5.1.2.2 wird ein Beispiel gezeigt, in dem die berechneten Tunnelströme durch den PF-Effekt scheinbar erklärt werden können. Dies beweist, dass der PF-Formalismus auf fast beliebige temperaturabhängige $J(V)$ -Daten scheinbar anwendbar ist und somit keine Aussagekraft besitzt. Er lässt experimentelle Daten vielmehr falsch interpretieren.

2.3 Zeitabhängige Effekte

Neben den statischen Leckströmen gibt es zeitabhängige Effekte wie die dielektrische Relaxation und Trapping Effekte. Um einen Isolator zu charakterisieren, müssen die statischen Leckströme von den zeitabhängigen Effekten getrennt werden. Dies stellt hohe Anforderungen an die Messtechnik bzw. an die Messmethoden, welche in Kapitel 4 beschrieben werden.

2.3.1 Dielektrische Relaxation

Die bei allen Isolatoren auftretende dielektrische Relaxation ist äquivalent zu einer Zunahme der reversiblen Polarisation als Funktion der Zeit nach Anlegen einer Spannung ΔV und führt zu einem messbaren transienten Strom. Ebenso wie bei den statischen Leckströmen ist bei dem Relaxationsstrom ein Spannungsverlust am DRAM-Speicherkondensator verbunden. Der Relaxationsstrom in Festkörpern folgt dem empirischen Curie-von Schweidler-Gesetz [10]:

$$J_{relax}(t) = A_{relax} C_{HF} \Delta V t^{-n}, \quad n \approx 1, \quad [2-52]$$

welches äquivalent zu dem Ersatzschaltbildes (Abbildung 2-11) ist.

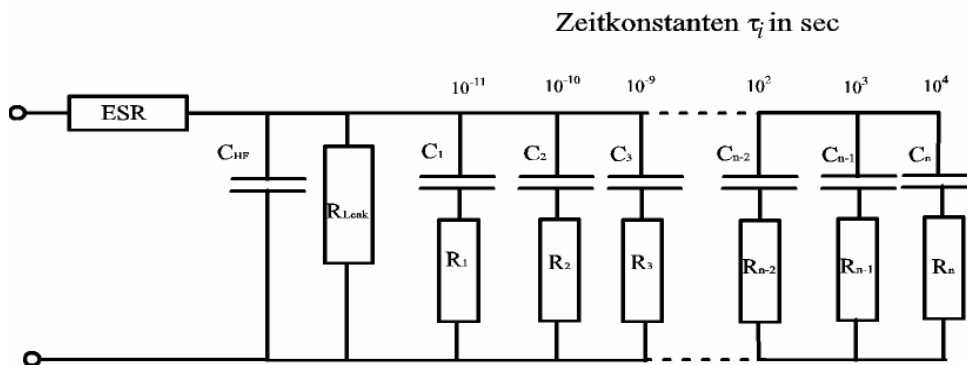


Abbildung 2-11: Elektrisches Ersatzschaltbild eines Isolators, dessen Relaxation nach einer Spannungsänderung durch das Curie-von Schweidler-Gesetz beschrieben wird.

Nach Anlegen einer Spannung wird zunächst die Hochfrequenzkapazität C_{HF} geladen, wobei der Strom durch den Serienwiderstand ESR (Zuleitungen, Spannungsquelle) begrenzt ist. Der Ladestrom fällt daraufhin wie $\exp(-t/\tau_{HF})$ mit $\tau_{HF}=ESR \cdot C_{HF}$ ab. Im weiteren Zeitverlauf werden nach und nach die übrigen Relaxationsglieder ihrer Zeitkonstanten $\tau_i=C_i R_i$ entsprechend aufgeladen. Der dadurch verursachte Relaxationsstrom wird nach einiger Zeit gegenüber dem durch R_{Leak} begrenzten, statischen Leckstrom vernachlässigbar. Diese Zeit ist notwendig um bei einer $I(V)$ -Messung den statischen Leckstrom zu erhalten (Vergleich Kapitel 4). Der experimentell

verifizierte Zeitbereich für die Gültigkeit des Curie-von Schweidler-Gesetzes reicht von 10^{-11} s bis 10^4 s.

Es gibt mehrere physikalische Modelle um das Curie-von Schweidler-Verhalten zu erklären. Prinzipiell reicht eine Ladungsträgerbewegung innerhalb des Isolators aus, um einen Strom hervorzurufen. Diese Ladungsträgerbewegung kommt durch ein elektrisches Feld zustande. Ein hypothetisches Modell geht von einem Ladungsträger in einem Doppelpotential aus. Wenn dieser Ladungsträger von der einen Hälfte des Doppelpotentials in die andere tunnelt, erhält man einen Strom. Man kann zeigen, dass dieser Strom dem Curie-von Schweidler-Gesetz gehorcht [11]. Die verschiedenen Zeitkonstanten entsprechen verschiedenen Potentialdistanzen und Barrierenhöhen (, welche vom elektrischen Feld abhängen) der Doppelpotentiale. Auf diese Modelle wird hier nicht weiter eingegangen, da man die exakten Potentiale in einem Isolator nicht kennt und die Wechselwirkungen sämtlicher Potentiale mit dem elektrostatischen Potential zu dem Curie-von Schweidler-Verhalten führt.

2.3.2 Trapping Effekte

Durch Trappen von Ladungsträgern in einem Isolator verändert sich die potentielle Energie des Leitungs- bzw. Valenzbandes des Isolators und somit die Leckstromdichte. Dies ist ein dynamischer Prozess, da sich die Ladung bzw. das elektrische Gegenfeld im Isolator erst mit der Zeit aufbaut. Die Zeitabhängigkeit des elektrischen Gegenfeldes führt zu einer Zeitabhängigkeit des Leckstromes, welche nun zur Vereinfachung mit folgenden Annahmen hergeleitet werden (Vergleich auch **Abbildung 2-12**):

- Die für das Gegenfeld verantwortlichen Traps werden am Ort x_T getrappt.
- Alle anderen Traps werden nicht berücksichtigt.
- Alle Ladungsträger, welche die emittierende Elektrode verlassen, werden am Ort x_T getrappt, d.h. die Einfangwahrscheinlichkeit der Traps wird 1 gesetzt.
- Der Strom von den am Ort x_T getrappten Ladungsträger zur Akzeptor-Elektrode wird Null gesetzt.

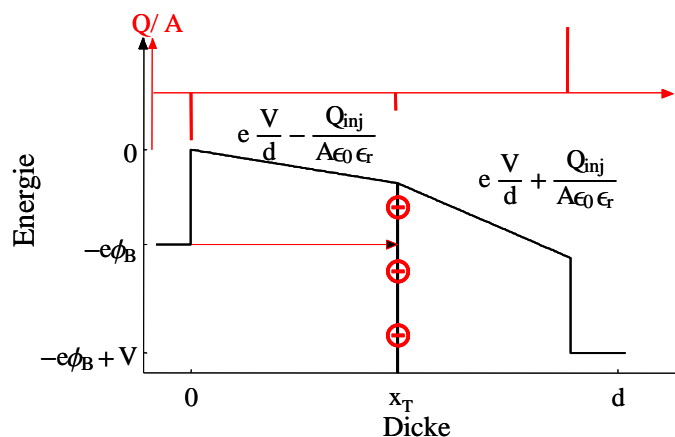


Abbildung 2-12: Banddiagramm einer E/I-E-Struktur ($V_{fb}=0V$) mit getrappten Elektronen am Ort x_T . Durch Ladungsträgerinjektion wird der Isolator am Ort x_T elektrisch mit Q_{inj} aufgeladen, wodurch sich das elektrostatische Potential verändert. Für $x < x_T$ wird das elektrische Feld erniedrigt, während es für $x > x_T$ erhöht wird. Die Anzahl der Ladungsträger pro Einheitsfläche als Funktion des Ortes sind schematisch dargestellt (rot).

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Die injizierte Ladung am Ort x_T verändert das elektrische Feld im Isolator für $x < x_T$ wie folgt (Vergleich **Abbildung 2-12**):

$$F(t) = F_0 - \frac{Q_{inj}}{A \epsilon_0 \epsilon_r} = F_0 - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \int J_{inj} dt, \quad F_0 = \frac{V}{d}, \quad [2-53]$$

wobei der Strom der getrappten Ladungen in die Akzeptor-Elektrode hier vernachlässigt wird.

Da die Injektionsstromdichte eine Funktion vom zeitabhängigen elektrischen Feld ist $J_{inj} = J_{inj}(F(t))$, lässt sich die Gleichung [2-53] als Differentialgleichung 1.Ordnung schreiben:

$$\frac{dF}{dt} = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} J_{inj}(F(t)). \quad [2-54]$$

Der Injektionsstrom entspricht dem DT-Strom bzw. dem FNT-Strom und hängt wie $\exp(-1/F)$ vom elektrischen Feld ab, wodurch die Gleichung [2-54] nicht analytisch lösbar wird. Betrachtet man die Tunnelstromdichte nur über 2 bis 3 Größenordnungen, kann er durch

$$J_{inj} = \alpha \exp(\beta F), \quad [2-55]$$

angenähert werden, womit sich die Differentialgleichung [2-54] durch

$$F(t) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\alpha \beta}{\epsilon_0 \epsilon_r} t + \frac{\alpha}{J_{inj,0}} \right), \quad J_{inj,0} = \alpha \exp(\beta F_0) \quad [2-56]$$

lösen lässt. Setzt man die Gleichung [2-56] in die Gleichung [2-55] ein, erhält man folgende Zeitabhängigkeit der Injektionsstromdichte (Emissionsstrom vernachlässigt):

$$J_{inj}(t) = \frac{1}{\frac{\beta}{\epsilon_0 \epsilon_r} t + \frac{1}{J_{inj,0}}}. \quad [2-57]$$

Nach Gleichung [2-57] ist der Injektionsstrom durch eine anfängliche Zeitkonstante ($t=0s$)

$$\tau = \frac{1}{J_{inj,0}} \quad [2-58]$$

charakterisiert. Bei großen Zeiten ($t \gg 1/J_{inj,0}$) verhält sich die Injektionsstromdichte wie

$$J_{inj,0} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{\beta} t^{-1}, \quad [2-59]$$

was experimentell schon oft bestätigt wurde [12]. Bei kleinen Zeiten hängt der Injektionsstrom über J_0 von der angelegten Spannung ab. In dem Zeitbereich, in dem Gleichung [2-59] gilt, ist der Injektionsstrom bzw. das elektrische Feld zwischen der emittierenden Elektrode und den getrappten Ladungen unabhängig von der angelegten Spannung. Die angelegte Spannung verändert lediglich das elektrische Feld zwischen den getrappten Ladungen und der Akzeptor-Elektrode, so dass bei sehr hohen Spannungen die Emissionsstromdichte (Elektronen aus den Traps in die Akzeptor-Elektrode) J_{em} erhöht wird und nicht mehr vernachlässigt werden kann. Die Gesamtstromdichte setzt sich aus

$$J = \frac{x_T}{d} J_{inj} + \frac{d - x_T}{d} J_{em} \quad [2-60]$$

zusammen. Gilt $J_{inj}=J_{em}$ bleibt die Ladungsträgerdichte am Ort x_T konstant und der Gesamtstrom wird zeitunabhängig. Da der Emissionsstrom von der angelegten Spannung abhängt, hängt auch die Zeit τ_{GG} , nach welcher der Gleichgewichtszustand $J_{inj}=J_{em}$ erreicht ist, von der angelegten Spannung ab (Vergleich **Abbildung 2-13**).

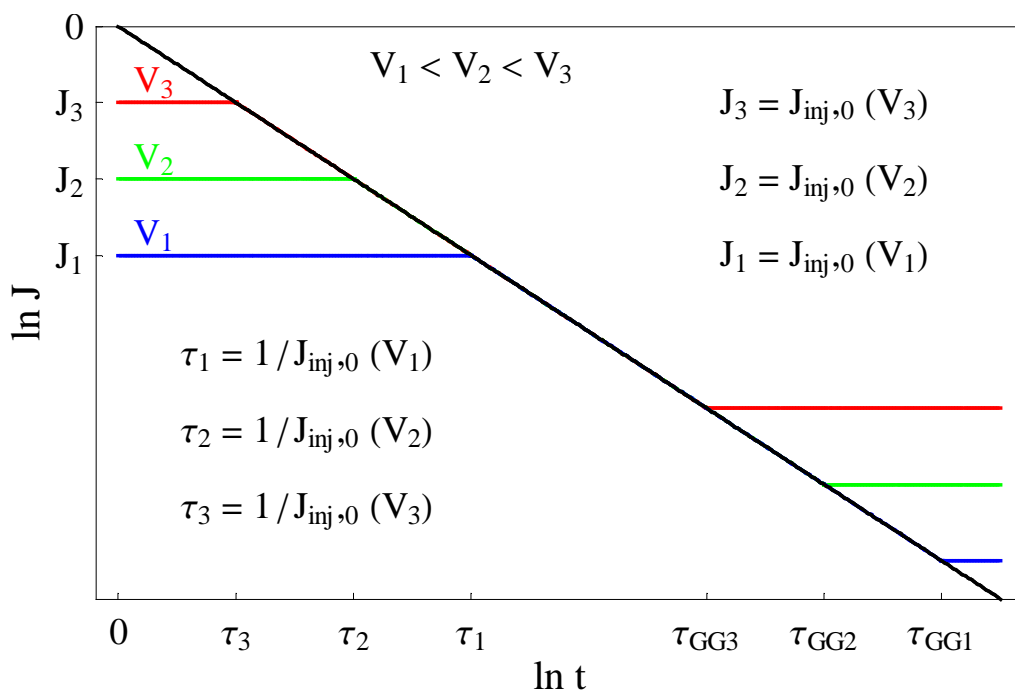


Abbildung 2-13: Schematische Darstellung der Zeitabhängigkeit der Gesamtstromdichte bei verschiedenen Spannungen mit Berücksichtigung von Trapping-Effekten. Nach einer spannungsabhängigen anfänglichen Zeitkonstanten $\tau_i = \tau(V_i)$ fließt ein zeitabhängiger Injektionsstrom. Nach einer Zeit $\tau_{GGi} = \tau_{GG}(V_i)$ gilt $J_{inj} = J_{em}$ und der Gesamtstrom wird zeitunabhängig.

2 Bekannte Leckstrommechanismen in Isolatoren

Hat man nun τ_{GG} durch Messungen bestimmt, kann man über $J_{inj}(x_T, \tau_{GG})=J_{em}(x_T, \tau_{GG})$ den Ort der Traps bestimmen. Allerdings müssten alle anderen Parameter wie die Potentialbarriere und die effektive Ladungsträgermasse im Isolator bekannt sein. Das Hauptproblem liegt allerdings bei der Annahme einer Einfangwahrscheinlichkeit der Traps von 1 und eines diskreten Ort x_T der Traps. Es ist jedoch realistischer eine örtliche (womöglich auch eine energetische) Verteilung der Traps mit einer begrenzten Einfangwahrscheinlichkeit vorauszusetzen, wodurch die Berechnung des Injektions- bzw. Emissionsstromes sehr komplex wird, da sowohl der Injektions- als auch der Emissionsstrom sehr sensitiv von der Verteilung der Traps abhängt.

Der gemessene Gesamtstrom durch eine E/I/E-Struktur setzt sich aus dem reinen Leckstrom, dem Relaxationsstrom und dem Strom, welcher durch Trapping-Effekte verursacht wird, zusammen. Für die Modellierung der Strom-Spannungskennlinien benötigt man allerdings den reinen Leckstrom, weswegen sowohl der Relaxationsstrom als auch der Strom, der durch Trapping-Effekte verursacht wird, vom reinen Leckstrom in der Messung getrennt werden muss. Dies stellt eine hohe Anforderung an die Messtechnik dar, wie in Kapitel 4 beschrieben wird. Um Trapping-Effekte bei einer $I(V)$ -Messung ausschließen zu können, muss die Messzeit hinreichend kurz sein, damit die injizierte Ladung bzw. die dadurch verursachte Änderung des elektrischen Feldes $\Delta F=Q_{inj}/(A\varepsilon_0\varepsilon_r)$ für eine $I(V)$ -Messung vernachlässigbar ist. Mit der Bedingung $\Delta F<0.1\text{MV/cm}$ erhält man für eine Probe mit $\varepsilon_0\approx 10^{13}\text{F/m}$, $\varepsilon_r=10$ und der Annahme, dass der gesamte Strom getrappt wird, die in **Abbildung 2-14** dargestellte maximale Messzeit (damit $\Delta F\leq 0.1\text{MV/cm}$) als Funktion des Stromes. Die maximale Messzeit folgt aus $\Delta F=Q_{inj}/(A\varepsilon_0\varepsilon_r)=J\cdot t_{max}/(\varepsilon_0\varepsilon_r)=0.1\text{MV/cm}$.

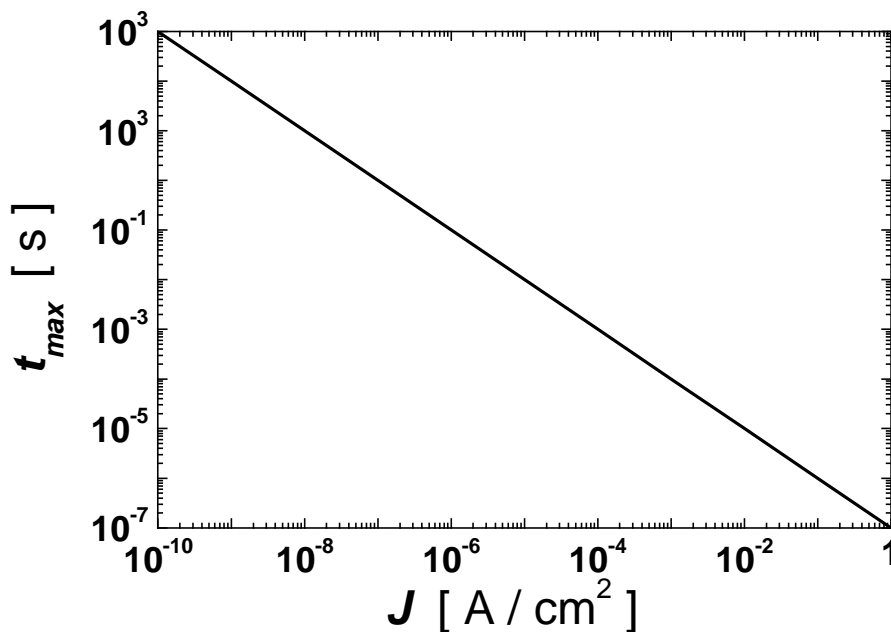


Abbildung 2-14: Die maximale Messzeit als Funktion der Stromdichte. Die maximale Messzeit ist durch die Bedingung $\Delta F\leq 0.1\text{MV/cm}$ begrenzt. Die Rechnung wurde für eine Probe mit $\varepsilon_r=10$ und der Annahme, dass alle Ladungsträger getrappt werden, durchgeführt.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurde eine minimale Delayzeit von $t=1\text{ms}$ realisiert. Damit die Variation des elektrischen Feldes, die durch getrappte Ladungen verursacht wird, vernachlässigbar ist, kann gemäß **Abbildung 2-14** die Stromdichte bis maximal $J=10^{-5}\text{A/cm}^2$ gemessen werden. Da die tatsächliche Einfangwahrscheinlichkeit der Traps im Allgemeinen deutlich kleiner als 1 ist, konnten bei allen hier durchgeführten Messungen fehlerfreie $J(V)$ -Kennlinien bis zu einer Stromdichte von $J=1\text{A/cm}^2$ durchgeführt werden.

3 Neues Leckstrommodell

Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurde ein Modell erarbeitet, welches den Leckstrom durch einen Isolator mit Defekten beschreibt. Dieses Modell wurde bei einer E/I/E-Struktur mit CVD- Al_2O_3 , SiO_2 (Defekte durch Nb-Elektrode verursacht) und mit Ta_2O_5 als Isolator erfolgreich angewandt. Bei diesem Modell betrachtet man die Ladungsträger, die elastisch von Trap zu Trap tunneln. Es ist das erste Modell, welches Mehrfachtunnelprozesse beinhaltet, weswegen es im Folgenden mit multistep Trap-Assisted-Tunneling (MSTAT) bezeichnet wird.

Bei den Tunnelprozessen werden Resonanzen und Elektron-Phonon-Wechselwirkungen vernachlässigt. Traps sind im Allgemeinen durch ihre räumliche und energetische Verteilung charakterisiert (Vergleich Kapitel 2.2).

Potential der Traps:

Bei dem MSTAT-Modell können Traps beliebige Potentiale besitzen, wobei zur Reduzierung der Fitparameter das Potential des Traps in der folgenden Diskussion vernachlässigt wird.

Räumliche Verteilung der Traps:

Bei sämtlichen high-k Materialien, ausgenommen Si_3N_4 , bei dem die Traps aufgrund von dangling bonds existieren und amphoter sind [13], gibt es keine fundierten Informationen über die örtliche Lage der Traps. In dieser Arbeit wird der Einfluss der räumlichen Verteilung der Traps auf den Leckstrom untersucht, indem der Leckstrom durch einen Isolator, in welchem Traps gleichmäßig im Raum angeordnet sind (Kapitel 3.1) mit dem Leckstrom durch einen Isolator mit statistisch verteilten Traps (Kapitel 3.2) verglichen wird (Kapitel 3.3).

Energetische Verteilung der Traps:

Da die Trapenergien im Allgemeinen nicht bekannt sind bzw. keine Messmethoden zur eindeutigen Bestimmung dieser Energien existiert, wurde hier eine konstante energetische Verteilung der Traps in der Bandlücke des Isolators angenommen. Es würde keinen Sinn machen die energetische Verteilung als zusätzlichen, willkürlichen Fitparameter, der nicht durch Messungen zu quantifizieren ist, einzuführen.

3.1 Multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT): Gleichmäßiger Trapabstand

Bei einer Trapkonzentration von N_T erhält man als durchschnittlichen Trapabstand $N_T^{-1/3}$. Ein Ladungsträger in der emittierenden Elektrode tunnelt in das erste Trap, welches einen Abstand y zwischen 0 und $N_T^{-1/3}$ von der emittierenden Elektrode hat. Danach tunnelt es in das nächste Trap, welches einen Abstand $N_T^{-1/3}$ vom ersten Trap hat. Der Ladungsträger tunnelt von Trap zu Trap bis er schließlich im Leitungsband des Isolators oder im Leitungsband der Akzeptor-Elektrode ankommt. Die Anzahl an

3.1 Multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT): Gleichmäßiger Trapabstand

Tunnelprozessen hängt somit von der Schichtdicke, der Trapkonzentration und von der Position des Traps ab.

Der totale Transmissionskoeffizient bestimmt sich durch Erweiterung von Gleichung [2-36] und lautet

$$D_{tot}^{-1} = \sum_{k=1}^l D_k^{-1}, \quad [3-1]$$

wobei l die Anzahl der Tunnelprozesse wiedergibt und k steht für k -ter Tunnelprozess. Hier ist zu beachten, dass die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Traps in der Gleichung [3-1] berücksichtigt ist (Vergleich Kapitel 2.2.1). Die einzelnen Transmissionskoeffizienten lassen sich gemäß der Gleichung [2-19] (Realteil) berechnen, wobei die in der Tabelle 2 angegebenen Integrationsgrenzen zu verwenden sind.

Tabelle 2: Integrationsgrenzen x_1 und x_2 aus der Gleichung [2-19] für die Transmissionskoeffizienten D_k im MSTAT-Modell.

k	x_1	x_2
1	0	y
2	y	$y+N_T^{-1/3}$
3	$y+N_T^{-1/3}$	$y+2N_T^{-1/3}$
4	$y+2N_T^{-1/3}$	$y+3N_T^{-1/3}$
n	$y+(n-2)N_T^{-1/3}$	$y+(n-1)N_T^{-1/3}$

Da der totale Transmissionskoeffizient bzw. die Integrationsgrenze der einzelnen Transmissionskoeffizienten D_k von der Trapkonzentration abhängt, erhält man für die Stromdichte eine stärkere Abhängigkeit von der Trapkonzentration als im TAT-Modell aus Kapitel 2.2.1. Dies gilt allerdings erst ab einem Dreifach-Tunnelprozess, bzw. wenn dieser gegenüber dem 2-Step-Prozess dominiert. Bei einem Zweifach-Tunnelprozess gilt $J \propto N_T$. Aufgrund der starken Abhängigkeit des MSTAT-Stromes von der Trapkonzentration ist dieses Modell sehr sensitiv gegenüber der Trapkonzentration und eignet sich deshalb zur Bestimmung der Trapkonzentration.

Da die Position des ersten Traps y zwischen 0 und $N_T^{-1/3}$ liegt, erhält man die MSTAT-Stromdichte durch Integration über alle mögliche Positionen y . Schließlich erhält man ähnlich wie Gleichung [2-37] die MSTAT-Stromdichte:

$$J_{MSTAT} = e \sigma_T N_T \int_0^{N_T^{-1/3}} dy \int_{-\infty}^{\infty} N(E_x) D_{tot}(E_x) dE_x, \quad [3-2]$$

wobei D_{tot} aus Gleichung [3-1] folgt. Bei Strukturen mit einem Isolator gibt es mit diesem TAT-Modell 5 Fitparameter: ϕ_B , m_{iso} , ε_d , N_T und σ_T , d.h. einen Fitparameter weniger als im TAT-Modell aus Kapitel 2.2.1. Dies ist die Traptiefe, die hier aufgrund der kontinuierlichen energetischen Trapverteilung, nicht als Parameter auftaucht. Dieses

Modell kann auch auf Schichtstapel mit mehreren Isolatorschichten (Vergleich Kapitel 5.1.1) und auf alle Isolatoren mit Defekten angewandt werden.

3.2 Statistisch verteilter Trapabstand

Im Folgenden wird die Stromdichte hergeleitet, welche über zufällig angeordnete Traps fließt. Diese Stromdichte wird in Kapitel 3.3 als Funktion der Trapkonzentration für verschiedene elektrische Felder im Isolator berechnet und mit dem MSTAT-Strom verglichen.

Das Problem bei der Berechnung des Stromes, welcher über zufällig angeordnete Traps fließt, liegt in der großen Anzahl an Traps, die in Proben mit den hier untersuchten Isolatorvolumina V existieren. Bei N Traps in einem Isolator gibt es $N!$ Wege für einen Ladungsträger um durch den Isolator zu tunneln. Bei einer 5nm dicken Probe mit einer Elektrodenfläche von $A=10^{-3}\text{cm}^2$ ($V=Ad=5\cdot 10^{-10}\text{cm}^3$) und einer Trapkonzentration von $N_T=10^{19}\text{cm}^{-3}$ sind $5\cdot 10^9$ Traps im Isolator. Die Anzahl der möglichen Wege, die ein Ladungsträger hat, um durch den Isolator zu tunneln ist dann praktisch unendlich ($5\cdot 10^9! \rightarrow \infty$, z.B. $10^5!=3\cdot 10^{456573}$) und somit rechnerisch nicht lösbar.

Zur Verringerung der Trapanzahl wird im Folgenden nur ein kleiner Teil des Isolators mit Volumen $v=ad$ betrachtet, wobei $V \gg v$ (siehe **Abbildung 3-1**).

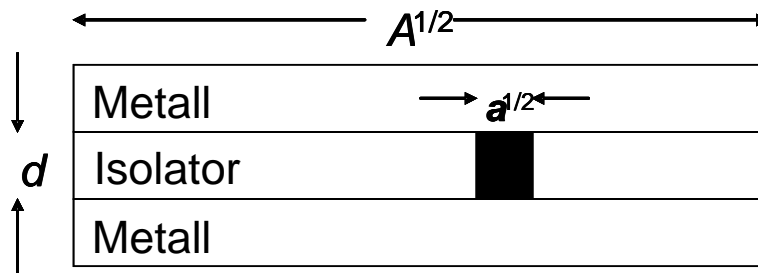


Abbildung 3-1: E/I/E-Struktur zur Darstellung des kleinen Volumens $v=ad$ (schwarze Fläche).

Die Wahrscheinlichkeit $w(n)$, genau n Traps innerhalb des Volumen v (, welches sich im Volumen V , in dem sich N Traps existieren, befindet) vorzufinden ist gegeben durch [14]:

$$w(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}, \quad p = \frac{v}{V}, \quad q = 1 - p, \quad \sum_{n=0}^N w(n) = 1, \quad [3-3]$$

wobei p bzw. q die Wahrscheinlichkeiten darstellen, dass ein bestimmtes Trap sich innerhalb bzw. außerhalb des Volumen v befindet. Sei $J(n)$ die Stromdichte, die durch den Isolator mit genau n Traps fließt, dann erhält man als Gesamtstromdichte durch den Isolator mit Volumen V :

$$J = \sum_{n=0}^N w(n)J(n) . \quad [3-4]$$

Die Summenglieder in der Gleichung [3-4] können ab einem bestimmten n' , also für $n > n'$ vernachlässigt werden, da $w(n)$ mit steigendem n (gilt nur für $n > \langle n \rangle$) stärker abfällt als $J(n)$ zunimmt.

Zur numerischen Berechnungen von $J(N_T)$ wird das Volumen v bzw. die Elektrodenfläche a so variiert, dass die Funktion $w(n)$ konstant bleibt. Damit $J(N_T)$ über mehrere Größenordnungen von N_T berechnet werden kann, muss v und nicht $\langle n \rangle$ variiert werden. Bei Variation von $\langle n \rangle$ würde auch n' variieren, wodurch für hohe Trapkonzentrationen zu viele Summenglieder in Gleichung [3-4] berücksichtigt werden müssten. Der resultierende Rechenaufwand wäre dann sehr groß.

Mit $\langle n \rangle = v \cdot N_T = a \cdot d \cdot N_T$ folgt für die Elektrodenflächen a :

$$a(N_T) = \frac{\langle n \rangle}{dN_T} . \quad [3-5]$$

Für die Stromdichte durch das kleine Volumen v mit Elektrodenfläche a , Schichtdicke d und n Traps erhält man:

$$J(n) = e \frac{\sigma}{a} \int_E N(E) D_{tot}(E, n) , \quad a \geq \sigma \quad [3-6]$$

wobei der totale Transmissionskoeffizienten D_{tot} sich analog zu Gleichung [3-1] berechnet. Der Index k beschreibt dann alle möglichen Übergänge des Ladungsträgers zwischen allen Traps. Die Anzahl aller möglichen „Tunnelwege“ ist dann $\sum_{i=0}^n (n-i)!$.

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, wird das „Tunneln“ der Ladungsträger entgegen der Richtung des elektrischen Feldes vernachlässigt. Das Tunneln entgegen dem elektrischen Feld erhöht immer die gesamte Tunneldistanz, so dass der resultierende Beitrag zum Gesamtstrom immer kleiner als der Beitrag ist, welcher sich nur durch Übergänge in Richtung des elektrischen Feldes ergibt. Eine quantitative Abschätzung zeigt, dass der totale Transmissionskoeffizient für den Übergang eines Elektrons, welches Tunnelübergänge entgegen dem elektrischen Feld vollzieht, für Trapkonzentrationen kleiner als $N_T = 10^{19} \text{cm}^{-3}$ und elektrische Feldstärken größer als $F = 1 \text{MV/cm}$ gegenüber dem Transmissionskoeffizienten für den direkten Tunnelweg vernachlässigbar ist. Diese Transmissionskoeffizienten (für direkten und indirekten Tunnelweg) wurden für Traps, welche in einem gleichschenkligen Dreieck (wie in **Abbildung 3-2 a**) dargestellt) angeordnet sind, berechnet. Diese gleichmäßige Anordnung der Traps repräsentiert den Mittelwert einer statistischen Verteilung und gibt das Verhältnis der Transmissionskoeffizienten von direktem und indirektem Übergang für statistisch verteilte Traps näherungsweise wider. In **Abbildung 3-2 b**) ist das berechnete Verhältnis der Transmissionskoeffizienten von indirektem D_{mzT} (vom mittleren Trap über linkes Trap zu rechtem Trap, siehe rote Übergänge in **Abbildung 3-2 a**) und

direktem Übergang D_{ozT} (vom mittleren Trap direkt zu rechtem Trap, blauer Übergang in **Abbildung 3-2 a**) als Funktion der elektrischen Feldstärke für die Trapkonzentrationen $N_T=10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $N_T=10^{20} \text{ cm}^{-3}$ und $N_T=10^{21} \text{ cm}^{-3}$ dargestellt. Da die Trapabstände, der im gleichschenkligen Dreieck angeordneten Traps, alle identisch sind, ergibt sich mit Gleichung [3-1] für $F=0 \text{ MV/cm}$ unabhängig von der Trapkonzentration immer $D_{mzT}/D_{ozT}=0.5$. Für elektrische Felder $F>0 \text{ MV/cm}$ hängt das Verhältnis D_{mzT}/D_{ozT} und somit der Einfluss zum Gesamtstrom von Tunnelwegen, welche Übergänge entgegen dem elektrischen Feld besitzen, vom Trapabstand bzw. von der Trapkonzentration ab. Je höher die Trapkonzentration und je kleiner das elektrische Feld ist, desto größer ist der Beitrag zum Gesamtstrom, welcher durch Tunnelprozesse mit Übergängen entgegen dem elektrischen Feld zustande kommt.

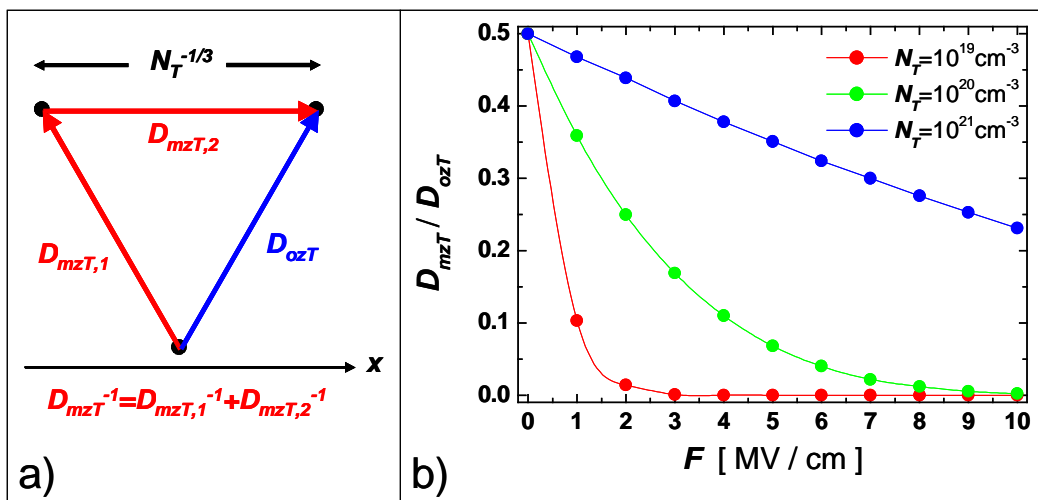


Abbildung 3-2: In a) sind die Übergänge eines Ladungsträgers zwischen drei, in einem gleichschenkligen Dreieck angeordneten Traps, dargestellt. Ausgangspunkt ist das untere Trap, von welchem es zwei mögliche Wege in das rechte Trap gibt. Der direkte Weg ohne Zurücktunnel (blau) hat den Transmissionskoeffizienten D_{ozT} , während der indirekte Weg mit Zurücktunnel (rot) durch den Transmissionskoeffizienten $D_{mzT}^{-1} = D_{mzT,1}^{-1} + D_{mzT,2}^{-1}$ charakterisiert ist. Der Abstand der Traps ist durch die Trapkonzentration $N_T^{-1/3}$ gegeben. In b) ist das Verhältnis D_{mzT}/D_{ozT} als Funktion des elektrischen Feldes (x -Richtung) für verschiedene Trapkonzentrationen dargestellt. Je größer die elektrische Feldstärke und je kleiner die Trapkonzentration ist, desto kleiner ist D_{mzT}/D_{ozT} und somit der Beitrag zum Gesamtstrom der durch Tunnelübergänge entgegen dem elektrischen Feld zustande kommt.

Durch die Näherung, dass die Ladungsträger nur in Richtung des elektrischen Feldes tunneln, verringert sich die Anzahl der möglichen „Tunnelwege“ beträchtlich (siehe **Abbildung 3-3**).

Ohne diese Näherung gibt es $\sum_{i=0}^n (n-i)!$ (ohne Berücksichtigung der

Pfade, in denen ein Elektron ein Trap zweimal passiert) und mit dieser Näherung gibt es

nur $\sum_{s=1}^n \frac{n!}{s!(n-s)!}$ mögliche „Tunnelwege“. In dieser Arbeit wurde mit maximal $n=14$

gerechnet, womit die Stromdichte für eine Trapkonzentration innerhalb von einigen Minuten berechnet werden kann. Um statistische Schwankungen bzw. den dadurch verursachten Fehler hinreichend klein zu halten, wurde der Mittelwert von 10 berechneten Werten der Stromdichte verwendet, so dass die tatsächliche Rechenzeit für

die Berechnung der Stromdichte für eine Trapkonzentration etwa 2 Stunden beträgt. Bei Nichtvernachlässigung des Tunnelns entgegen dem elektrischen Feld beträgt die Rechenzeit pro Stromdichte $12 \cdot 10^6$ Stunden (Vergleich **Abbildung 3-3**). Da diese großen Rechenzeiten nicht zu realisieren sind, muss der Fehler, den man durch Vernachlässigung des „Zurücktunnelns“ macht, in Kauf genommen werden. Dieser ist für Trapkonzentrationen kleiner als $N_T = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ vernachlässigbar, jedoch für größere Trapkonzentrationen schwierig abzuschätzen.

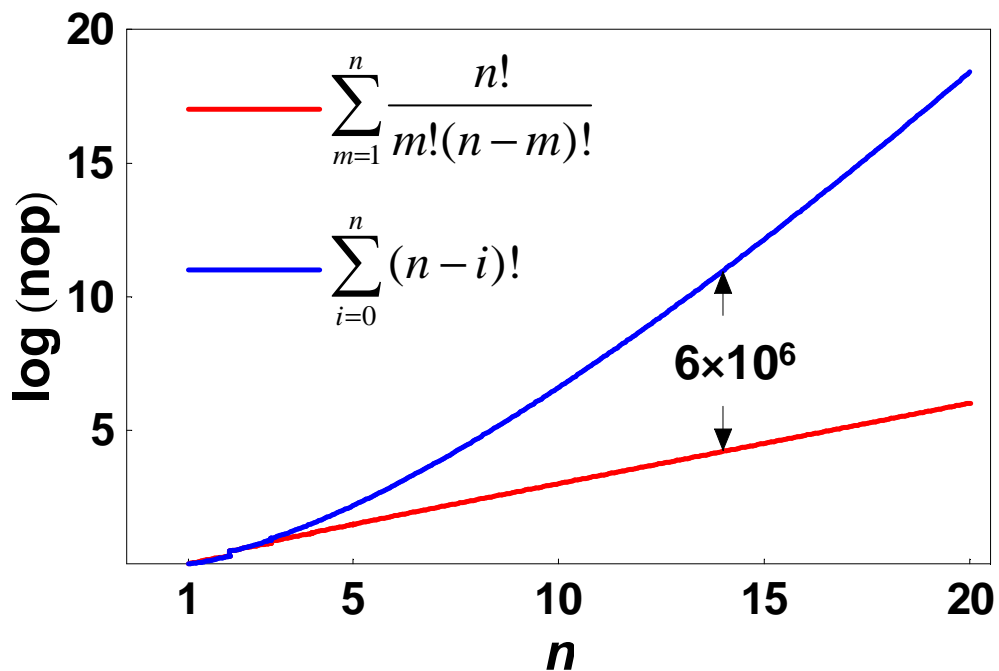


Abbildung 3-3: Anzahl der möglichen „Tunnelwege“ (nop) mit (blau) und (ohne) der Möglichkeit des Ladungsträgers entgegen dem elektrischen Feld zu tunneln als Funktion der Trapanzahl n .

Im Folgenden wird der totale Transmissionskoeffizient für den Tunnelstrom über statistisch verteilte Traps bei Vernachlässigung des „Zurücktunnelns“ hergeleitet. Dabei ist x die Richtung normal zur Elektrode/Isolator-Grenzfläche mit $x=0$ an der Grenzfläche und $\vec{x} = (x_i, y_i, z_i)$ der Ort des Traps i .

Vernachlässigt man das Tunneln der Ladungsträger entgegen dem elektrischen Feld im Isolator und ordnet die Traps der Größe nach bezüglich ihres Abstandes von der emittierenden Elektrode x_i , so dass $x_i < x_{i+1}$ ist, dann erhält man für D_{tot} :

$$\begin{aligned}
 D_{s=2}^{-1} &= \sum_{i=1}^n (D_{0 \rightarrow i}^{-1} + D_{i \rightarrow d}^{-1}) \\
 D_{s=3}^{-1} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (D_{0 \rightarrow i}^{-1} + D_{i \rightarrow j}^{-1} + D_{j \rightarrow d}^{-1}) \\
 D_{s=4}^{-1} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \sum_{k=j+1}^n (D_{0 \rightarrow i}^{-1} + D_{i \rightarrow j}^{-1} + D_{j \rightarrow k}^{-1} + D_{k \rightarrow d}^{-1}) \\
 &\vdots \\
 D_{s=n+1}^{-1} &= \sum_{i=0}^{n-1} D_{i \rightarrow i+1}^{-1} + D_{n \rightarrow d}^{-1}
 \end{aligned}
 \tag{3-7}$$

$$D_{tot} = \sum_{s=2}^{n+1} D_s$$

Hier beschreibt D_s den Transmissionskoeffizienten für einen s -step Prozess. $D_{s=2}$ beschreibt den Transmissionskoeffizienten eines Ladungsträgers, welcher aus der emittierenden Elektrode über das Trap i in die Akzeptor-Elektrode tunnelt. Bei einem 3-step Prozess erhält man einen zusätzlichen Übergang des Elektrons von Trap i zu Trap j . Der Transmissionskoeffizient $D_{s=n+1}$ beschreibt den Prozess, bei dem der Ladungsträger von der emittierenden Elektrode über alle Traps in die Akzeptor-Elektrode tunnelt. Der totale Transmissionskoeffizient für den Gesamtstrom D_{tot} ist die Summe der Transmissionskoeffizienten aller möglichen Wege (Tunneln entgegen dem elektrischen Feld ausgeschlossen).

In **Abbildung 3-4** sind die einzelnen Transmissionskoeffizienten und möglichen „Tunnelwege“ für $n=3$ dargestellt.

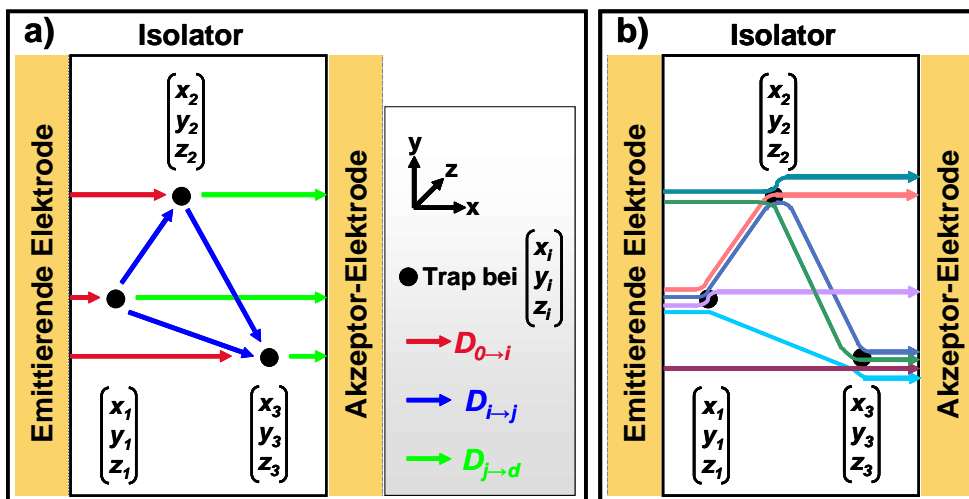


Abbildung 3-4: E/I/E-Strukturen mit 3 Traps an den Orten (x_i, y_i, z_i) , $i=1, 2, 3$ im Isolator. In a) sind die einzelnen Transmissionskoeffizienten (rot: emittierende Elektrode \rightarrow Trap i , blau: Trap $i \rightarrow$ Trap j , grün: Trap $j \rightarrow$ Akzeptor-Elektrode) dargestellt. In b) sind alle möglichen „Tunnelwege“ des Ladungsträgers, wenn nur das „Tunneln“ in Richtung des elektrischen Feldes berücksichtigt wird, dargestellt.

Die einzelnen Transmissionskoeffizienten aus Gleichung [3-7] berechnen sich wie folgt:

$$\begin{aligned}
 eV_{iso} &= -eFx - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_d x} \\
 D_{0 \rightarrow i} &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{eff}}}{\hbar} \int_0^{x_i} \sqrt{eV_{iso} - E} dx\right), \\
 D_{i \rightarrow j} &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{eff}}}{\hbar} \int_0^{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} \sqrt{-eFx_i - eFx \frac{x_j - x_i}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_d x} - E} dx\right), \quad [3-8] \\
 D_{j \rightarrow d} &= \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m_{eff}}}{\hbar} \int_{x_j}^d \sqrt{eV_{iso} - E} dx\right).
 \end{aligned}$$

Hier ist zu beachten, dass für den Transmissionskoeffizient für den Übergang zwischen zwei Traps ($D_{i \rightarrow j}$) alle drei Raumrichtungen berücksichtigt werden müssen.

3.3 Multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT): Vergleich von gleichmäßiger und statistischer Trapverteilung

In diesem Kapitel wird die Stromdichte als Funktion der Trapkonzentration für verschiedene elektrische Felder im Isolator berechnet. Die Berechnung wird sowohl für eine gleichmäßige, räumliche Trapverteilung (MSTAT-Modell, Kapitel 3.1) als auch für zufällig angeordnete Traps (Kapitel 3.2) durchgeführt. Der Vergleich dieser beiden Methoden liefert den Einblick in den Einfluss der örtlichen Verteilung von Traps. Dieser wurde bisher noch nie untersucht. Da die tatsächliche räumliche Verteilung der Traps im Allgemeinen nicht bekannt ist, ist es absolut notwendig, den Einfluss der örtlichen Verteilung der Traps auf das Leckstromverhalten zu untersuchen.

Die Berechnung wird für eine Al/Al₂O₃/Al-Struktur durchgeführt, wobei die „tunnelrelevanten“, physikalischen Parameter der Al₂O₃-Schicht aus [15] bzw. aus Kapitel 5.1.1 benutzt werden. In [15] bzw. in Kapitel 5.1.1 wird der Leckstrom durch eine Al/Al₂O₃/SiO₂/p-Si-Struktur mit dem MSTAT-Modell simuliert. Die Al/Al₂O₃-Barriere von 2.4eV, die effektive Elektronenmasse in Al₂O₃ von 0.28m₀ und die dynamische Dielektrizitätskonstante (zur Bestimmung des Bildladungseffektes an der Al/Al₂O₃-Grenzfläche) von 1.8, die in [15] und in Kapitel 5.1.1 verwendet wurden, werden hier übernommen.

Bei der Berechnung der Stromdichte für zufällig angeordnete Traps wird $\langle n \rangle = 6$ verwendet (Vergleich Kapitel 3.2), so dass die Summenglieder aus Gleichung [3-4] für $n > n' = 14$ vernachlässigt werden können, da für das Verhältnis der gewichteten gemittelten Stromdichten (bei $n=9$ ist diese maximal) gilt:

$$\frac{w(n=15, p=6 \cdot 10^{-5}, N=10^5) \cdot \langle J \rangle (n=15)}{w(n=9, p=6 \cdot 10^{-5}, N=10^5) \cdot \langle J \rangle (n=9)} < 0.1.$$

Außerdem würde sich mit $n=15$ im Vergleich zu $n=14$ die Rechenzeit verdoppeln, da näherungsweise gilt:

$$\sum_{s=1}^{15} \frac{15!}{s!(15-s)!} / \sum_{s=1}^{14} \frac{14!}{s!(14-s)!} \approx 2.$$

In **Abbildung 3-5** sind die Stromdichten über gleichmäßig und statistisch verteilte Traps in der Al_2O_3 -Schicht als Funktion der Trapkonzentration für verschiedene elektrische Felder dargestellt. Allerdings ist der Strom, der über die zufällig angeordneten Traps fließt, um einen Faktor 2 in Richtung der Trapkonzentration verschoben, d.h., er wurde für $2N_T$ berechnet, da der Strom über zufällig angeordnete Traps etwas größer als der MSTAT-Strom ist.

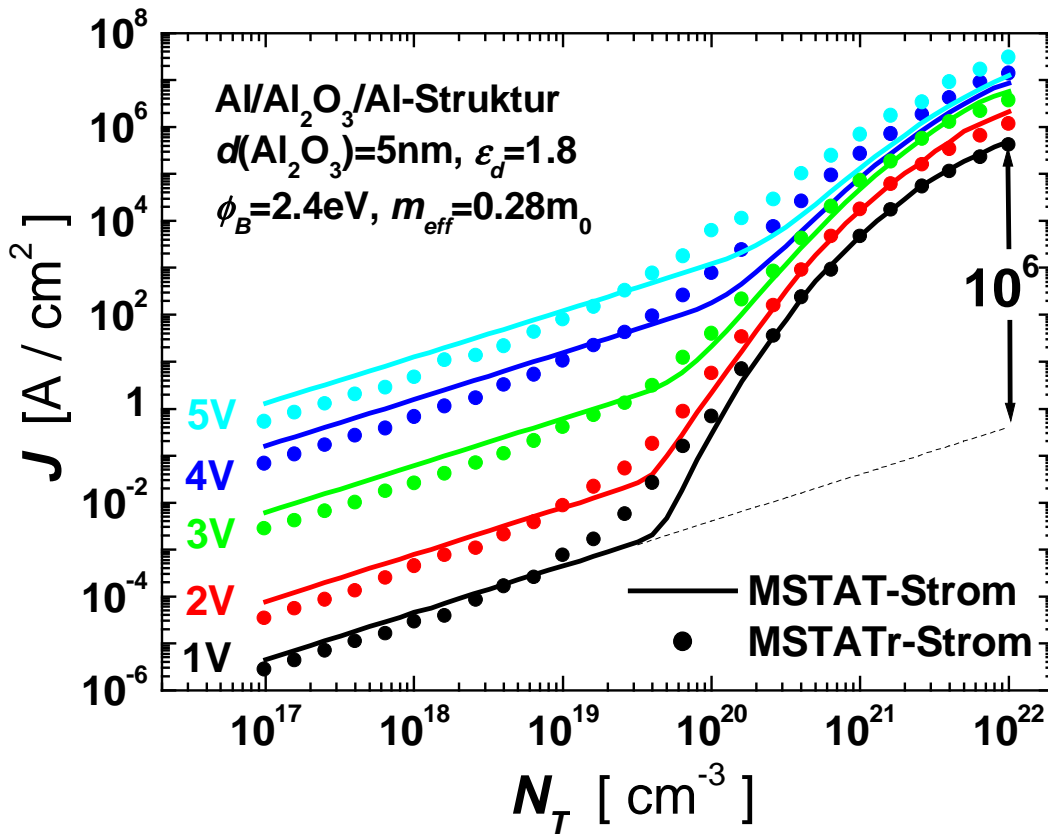


Abbildung 3-5: MSTAT-Stromdichte (Linien) und die Stromdichte via zufällig angeordneter Traps (MSTATr-Strom, Punkte) als Funktion der Trapkonzentration für verschiedene elektrische Felder ($2 \text{MV/cm} < F < 10 \text{MV/cm}$). Die Berechnungen wurden für eine $\text{Al/Al}_2\text{O}_3/\text{Al}$ -Struktur mit $d(\text{Al}_2\text{O}_3) = 5 \text{nm}$, $\phi_B = 2.4 \text{V}$, $m_{\text{eff}} = 0.28m_0$ und $\epsilon_d = 1.8$ durchgeführt. Die gestrichelte schwarze Linie gibt die Stromdichte an, wenn nur 2-Step-Prozesse betrachtet werden. Der dadurch verursachte Fehler liefert in diesem Beispiel bei $N_T = 10^{22} \text{cm}^{-3}$ eine Stromdichte, die um einen Faktor 10^6 kleiner ist als die MSTAT-Stromdichte.

Man erhält gute Übereinstimmung zwischen dem MSTAT-Strom für Trapkonzentration zwischen $10^{17} \text{cm}^{-3} < N_T < 10^{22} \text{cm}^{-3}$ und dem Strom, der über die zufällig angeordneten Traps fließt, bei der doppelten Trapkonzentration $2N_T$. Dies zeigt, dass die Näherung

3.3 Vergleich von gleichmäßiger und statistischer Trapverteilung

der gleichmäßig angeordneten Traps, welche beim MSTAT-Modell gemacht wird, qualitativ das richtige Ergebnis liefert. Sowohl der MSTAT-Strom als auch der Strom über zufällig angeordnete Traps ist für kleine Trapkonzentrationen proportional zur Trapkonzentration. Bei größeren Trapkonzentrationen hängen die beiden Ströme stärker als linear von der Trapkonzentration ab. Der Übergang vom linearen zum nichtlinearen Bereich erfolgt bei beiden Strömen bei derselben Trapkonzentration. Allerdings ist dieser Übergang für den MSTAT-Strom abrupter als für den Strom über zufällig angeordnete Traps. Im MSTAT-Modell erfolgt dieser Übergang genau bei der Trapkonzentration, bei welcher der 3-Step-Prozess gegenüber dem 2-Step-Prozess dominiert (Vergleich Kapitel 3.1), weswegen der Übergang abrupt erfolgt.

Betrachtet man nur 2-Step-Prozesse erhält man für hohe Trapkonzentrationen einen deutlich kleineren Strom. Für $F=2\text{MV/cm}$ ist dies in **Abbildung 3-5** dargestellt (gestrichelte Linie). Bei $N_T=10^{22}\text{cm}^{-3}$ ist diese Stromdichte um einen Faktor 10^6 kleiner als die MSTAT-Stromdichte. Dies zeigt, dass die bisher bekannten TAT-Modelle, die allesamt nur 2-Step-Prozesse beinhalten, bei hohen Trapkonzentrationen den Leckstrom nicht mehr korrekt beschreiben können.

Bei denselben Trapkonzentrationen ist der Strom über zufällig angeordnete Traps etwas größer als der MSTAT-Strom. Dies ergibt sich aus der endlichen Wahrscheinlichkeit, dass die zufällig angeordneten Traps sich in einem kleinen Teilvolumen von dem Volumen v konzentrieren, wodurch sich ein Leckstrompfad (hoher totaler Transmissionskoeffizient) bilden kann.

Die (kleinen) Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beiden Methoden können allerdings aufgrund anderer Unsicherheiten wie Barrierenhöhe und effektive Elektronenmasse vernachlässigt werden. Das MSTAT-Modell wird durch die gute Übereinstimmung zwischen den beiden Strömen eher bestätigt. Aufgrund des großen Rechenaufwandes, welcher mit der Berechnung des Stromes über zufällig angeordnete Traps verbunden ist, ist das MSTAT-Modell geeigneter, um Leckströme in „traphaltigen“ Isolatoren zu simulieren.

Die in Kapitel 2 und 3 dargestellten Modelle zur Leckstromsimulation durch Isolatoren werden im Kapitel 5 auf verschiedene Isolatoren angewandt. Im nächsten Kapitel wird die Messtechnik beschrieben, mit der die Leckströme gemessen werden.

4 Messtechnik

Im Folgenden werden die Anforderungen an die Messtechnik und der im Rahmen dieser Doktorarbeit verwendete Messaufbau diskutiert.

Die Trennung von reinem Leckstrom, dem Relaxationsstrom und dem Strom, der aus Trapping-Effekten resultiert, stellt hohe Anforderungen an die Messtechnik. Um den Relaxationsstrom bei der Messung auszuschließen, muss man an jedem Messpunkt solange warten, bis der Relaxationsstrom soweit abgeklungen ist (Vergleich Gleichung [2-52]), dass er gegenüber dem reinen Leckstrom vernachlässigbar ist. Das Problem hierbei ist, dass man sehr lange messen muss und die untere Messgrenze des Elektrometers erreicht (Kapitel 2.3.1). Bei höheren Spannungen treten die Trapping-Effekte auf, die Einfluss auf das elektrische Feld im Isolator haben (Vergleich Kapitel 2.3.2) und somit den reinen Leckstrom modifizieren. Da die Anzahl getrappter Ladungen mit der Messzeit zunimmt, sollte man hier so schnell wie möglich messen. Außerdem hängt die Durchbruchzeit eines Isolators von der durchgeflossenen Ladung ab, so dass bei schnelleren Messungen die Durchbruchspannung und somit der Messbereich steigt.

In der überwiegenden Zahl von Messungen bzw. Veröffentlichungen wird die Messung von $I(V)$ -Kurven mit einem Agilent 4156 Parameter-Analyzer durchgeführt. Mit den im Parameter-Analyzer eingebauten Messfunktionen wird die Spannung stufenförmig hochgesweept, wobei nach jeder Stufe eine einstellbare „Delayzeit“ gewartet wird, bis der Strom gemessen wird. Um den Relaxationsstrom auszublenden wird diese Delayzeit auf typische 1s bis 10s und die Zahl der Stufen üblicherweise auf 20 bis 50 eingestellt.

Dieses Verfahren hat folgende gravierende Fehler und Nachteile:

1) Ein typischer Relaxationsstrom (bei 1nF und 1V Spannungssprung) klingt größenordnungsmäßig mit 5pAs/t ab. Für sehr kleine echte Leckströme von 1fA muss also 5000s gewartet werden, bis der echte Leckstrom gegenüber dem Relaxationsstrom dominiert. Eine Wartezeit von 10s ist viel zu kurz. Die Folge ist, dass die $I(V)$ -Kurve im Bereich kleiner Spannung einen konstanten Strom vortäuscht, der unter Umständen um viele Größenordnungen (im obigen Beispiel um Faktor 500) größer ist als der echte Leckstrom.

2) Im Bereich mittlerer Ströme (10^{-8}A) ist der Relaxationsstrom innerhalb von 0.5ms auf Werte unterhalb des Leckstroms abgesunken. Eine Delayzeit von 1s oder größer ist also sinnlos und erhöht unnötig die Gesamtmesszeit. Außerdem wird durch den Strom eventuell Ladung im Isolator getrappt, die über ein internes elektrisches Feld die Messung verfälscht (im Allgemeinen wird die $I(V)$ -Kurve dadurch verschoben) (siehe Kapitel 2.3.2). Bei $I=10^{-8}\text{A}$ bzw. $J=10^{-5}\text{A/cm}^2$ und der Annahme, dass alle Ladungsträger getrappt werden erhält man nach $t=0.01\text{s}$ eine Verschiebung des elektrischen Feldes um $\Delta F=0.1\text{MV/cm}$ (Vergleich **Abbildung 2-14**). Mit einer Delayzeit von 1s würde sich also das elektrische Feld um 10MV/cm verschieben!

3) Im Bereich sehr hoher Ströme (1mA) bewirkt eine Delayzeit von 1s oder 10s eine Degradation des Isolators und/oder einen elektrischen Durchbruch. Ströme von 1mA können problemlos in einer Zeit kleiner als 1 μs gemessen werden. Bei 1 μs Messzeit ist

die Zeit zum Durchbruch um einen Faktor 10^6 länger als bei 1s oder andersherum die höchste erreichbare Feldstärke etwa 3-6MV/cm höher.

Die oben genannten Nachteile 1) bis 3) erforderten die Entwicklung einer neuen Messmethode, die diese Nachteile wie folgt umgeht:

Bei 1): Die Wartezeit wird in Abhängigkeit der Spannung so gewählt, bis der Relaxationsstrom soweit abgeklungen ist, dass der echte Leckstrom dominiert. Dazu muss die Zeitabhängigkeit gemessen werden, damit die Relaxationsstromkonstante A_{relax} (Vergleich Gleichung [2-52]) und der reine Leckstrom bestimmt werden können. Hieraus lässt sich dann die minimale (bis Relaxationsstrom vernachlässigt werden kann) Messzeit bestimmen.

Bei 2 und 3): Die Messung wird so schnell wie möglich durchgeführt, was im Allgemeinen nicht durch die Probe sondern durch die Strom-Messung, die Settlingtime der Spannungsquelle und die parasitären Kapazitäten begrenzt ist. Die schnellste Messzeit bei dem Parameter-Analyzer von Agilent 4156 ist größer als 0.1s und somit deutlich zu langsam.

Der praktische Aufbau, der die o.g. Anforderungen erfüllt, ist in **Abbildung 4-1** skizziert. Kernstück des Aufbaus ist ein sowohl schneller als auch empfindlicher Elektrometerverstärker (*I-to-V Wandler*), der in [16] ausführlich beschrieben wird.

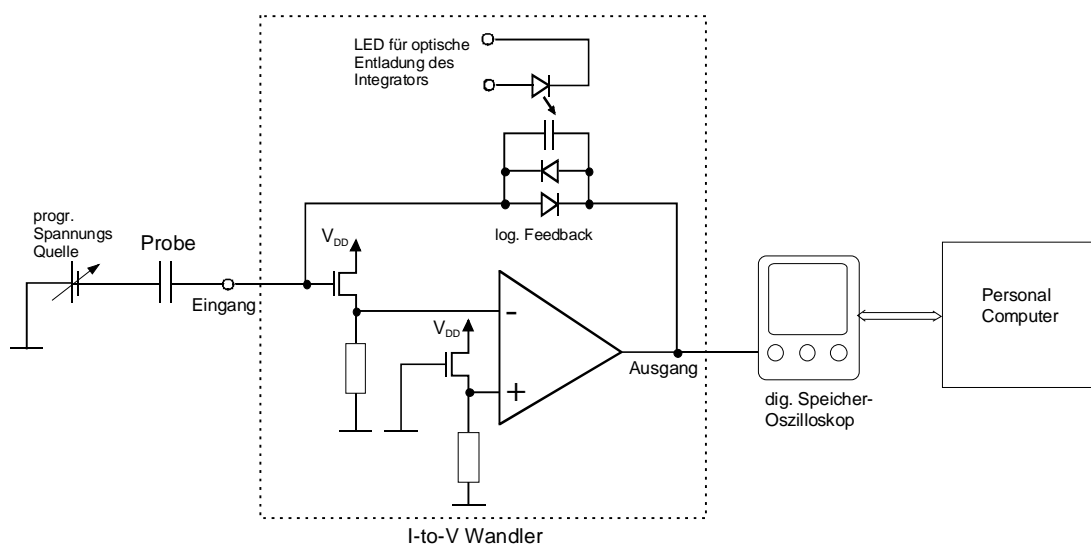


Abbildung 4-1: Vereinfachtes elektrisches Schaltbild des Messaufbaus, welcher über einen PC angesteuert wird.

Die Steuerung über einen PC erlaubt die oben beschriebene Einstellung der Delays nach Anlegen von Spannungsstufen, die je nach stationärem Leckstrom und Relaxationsstrom optimal bestimmt werden. Ein Speicheroszilloskop als AD-Wandler ermöglicht praktisch beliebig schnelle Wandlungszeiten.

5 Messergebnisse und Simulation

In diesem Abschnitt wird die elektrische Charakterisierung verschiedener Dielektrika und deren Modellierung vorgestellt. Im Mittelpunkt stehen das MSTAT-Modell und die kritische Gegenüberstellung von dem Tunnel- und PF-Mechanismus.

5.1 Aluminiumoxid (Al_2O_3)

Aluminiumoxid ist das in dieser Arbeit am ausführlichsten untersuchte Material. Die mit dem chemical vapor deposition (CVD) Verfahren abgeschiedenen Al_2O_3 -Schichten wurden an der Universität der Bundeswehr München hergestellt, während die mit dem atomic layer deposition (ALD) Verfahren abgeschiedenen Schichten von Infineon in Dresden hergestellt wurden. Hier ist noch zu beachten, dass die hier untersuchten Schichten mit Al_2O_3 als Isolator immer ein Silizium Substrat besitzen, weswegen immer eine zusätzliche Isolatorschicht in den Strukturen vorkommt. Falls vor der Al_2O_3 -Abscheidung das Silizium nicht nitridiert wurde, bildet sich während der Al_2O_3 -Abscheidung bzw. bei einem post-Anneal eine SiO_x -Schicht an der $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$ -Grenzfläche.

5.1.1 Chemical vapor deposition (CVD)- Al_2O_3

Die in diesem Kapitel vorgestellten Messungen und Rechnungen wurden in [15] veröffentlicht. Um die Vielzahl an Parametern eindeutig bestimmen zu können, wurden neun verschiedene Proben untersucht, die sich nur hinsichtlich ihrer Isolatorschichtdicken und Gate-Elektroden (emittierende Elektrode) unterscheiden.

5.1.1.1 Physikalische Untersuchungen

Auf einem p-Substrat (Dotierung $p \approx 10^{15}/\text{cm}^3$) wurden mittels des CVD-Verfahrens drei unterschiedlich dicke Al_2O_3 -Schichten abgeschiedenen. Diese wurden anschließend bei 630°C in NH_3 getempert, wobei sich zwischen Substrat und Al_2O_3 eine SiO_x -Schicht gebildet hat. Dies folgt aus X-ray photoemission spectroscopy (XPS)-Messungen (**Abbildung 5-1**). Die auftretenden Peaks werden mit der jeweiligen chemischen Verbindung und einem Literaturvergleich in **Tabelle 3** aufgeführt. Um mit XPS-Messungen ein Tiefenprofil zu erstellen, muss man während die Oberfläche abgetragen wird XPS-Messungen durchführen. Die Oberfläche wurde hier abgesputtert mit einer Rate von ca. $4 \cdot 10^{-11} \text{m}/\text{min}$. Ohne jegliches Absputtern der Oberfläche erhält man ein Kohlenstoff-Peak, der allerdings schon nach 10 Minuten Sputtern nicht mehr existiert. Bei längerer Sputterzeit nehmen die Peaks Al 2p und Al 2s ab, während die Peaks Si 2p

(für SiO_x) und Si 2s (für SiO_x) zunehmen. Das bedeutet, dass unter der Al_2O_3 -Schicht eine SiO_x -Schicht liegt, die eben erst nach längerer Abtragung der Al_2O_3 -Schicht in der XPS-Messung bemerkbar wird. Die Dicken der Al_2O_3 - und der SiO_2 -Schicht (siehe **Tabelle 4**) wurden mit Hilfe von transmission electron microscopy (TEM) Aufnahmen bestimmt, was am Beispiel von Probe 2 in **Abbildung 5-2** dargestellt ist. Diese Dicken stimmen mit den gemessenen Kapazitäten ($\epsilon_{CVD-Al_2O_3}=8$, $\epsilon_{SiO_x}=3.9$) gut überein. Die dunklen Stellen in den TEM-Aufnahmen der dickeren Proben 1 und 2 weisen auf Kristallite hin (Beispiel in **Abbildung 5-3**), welche allerdings bei den TEM-Aufnahmen der dünneren Probe 3 nicht zu sehen sind. Dies lässt den Schluss zu, dass die Struktur der Proben 1 und 2 polykristallin ist und die Struktur der Probe 3 eher amorph ist.

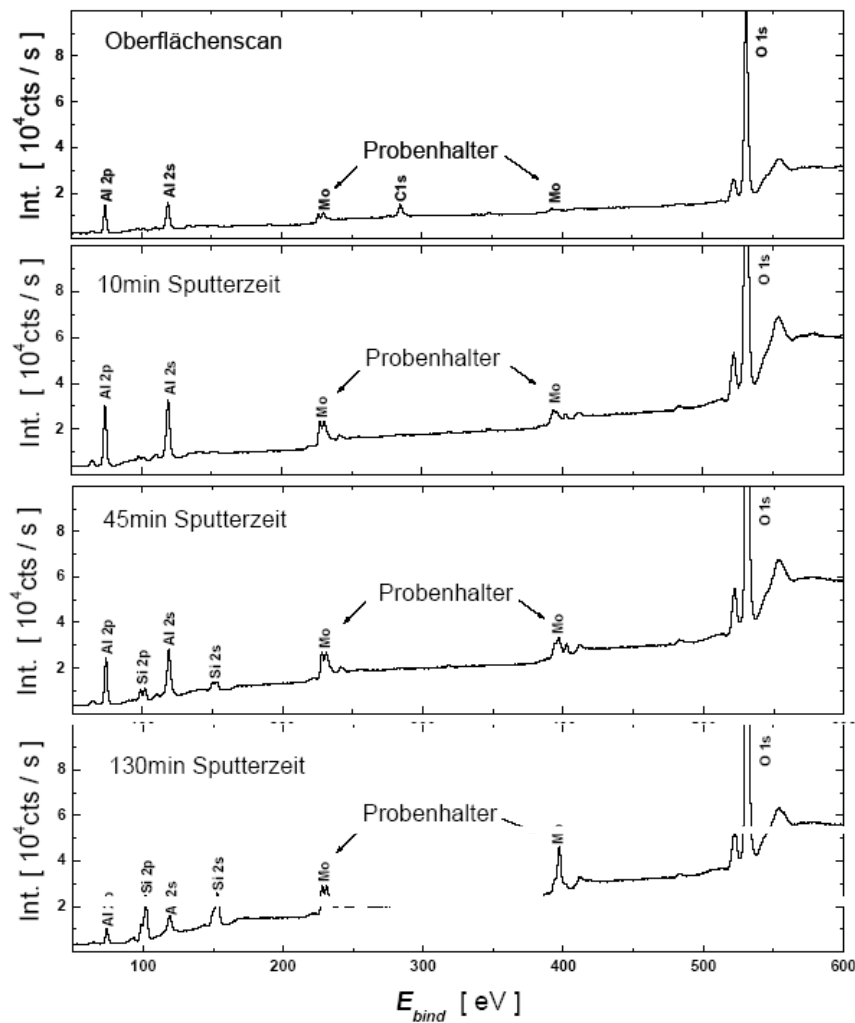


Abbildung 5-1: Zählerintensität bei XPS-Messungen als Funktion der Bindungsenergien. Die Eindringtiefe von XPS-Messungen beträgt einige nm, so dass ein Wegsputtern der Oberfläche und *in situ* XPS-Messungen ein Tiefenprofil der untersuchten Probe liefert. Mit einer Sputterrate von ca. $4 \cdot 10^{-11}$ m/min wurde bis ca. 5.4 nm (max. Sputterzeit 130 min) weggesputtert. Die Peaks Si 2p und Si 2s, welche zu SiO_x gehören, werden mit steigender Sputterzeit größer, während die Peaks Al 2p und Al 2s (aufgrund von Al_2O_3) mit steigender Sputterzeit abnehmen. Dies beweist die Existenz des Al_2O_3/SiO_x -Schichtstapels in den Proben.

Tabelle 3: Lage der Peaks von den XPS-Messungen an einer typischen CVD- Al_2O_3 Probe. Die zu den Peaks gehörigen chemischen Verbindung mit Literaturvergleich sind auch eingetragen.

Peak	Lage [eV]	Chemische Verbindung	Referenz (Lage [eV])
Al 2p	74.3	Al_2O_3	[17] (74.3)
Si 2p	99	Si	[18] (98.7)
Si 2p	102	SiO_x	[19] (101.9)
Al 2s	119	Al_2O_3	[20] (119)
Si 2s	153.2	Si/ SiO_x	[21] (153.9)
O 1s	531.5	Al_2O_3	[22] (531)

Tabelle 4: Splitplan der CVD- Al_2O_3 -Proben mit unterschiedlichen Al_2O_3 - und SiO_2 -Schichtdicken, welche durch TEM-Aufnahmen ermittelt wurden.

Probe	$d(\text{Al}_2\text{O}_3)$ [nm]	$d(\text{SiO}_2)$ [nm]
1	7.3	1.6
2	5.7	1.5
3	2.9	2.2

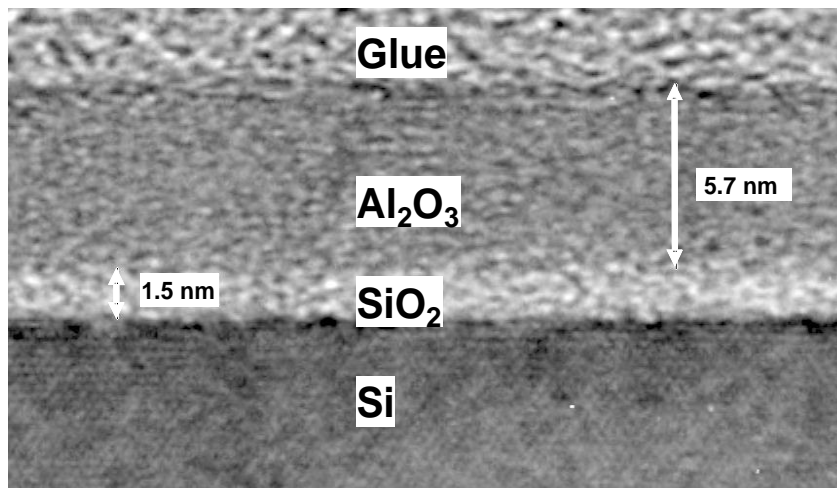


Abbildung 5-2: TEM-Aufnahme der Probe 2 zur Dickenbestimmung der Al_2O_3 - und SiO_2 -Schicht.

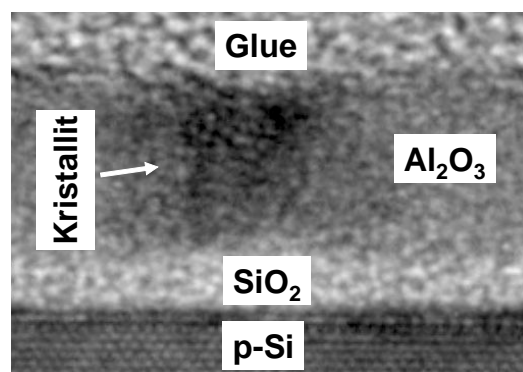


Abbildung 5-3: TEM-Aufnahme von Probe 2 mit dunklem Kontrast, welcher ein Kristallit darstellt.

5.1.1.2 $J(V)$ -Charakteristik der Proben mit Al-Elektrode

Die $J(V)$ -Charakteristik wurde mit dem in Kapitel 4 beschriebenen Verfahren gemessen. Die Temperaturabhängigkeiten der Leckströme wurden für $T < 295K$ an einem closed-cycle refrigerator und für $T > 295K$ an einem Thermo-Chuck gemessen. Dabei wurde bei jeder Spannung die Temperatur variiert. Die $J(V)$ -Messung deckt einen Bereich von über 12 Größenordnungen im Strom und reicht von $T=42K$ bis $T=420K$. Bei höheren Temperaturen verändert sich die Probe aufgrund des Temperaturstress, weswegen keine Messungen bei höheren Temperaturen durchgeführt wurden. Aufgrund der fehlenden negativen Ladungsträger (bei positiven Gate-Spannungen) im p-Substrat wurde nur bei negativer Polarität gemessen. Die Trapping-Effekte können vernachlässigt werden, da die Messungen zeigen, dass der Strom zeitunabhängig ist.

Die Berechnungen der Leckströme wurden mit dem im Kapitel 3.1 vorgestellten MSTAT Modell durchgeführt, wobei dies nur für die Proben mit Aluminium-Elektrode durchgeführt wurde, da bei den anderen Elektroden (Au und Pt) die Löcherleitung dominiert (wird noch gezeigt). Bei den Berechnungen wurde die Bandverbiegung des Substrats an der Oberfläche nur bei Verarmung berücksichtigt. Hierzu wurde der klassische Ansatz, wie er in [23] Kapitel 8.2.3 beschrieben ist, verwendet. Bei p-Akkumulation ist die Bandverbiegung wegen der höheren Masse der Löcher nur ca. 1/3 von der in n-Akkumulation (siehe Kapitel 5.1.2.1) und kann daher vernachlässigt werden. Außerdem wurden Oberflächenzustände des p-Si Substrats bei einer Energie von 0.2eV unter dem Leitungsband angenommen, in welche die Elektronen der Al-Elektrode tunneln können. Diese Annahme beeinflusst das Leckstromverhalten nur für angelegte Gate-Spannungen, welche kleiner als die Flachband-Spannung sind. Die gemessene und die, mit dem MSTAT-Modell berechnete $J(V)$ -Charakteristik ist in **Abbildung 5-4** dargestellt. Der MSTAT-Strom stimmt nahezu perfekt mit den experimentellen Daten für alle drei Proben überein. Die Abweichungen für Spannungen unterhalb der Flachbandspannung sind auf die klassische Behandlung der Bandverbiegung zurückzuführen. Zusätzlich ist der Tunnelstrom, der ohne Traps fließt, eingezeichnet. Dieser dominiert gegenüber dem MSTAT-Strom für alle drei Proben genau bei der angelegten Gate-Spannung, bei welcher der elektrische Durchbruch der Proben erfolgt. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Steigung des Tunnelstromes ohne Traps größer ist als der MSTAT-Strom, so dass beim Übergang von Tunneln ohne Traps zu MSTAT der Strom abrupt ansteigt. Dieser Steigungsanstieg führt dann zum elektrischen Durchbruch.

Die nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Experiment und dem MSTAT-Modell für alle drei Proben mit verschiedenen Isolatorschichtdicken über 12 Größenordnungen im Leckstrom (größter bisher berichteter Messbereich) untermauern das MSTAT-Modell bzw. dessen Anwendbarkeit auf high-k Dielektrika. Außerdem wurde das MSTAT-Modell bei einer MIM-Struktur mit Ta_2O_5 als Isolator (siehe Kapitel 5.2) und bei einer Nb/SiO₂/p-Si Struktur (siehe Kapitel 5.4) erfolgreich angewandt. Auch die Tatsache, dass die gemessenen Leckströme über den ganzen Bereich von 12 Größenordnungen durch einen einzigen Leitungsmechanismus beschrieben werden kann, bestätigt das MSTAT-Modell. In anderen Veröffentlichungen ([6] und [9]) werden oft die Strom-Spannungskennlinien in verschiedene Bereiche aufgeteilt, in

denen unterschiedliche Leitungsmechanismen deklariert werden. Da in den anderen Arbeiten der Leckstrom nur über 8 Größenordnungen gemessen wird und dieser Bereich für die verschiedenen Leitungsmechanismen noch aufgeteilt wird, sind es nur wenige Größenordnungen im Leckstrom, die einem Leitungsmechanismus zugeschrieben werden. Eine Berechnung des Leckstromes über so wenige Größenordnungen ist nicht eindeutig. Dadurch führen verschiedene Parameter auf das gleiche Ergebnis oder verschiedene Modelle beschreiben denselben Leckstrom. Auch für Proben mit unterschiedlichen Isolatorschichtdicken fittet der MSTAT-Strom perfekt die $J(V)$ -Charakteristik über den gesamten Messbereich von ganzen 12 Größenordnungen. Diese Tatsache beweist, dass das MSTAT-Modell im Gegensatz zu den bisher berichteten Leitungsmechanismen die einzig korrekte Beschreibung des Leckstromverhaltens in Isolatoren, welche Traps in der Bandlücke besitzen, ist.

Das berechnete Banddiagramm von Probe 2 für die verwendeten Parameter (Tabelle 5) ist in Abbildung 5-5 dargestellt. Die Traps für eine bestimmte Position y des ersten Traps sind eingezeichnet. Der Bildladungseffekt an der Akzeptor-Elektrode ist wie bei der Berechnung der $J(V)$ -Charakteristik vernachlässigt.

Tabelle 5: Die für die Berechnungen (MSTAT und Tunneln ohne Traps) der Leckströme der CVD- Al_2O_3 -Proben verwendeten Parameter (siehe Abbildung 5-4).

V_{fb}	N_T	m_{ox}	$e\phi_B(\text{Al}_2\text{O}_3)$	$\delta E_{CB}(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_x)$	ϵ_d	σ_T
-0.85V	$1.3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$0.28m_0$	2.4eV	0.1eV	1.8	$1.4 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$

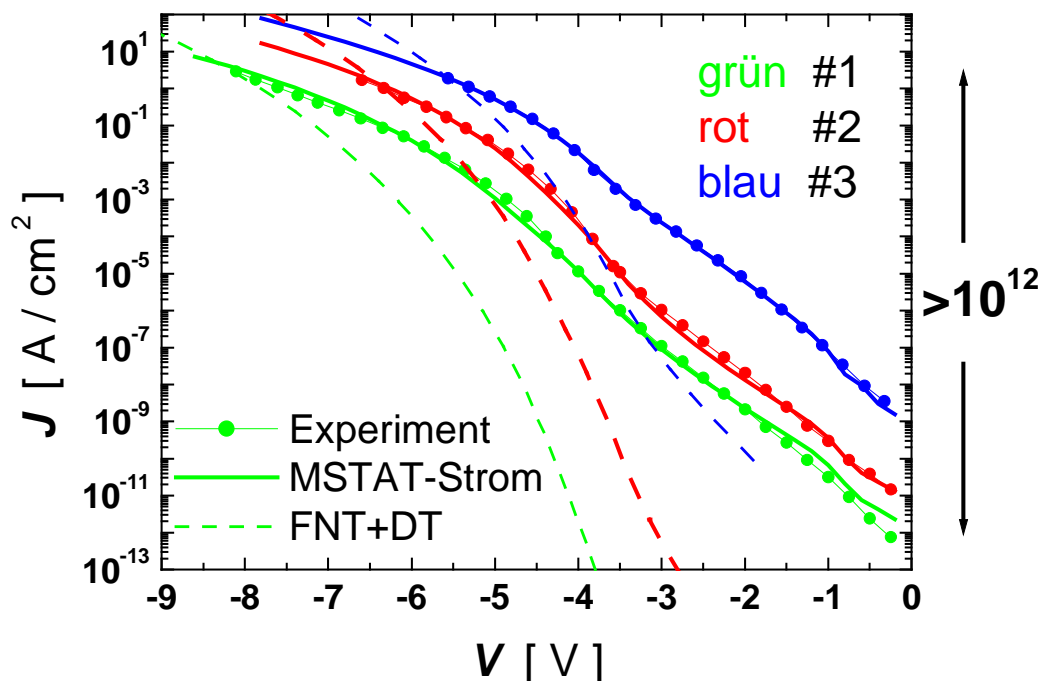


Abbildung 5-4: Experiment (Punkt-Linie), MSTAT (Linie, berechnet) und Tunneln ohne Traps (Striche, berechnet) bezüglich der $J(V)$ -Daten (über 12 Größenordnungen) der CVD- Al_2O_3 Proben 1 (grün), 2 (rot) und 3 (blau). Der berechnete Tunnelstrom ohne Traps dominiert gegenüber dem MSTAT-Strom genau ab der Gate-Spannung, bei welcher der elektrische Durchbruch stattfindet.

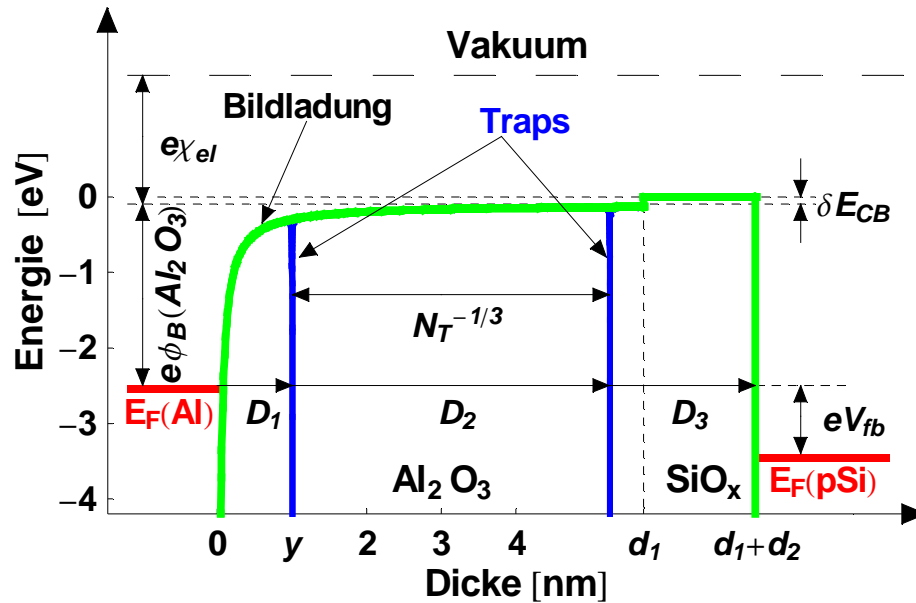


Abbildung 5-5: Berechnetes Banddiagramm von Probe 2 bei angelegter Flachbandspannung. Die Traps sind hier für eine bestimmte Position des ersten Traps y blau dargestellt, wobei die Transmissionskoeffizienten den Weg der Elektronen beschreiben. Der Bildladungseffekt an der Akzeptor-Elektrode ist hier vernachlässigt.

5.1.1.3 Diskussion der verwendeten Parameter

Die verwendete Al/ Al_2O_3 -Barriere von $e\phi_B(\text{Al}_2\text{O}_3)=2.4\text{eV}$ entspricht einer Elektronenaffinität des Al_2O_3 von $e\chi_{el}(\text{Al}_2\text{O}_3)=1.7\text{eV}$. Die Literaturwerte der Elektronenaffinität weichen stark voneinander ab. Sie reichen von 1.3eV [24] über 1.95eV [25] zu 2.6eV [26]. In [24] erhält Ludeke et al. mit Hilfe der ballistischen Elektronen-Emissions-Mikroskopie einen Si/ Al_2O_3 Leitungsbandoffset von $\delta E_{CB}=2.78\text{eV}$, woraus $e\chi_{el}(\text{Al}_2\text{O}_3)=1.3\text{eV}$ folgt. Das untersuchte Al_2O_3 war amorph und wurde durch ALD hergestellt. In [25] erhält Afanas'ev et al. mit Hilfe von innerer Photemission von Elektronen ein Si/ALD- Al_2O_3 Leitungsbandoffset von $\delta E_{CB}=2.1\text{eV}$, woraus $e\chi_{el}(\text{Al}_2\text{O}_3)=1.95\text{eV}$ folgt. In [26] legt Polack et al. mit Hilfe von Tunnelstromsimulation eine Al/ Al_2O_3 -Barriere von $e\phi_B=1.5\text{eV}$ fest. Dies entspricht einer Elektronenaffinität von $e\chi_{el}(\text{Al}_2\text{O}_3)=2.6\text{eV}$. Die von uns verwendete Al/ Al_2O_3 -Barriere liegt innerhalb des großen Bereichs an Werten, welche die Literatur vorgibt. Genauso steht es mit der effektiven Elektronenmasse von $m_{eff}(\text{Al}_2\text{O}_3)=0.28m_0$. Dieser Wert liegt zwischen den Werten von Meng et al ($0.2m_0$) [27] und Yourdshahyan et al. [28] ($0.4m_0$). Die verwendeten Parameter bezüglich der SiO_x -Schicht stimmen mit den Literaturwerten für SiO_2 überein. Die einzige Ausnahme bildet hier die Energie des Leitungsbandes bzw. die Elektronenaffinität. Mit $e\chi_{el}(\text{SiO}_x)=1.6\text{eV}$ liegt diese deutlich über dem von Sze angegebenen Wert von $e\chi_{el}(\text{SiO}_2)=0.9\text{eV}$ [23]. Der verwendete Einfangquerschnitt von $\sigma_T=1.4\cdot 10^{16}\text{cm}^2$ ist klein, wie man es für neutrale Traps erwartet. Hier wurden quasi neutrale Traps betrachtet, da die Potentiale der Traps vernachlässigt wurden. Die Trapkonzentration ist in dem MSTAT ein sensibler Parameter, der nicht wie bei herkömmlichen TAT-Modellen proportional zur

Stromdichte ist. Aufgrund der starken Abhängigkeit der Stromdichte von der Trapkonzentration, lässt sich diese mit dem MSTAT-Modell relativ exakt bestimmen. Der verwendete Wert von $N_T=1.3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ spricht deshalb für sich und muss nicht mit Literaturwerten verglichen werden. Diese Trapkonzentration entspricht einem mittleren Trapabstand von 4.25nm. Dies bedeutet, dass nur bei den dickeren Proben 1 und 2 ein Dreistep-Prozess stattfindet und nur bei diesen Proben die Stromdichte stärker als linear von der Trapkonzentration abhängt (erst ab einem Dreistep-Prozess hängt der WKB-Transmissionskoeffizient von der Trapkonzentration ab, Vergleich Kapitel 3.1).

5.1.1.4 Temperaturabhängigkeit des Leckstromes

Ein Arrhenius-Plot der experimentellen Daten, der MSTAT-Daten und der PF-Daten von Probe 2 ist in **Abbildung 5-6** dargestellt. Für die MSTAT-Daten wurden die Parameter aus **Tabelle 5** und für die PF-Daten, die mit Gleichung [2-39] ermittelt wurden, wurden die Parameter $C_I=10^{-6} \text{ AV}^{-1} \text{ cm}^{-1}$, $\phi_T=1.2 \text{ V}$ und $\epsilon_d=1.8$ verwendet. Das Traplevel und die Dielektrizitätskonstante wurden von Specht et al. übernommen. Er hat den PF-Formalismus auf die temperaturabhängigen I - V Daten für mittlere elektrische Felder in ALD (atomic layer deposition)- Al_2O_3 Proben angewandt. Für kleine elektrische Felder hat er das in Kapitel 2.2.1 vorgestellte TAT-Modell und für große elektrische Felder FNT benutzt, um das Leckstromverhalten der ALD- Al_2O_3 Proben zu erklären. Bei den vorliegenden Messungen kann der PF-Leitungsmechanismus allerdings ausgeschlossen werden.

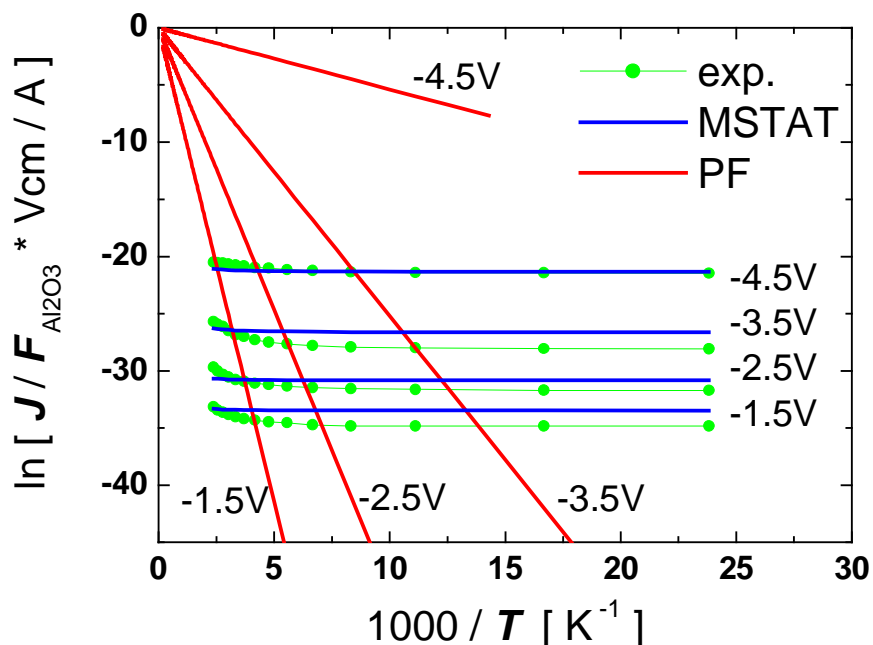


Abbildung 5-6: Arrhenius-Plot der experimentellen Daten von $T=42\text{K}$ bis $T=420\text{K}$ des MSTAT-Modells (mit Parametern aus **Tabelle 5**) und des PF-Modells von Probe 2. Zur Berechnung des PF-Stromes wurde Gleichung [2-39] mit $C_I=10^{-6} \text{ AV}^{-1} \text{ cm}^{-1}$, $\phi_T=1.2 \text{ V}$ und $\epsilon_d=1.8$ verwendet.

Das Verhältnis der Stromdichten bei $T=420K$ zu den bei $T=42K$ ist für die jeweilige Spannung wie folgt gegeben: $J(420K,-1.5V)/J(42K,-1.5V)=5.3$, $J(420K,-2.5V)/J(42K,-2.5V)=7.7$, $J(420K,-3.5V)/J(42K,-3.5V)=11$ und $J(420K,-4.5V)/J(42K,-4.5V)=2.6$. Diese geringe Temperaturabhängigkeit kann unmöglich mit sinnvollen Parametern durch einen thermisch aktivierten Prozess wie den PF-Effekt beschrieben werde. Wie in **Abbildung 5-6** zu sehen ist liefert der PF-Strom ein Verhältnis von $J(420K,-3.5V)/J(42K,-3.5V)\approx 10^{30}$. Außerdem steigt die Temperaturabhängigkeit mit wachsender Spannung bis $-3.5V$, was im Widerspruch zur PF-Leitung steht, da dort die Temperaturabhängigkeit mit wachsendem elektrischem Feld im Isolator abnimmt. Eine weitere Bedingung für die PF-Leitung ist eine bestimmte Aktivierungsenergie, die sich in einer Geraden in einem Arrhenius-Plot widerspiegelt. Die Messungen zeigen jedoch keine Gerade – selbst in einem kleineren Bereich der Temperatur (in dem oft PF berichtet wird [6], [9]), was in **Abbildung 5-7** zu sehen ist.

Das MSTAT-Modell stimmt mit den gemessenen temperaturabhängigen $J(V)$ -Daten gut überein (Vergleich **Abbildung 5-6**). Auch hier steigt die Temperaturabhängigkeit mit wachsendem elektrischen Feld bis zum Maximum der Temperaturabhängigkeit bei $V=-3.5V$. Bei weiterer Erhöhung des elektrischen Feldes sinkt die Temperaturabhängigkeit im MSTAT-Modell wie auch bei den Messdaten. Die kleinen quantitativen Unterschiede können den Elektron-Phonon-Wechselwirkungen zugeschrieben werden. Diese sind im MSTAT vollkommen vernachlässigt. Allerdings kann die Elektron-Phonon-Wechselwirkung bei Raumtemperatur für mittlere und große Felder gegenüber dem Tunnelstrom vernachlässigt werden, was in Kapitel 2.2.3 dargestellt ist.

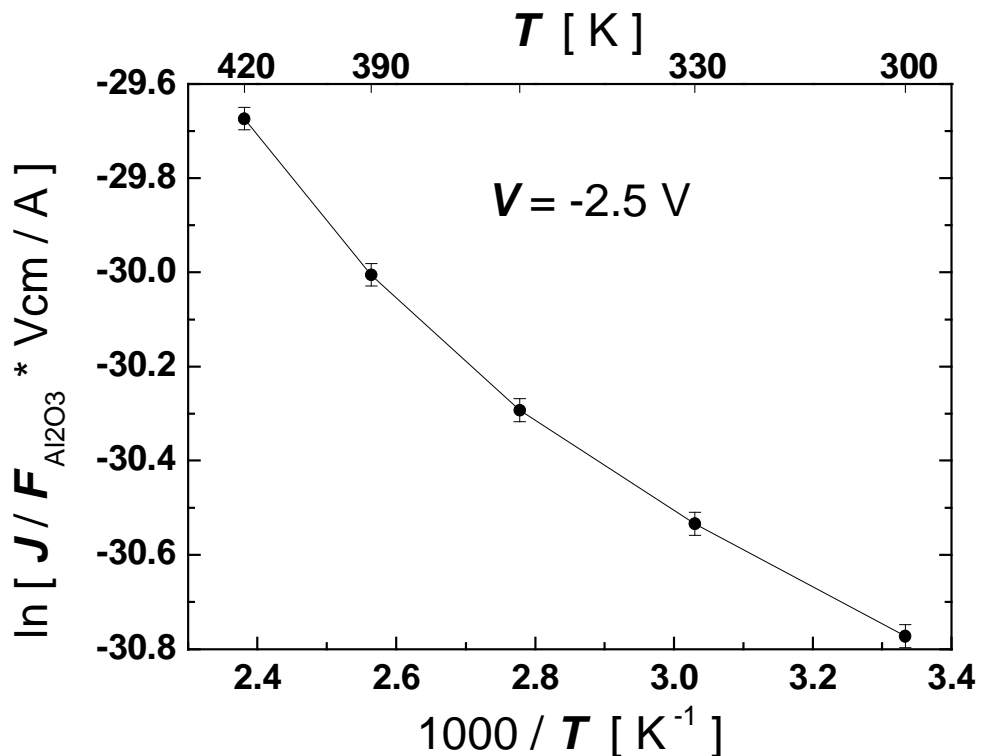


Abbildung 5-7: Arrhenius-Plot der Messdaten von Probe 2 für einen kleineren Temperaturbereich (Ausschnitt von **Abbildung 5-6**) zur Demonstration der Nichtlinearität.

5.1.1.5 Elektrodenabhängigkeit

Die Verwendung von Gold und Platin als Elektrodenmaterial führt zu einem anderen Leckstromverhalten als bei Verwendung einer Aluminium-Elektrode. Durch die relativ hohen Austrittsarbeiten von Au und Pt wird die Barriere für die Elektronen so groß, dass der Strom, der durch die Löcher im p-Si-Substrat herrührt, dominiert (schematische Darstellung von Löcherleitung ist in **Abbildung 5-8** dargestellt). Da der Löcherstrom von der Barriere vom p-Si zum Isolator und nicht von der Barriere an der Metallelektrode abhängt, sind die Stromdichten der Proben mit Au- und Pt-Elektrode identisch, wenn sie über $V - V_{fb}$ aufgetragen werden. Da dies der Fall ist (Stromdichten der Probe 2 mit Au- und Pt-Elektrode sind identisch, siehe **Abbildung 5-9**), ist die Löcherleitung somit bewiesen. Es wurden die Flachbandspannungen $V_{fb}(\text{Al/p-Si}) = -0.85\text{V}$, $V_{fb}(\text{Au/p-Si}) = +0.2\text{V}$ und $V_{fb}(\text{Pt/p-Si}) = +0.7\text{V}$ aus [23] verwendet. Eine Simulation der Löcherleitung wurde nicht durchgeführt.

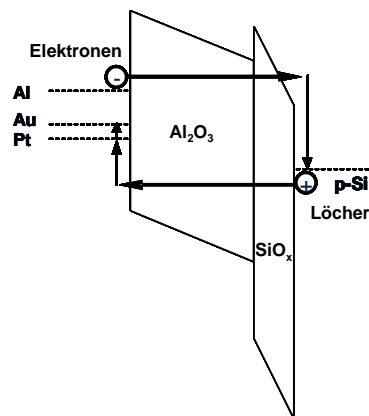


Abbildung 5-8: Schematisch Darstellung der Elektronenleitung mit Al-Elektrode und der Löcherleitung mit Au- und Pt-Elektrode bei Metall/CVD- $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_x/\text{p-Si}$ -Strukturen.

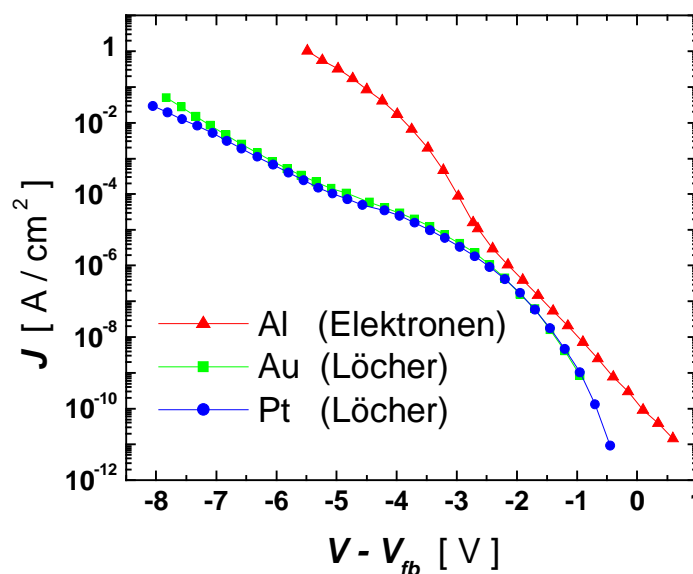


Abbildung 5-9: Die Stromdichten der Probe 2 mit Al-, Au- und Pt-Elektrode als Funktion der angelegten Spannung abzüglich der jeweiligen Flachbandspannung.

5.1.1.6 Zuverlässigkeitsuntersuchung

Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurden Zuverlässigkeitsuntersuchungen an Proben mit CVD-Al₂O₃ durchgeführt. Im Folgenden werden die Ergebnisse der Zuverlässigkeitsuntersuchungen an einer repräsentativen Probe, welche dieselben Schichtdicken wie Probe 2 (siehe **Tabelle 5**) hat, vorgestellt (C=0.8μF/cm², EOT=4.3nm). Zunächst wird der Formalismus, welcher der Zuverlässigkeitsauswertung zugrunde liegt vorgestellt, wobei die Beschreibung aus [29] verwendet wird. Die Grundidee des Modells ist, dass der Durchbruch an den dünnsten Stellen des Isolators erfolgt, da dort die Stromdichte am größten ist. Bei der Herleitung der kumulativen Fehlerrate eines Isolators nimmt man eine Gauss-Verteilung der Isolatorschichtdicke r mit einer Verbreiterung $\pm\sigma$ um die mittlere Schichtdicke $\langle r \rangle$ an. Als Wahrscheinlichkeit, ein lokales Minimum der Schichtdicke zwischen r und Δr auf einer Fläche A zu finden, erhält man dann:

$$P(r) = \Delta r \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(r-\langle r \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) \frac{A}{A_{\min}} \quad , \quad [5-1]$$

wobei A_{\min} die mittlere Fläche ist, die ein lokales Minimum einnimmt. Bei genügend kleinem Δr gilt $P(r) \ll 1$, woraus $\ln(1-P(r)) = -P(r)$ folgt. Der natürliche Logarithmus der Wahrscheinlichkeit $\bar{P}(r)$ kein lokales Minimum der Schichtdicke zwischen r und Δr auf einer Fläche A zu finden, ist daher gegeben durch:

$$\ln(\bar{P}(r)) = \ln(1 - P(r)) = -P(r) \quad . \quad [5-2]$$

Die Wahrscheinlichkeit $\bar{P}_{<R}$, dass kein Durchbruch bei einer bestimmten angelegten Spannung auftritt ist äquivalent zur Wahrscheinlichkeit, dass keine Schichtdicke kleiner als R existiert. Diese Wahrscheinlichkeit ist durch das Produkt aller $\bar{P}(r)$'s, für die $r < R$ gilt, gegeben, wobei sich der natürliche Logarithmus von $\bar{P}_{<R}$ als Integral wie folgt schreiben lässt:

$$\ln(\bar{P}_{<R}) = \int_0^R \frac{\bar{P}(r)}{\Delta r} dr \quad . \quad [5-3]$$

Mit den Gleichungen [5-1], [5-2] und [5-3] erhält man schließlich für die Wahrscheinlichkeit $F(R)$, dass eine Dicke kleiner als R existiert, welche auch kumulative Fehlerrate genannt wird:

$$F(R) = 1 - \exp\left(-\frac{A}{A_{\min}} \int_0^R \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(r-\langle r \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) dr\right) \quad . \quad [5-4]$$

5 Messergebnisse und Simulation

Der Bereich R ist sehr klein (äußerster Schwanz der Gauss-Verteilung), so dass $(r - \langle r \rangle)^2$ näherungsweise linear in r ist, woraus Gleichung [5-4] zu einer Weibull-Verteilung wird, was mit Hilfe von $r \propto \ln(t_{BD})$ aus

$$\ln(-\ln(1-F)) = \ln(A) - \ln\left(\frac{1}{\sigma A_{\min} \sqrt{2\pi}}\right) + \ln\left(-\int_0^R \exp\left(-\frac{(r - \langle r \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) dr\right) = c + \beta \ln(t_{BD}) \quad [5-5]$$

folgt. In einem Weibull-Plot ($\ln(-\ln(1-F))$ vs. $\ln(t_{BD})$) werden die Durchbruchzeiten bei verschiedenen und hohen (damit t_{BD} akzeptabel klein bleibt) Spannungen eingetragen und anschließend werden die Durchbruchzeiten auf kleinere (Betriebs-) Spannungen extrapoliert. Die wahrscheinlichste Durchbruchzeit erhält man bei $\ln(-\ln(1-F))=0$.

An einer zu Probe 2 äquivalenten Probe wurden die Durchbruchzeiten an Strukturen mit zwei verschiedenen Flächen und drei verschiedenen Spannungen mehrmals gemessen. Damit die Messungen der oben beschriebenen Statistik genügen, müssen die Durchbruchzeiten in einem Schaubild, in dem $\ln(-\ln(1-F)) - \ln(A)$ als Funktion von $\ln(t_{BD})$ aufgetragen ist, auf einer Geraden liegen. Dies kann in **Abbildung 5-10** verifiziert werden.

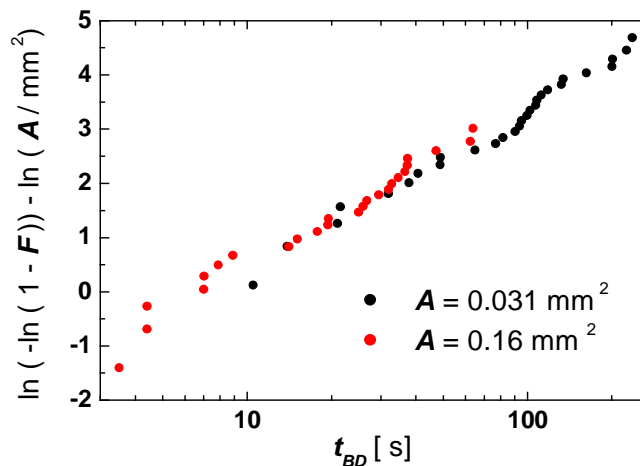


Abbildung 5-10: Durchbruchzeiten einer typischen CVD- Al_2O_3 Probe als Funktion von $\ln(-\ln(1-F)) - \ln(A)$ für Messungen an zwei verschiedenen Elektrodenflächen.

Die aktive Isolatorfläche eines 1Gb DRAM's mit einer Kapazität von $C=50\mu\text{F}$ beträgt ca. $A=55\text{cm}^2$. Die Flächen der untersuchten Proben sind deutlich kleiner und müssen ebenso wie die Spannungen extrapoliert werden. Bei DRAM-Produkten wird gefordert, dass von 1000 DRAM's höchstens einer ausfallen darf. Da $\ln(1-F) \propto A$ ist, ergibt sich durch Extrapolation der Fläche von $A=3.1 \cdot 10^{-4}\text{cm}^2$ auf $A=55\text{cm}^2$ und durch Extrapolation der Anzahl an durchbrechenden Proben von 1 auf 1000:

$$\ln(-\ln(1-F)) = \ln\left(\frac{3.1 \cdot 10^{-4}}{55 \cdot 1000}\right) = -19 \quad [5-6]$$

Die wahrscheinlichste Durchbruchzeit des ersten von 1000 1Gb DRAM's erfolgt also bei $\ln(-\ln(1-F))=-19$. Eine Extrapolation der gemessenen Daten im Weibull-Plot (Abbildung 5-11) liefert die in Abbildung 5-12 gezeigten Durchbruchzeiten für die Spannungen -5.5V, -5.4V und -5.2V. Die Lebensdauer erhält man nun, indem man mit Hilfe eines linearen Fits auf Betriebsspannung ($V=-1V$) extrapoliert. Als Durchbruchzeit des ersten von 1000 Gb DRAM's bei Raumtemperatur erhält man $t_{BD}=2.5$ Jahre. Bei $T=80^\circ C$ halbieren sich die Durchbruchzeiten im Vergleich zu den Durchbruchzeiten bei Raumtemperatur, was in Abbildung 5-13 dargestellt ist.

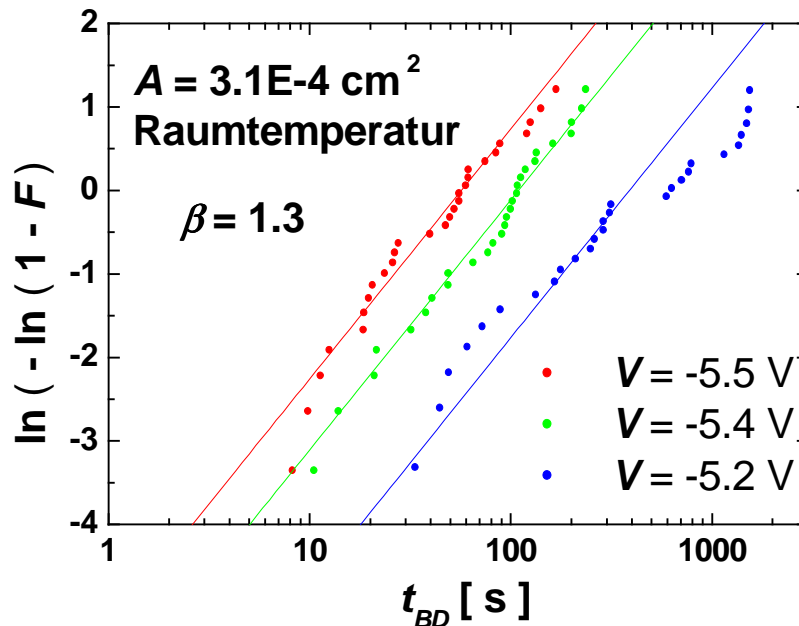


Abbildung 5-11: Weibull-Plot einer typischen CVD- Al_2O_3 Probe mit einer Fläche von $3.1 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2$ bei einer angelegten Spannungen von -5.5V, -5.4V und -5.2V bei Raumtemperatur. Eine Weibull-Steigung von $\beta=1.3$ wurde ermittelt, wobei die Fits als Linien dargestellt sind.

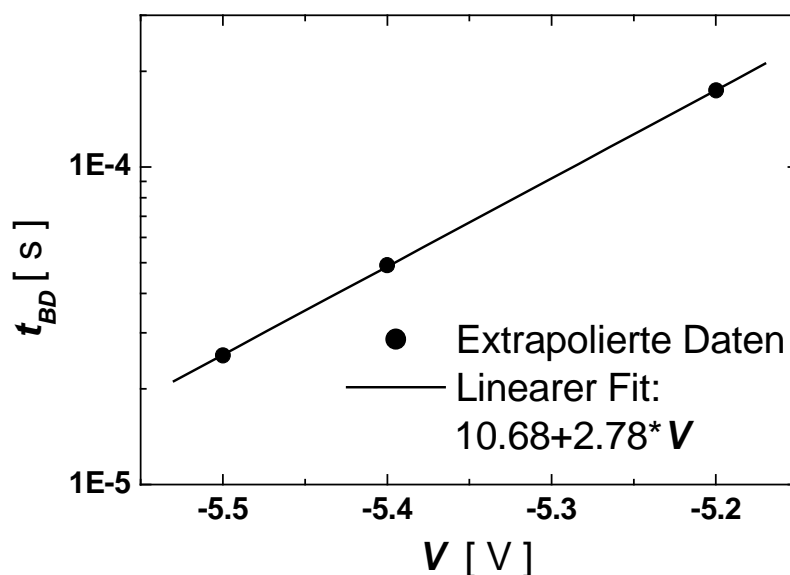


Abbildung 5-12: Extrapolierte Daten aus Abbildung 5-11 für einen 1 Gb DRAM mit der Bedingung, dass einer von 1000 DRAM's ausfallen darf.

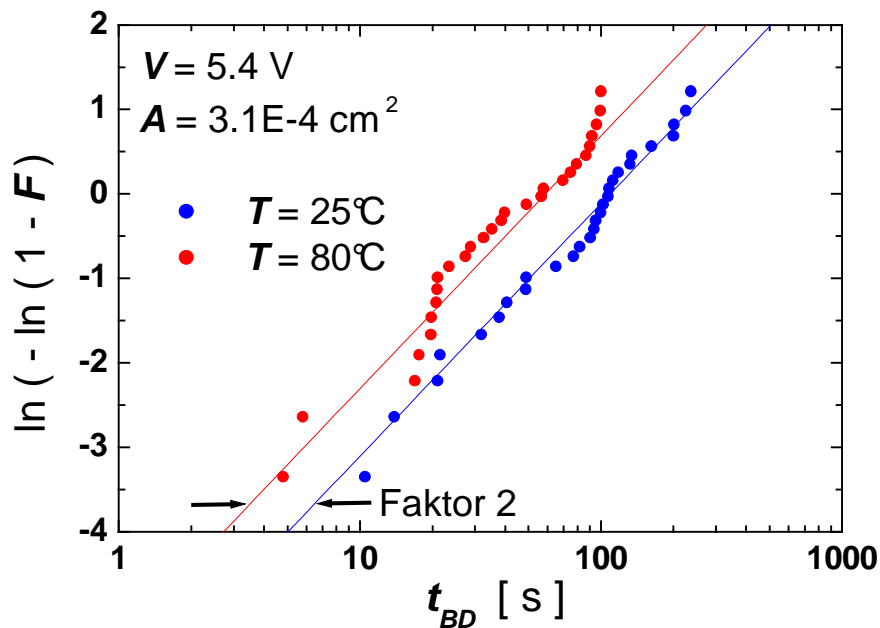


Abbildung 5-13: Weibull-Plot der typischen CVD-Al₂O₃ Probe bei Raumtemperatur und T=80°C.

Die ermittelte Durchbruchzeit für den ersten von 1000 1Gb DRAM's, die als Isolator eine typische CVD-Al₂O₃-Schicht (EOT=4.3nm, mit 1.5nm SiO_x-Interface) besitzen, beträgt bei Betriebsspannung und T=80°C ca. ein Jahr. Gefordert wird allerdings eine Lebensdauer von 10 Jahren, was mit diesem CVD-Al₂O₃ mit EOT=4.3nm nicht erreicht wird. Hier ist allerdings zu beachten, dass bei den Extrapolationen große Fehler auftreten können, die auch größer als der fehlende Faktor 10 sein können.

5.1.1.7 Zusammenfassung CVD-Al₂O₃

Bei dem optimierten Herstellungsverfahren von MOS-Strukturen mit CVD-Al₂O₃ bildet sich eine ca. 2nm Dicke SiO_x-Schicht, was aus XPS-Messungen und TEM-Aufnahmen folgt. Die Leckströme von Proben mit DRAM relevanten Al₂O₃-Schichtdicken können durch das neu eingeführte MSTAT-Modell (Kapitel 3.1) beschrieben werden. Die an Proben mit drei verschiedenen Al₂O₃-Schichtdicken durchgeführten Messungen und Simulationen decken einen Bereich von 12 Größenordnungen im Leckstrom ab, und lassen keinen Zweifel an der Anwendbarkeit des MSTAT-Modells. Durch temperaturabhängige Leckstrommessungen konnte die PF-Leitung ausgeschlossen werden. Bei Metall/Al₂O₃/SiO_x/p-Si (p=10¹⁵cm⁻³) erhält man bei Verwendung einer Al-Elektrode Elektronenleitung, während bei Verwendung von Au- oder Pt-Elektroden die Löcherleitung dominiert. Die durchgeführten Zuverlässigkeitsmessungen an typischen Proben mit einem EOT von 4.3nm ergeben, dass der erste von 1000 1 Gb DRAM's nach ca. einem Jahr ausfällt.

5.1.2 Atomic layer deposition (ALD)- Al_2O_3

Die hier vorgestellten Proben wurden in Dresden prozessiert und gemessen. Die Modellierung bzw. die Simulation der temperaturabhängigen $J(V)$ -Daten wurde im Rahmen dieser Promotion durchgeführt und wird im Folgenden diskutiert.

Die untersuchten ALD- Al_2O_3 Proben wurden alle einer Temperatur von $1050^\circ C$ ausgesetzt (notwendig zur Aktivierung der poly-Si Elektrode) und sind daher polykristallin. Es wurden zwei verschiedene Al_2O_3 -Schichtdicken (3nm, 4nm) mit jeweils zwei verschiedenen Elektroden (n^+ -poly Si und TiN) untersucht. Zwischen dem n-Si-Substrat und der Al_2O_3 -Schicht befindet sich eine 1.4nm dicke Si_3N_4 -Schicht. Bei Verwendung einer n^+ -poly Si-Elektrode wurde angenommen, dass sich eine Monolage (0.4nm) SiO_x zwischen der n^+ -poly Si-Elektrode und der Al_2O_3 -Schicht bildet. Diese Annahme ist realistisch und für die Leckstromsimulationen notwendig. Die Dielektrizitätskonstante des ALD- Al_2O_3 beträgt $\epsilon(AlD-Al_2O_3)=9$ und ist etwas größer als die des CVD- Al_2O_3 . Die Si_3N_4 -Schicht hat eine Dielektrizitätskonstante von 7 und die SiO_x -Schicht eine von 3.9. Diese Werte wurden durch Simulationen der $C(V)$ -Daten ermittelt.

Im Gegensatz zum CVD- Al_2O_3 dominiert bei den ALD- Al_2O_3 -Proben nicht der MSTAT-Strom, sondern der Tunnelstrom, der ohne Berücksichtigung von Traps fließt. Die Temperaturabhängigkeit des Leckstromes der ALD- Al_2O_3 -Proben ist deutlich größer als die der CVD- Al_2O_3 Proben. Diese große Temperaturabhängigkeit lässt sich nicht durch das MSTAT-Modell erklären. Der MSTAT-Strom hängt deutlich schwächer von der Temperatur ab als der reine Tunnelstrom (ohne Traps). Die Wahrscheinlichkeit der thermischen Emission aus der emittierenden Elektrode ist im Gegensatz zum Tunnelstrom unabhängig von den Traps im Isolator. Die Wahrscheinlichkeit des Tunnelns ist größer wenn Traps im Isolator vorhanden sind, so dass in diesem Fall die thermische Emission gegenüber dem Tunnelstrom kleiner ist und somit die Temperaturabhängigkeit des Leckstromes bei der Existenz von Traps kleiner wird. Dies gilt aber nur, wenn die thermische Emission aus den Traps vernachlässigbar ist.

5.1.2.1 n^+ -poly Silizium-Elektrode

Die Dotierungen von Substrat ($2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) und Gate-Elektrode (10^{20} cm^{-3}) sind sehr hoch, so dass für beide Polaritäten der angelegten Gate-Spannung genügend Ladungsträger vorhanden sind, damit der Leckstrom für beide Polaritäten gemessen werden kann. Bei der Berechnung des Leckstromes (Tunneln ohne Traps) wie es in Kapitel 2.1.1.5 beschrieben wurde, benötigt man genaue Kenntnis der elektrischen Felder in den Isolatoren und die Bandverbiegung des Substrats und der Gate-Elektrode an der Oberfläche. Um die elektrischen Felder als Funktion der angelegten Gate-Spannung zu erhalten, kann man eine gemessenen $C(V)$ -Kurve integrieren. Das elektrische Feld in Isolator i folgt dann aus:

$$F_i(V) = \frac{Q}{\epsilon_i \epsilon_0 A} = \frac{1}{\epsilon_i \epsilon_0 A} \int_{V_{fb}}^V C(V) dV \quad [5-7]$$

Die $C(V)$ -Charakteristik ist in **Abbildung 5-14** dargestellt und die zugehörigen integrierten Daten $Q/\epsilon_0 A = F_i \epsilon_i$ sind in **Abbildung 5-15** dargestellt. Die Bandverbiegung an der Oberfläche im Substrat ($V > V_{fb}$) und in der Gate-Elektrode ($V < V_{fb}$) wurden mit einem Silvaco Device-Simulator ermittelt und sind in **Abbildung 5-16** dargestellt. Die effektive Barriere wurde wie folgt berechnet: Die Fermienergie in Substrat und Gate-Elektrode wurde gleich der Energie des Si-Leitungsbandes gesetzt (gute Näherung aufgrund der hohen Dotierungen), so dass für die effektive Barriere folgt:

$$\phi(V) = \phi(V_{fb}) - \psi_S(V), \quad \phi(V_{fb}) \approx \delta E_{CB}(Si / Isolator) \quad [5-8]$$

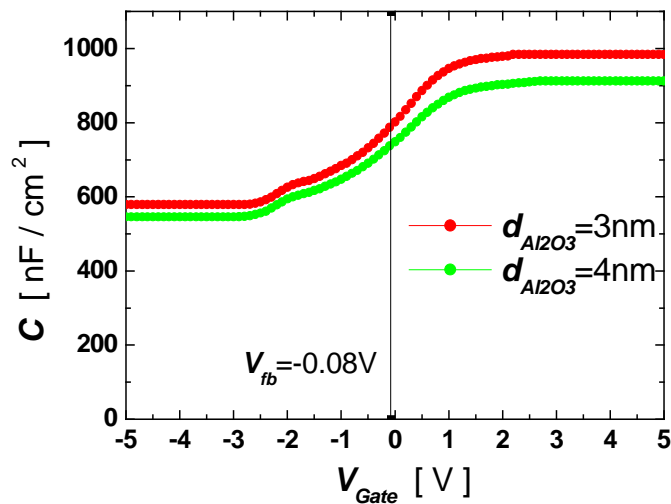


Abbildung 5-14: $C(V)$ -Charakteristik der ALD- Al_2O_3 Proben.

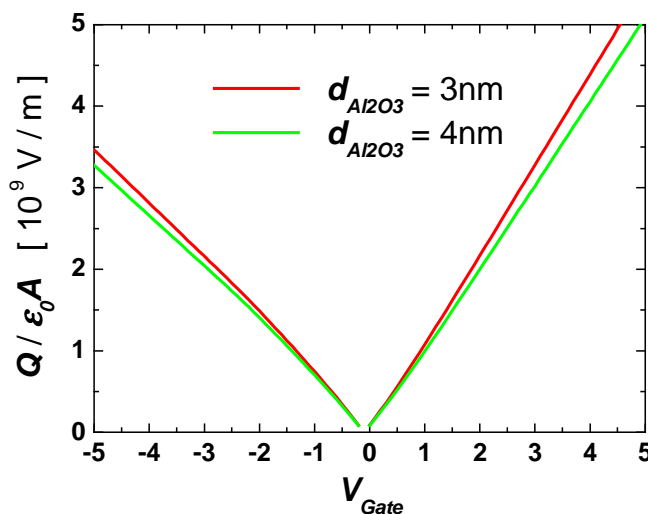


Abbildung 5-15: Ladungsdichte pro ϵ_0 der ALD- Al_2O_3 Proben. Die Daten wurden durch Integration der $C(V)$ -Daten (Abbildung 5-14) nach Gleichung [5-7] ermittelt. Das elektrische Feld in Isolator i folgt durch Division der Daten mit ϵ_i .

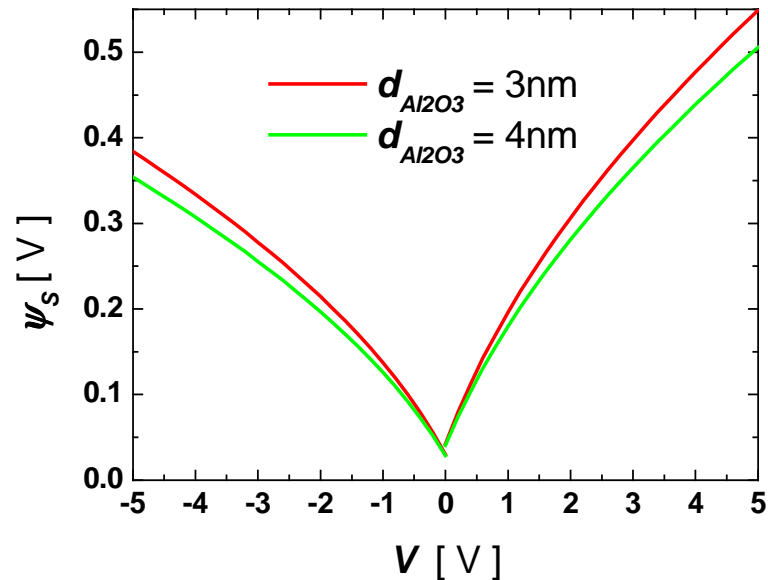


Abbildung 5-16: Mit einem Device-Simulator ermittelte Bandverbiegung an der Oberfläche des Substrats ($V > V_{fb}$) und der Gate-Elektrode ($V < V_{fb}$).

Bei der Berechnung der Stromdichte wurde die numerische WKB-Methode (Kapitel 2.1.1.5) verwendet. Mit den verwendeten Parametern (siehe Tabelle 6) erhält man eine zufrieden stellende Übereinstimmung von Theorie und Experiment, was in der Abbildung 5-17 zu sehen ist. Der Bildladungseffekt wurde nicht berücksichtigt, da dieser aufgrund der ähnlichen Dielektrizitätskonstante von Si und Al_2O_3 oder Si_3N_4 vernachlässigbar ist. Die $J(V)$ -Messung deckt nur einen Bereich von 8 Größenordnungen im Leckstrom ab, da unterhalb von 10^{-10} A/cm^2 der Relaxationsstrom dominiert und oberhalb von 0.01 A/cm^2 der Leckstrom durch den Serienwiderstand begrenzt ist. Die $I(V)$ -Messungen wurden von X. Gay in Dresden mit einem HP4156C Parameter Analyzer durchgeführt und nicht wie die CVD- Al_2O_3 Proben mit der Methode wie sie in Kapitel 4 beschrieben ist. Die Trapping-Effekte können hier vernachlässigt werden, da der gemessene Strom zeitunabhängig ist.

Tabelle 6: Die für Leckstromsimulation (WKB numerisch) der ALD- Al_2O_3 Proben verwendeten Parameter.

$\phi_{\text{Al}_2\text{O}_3}$	$m_{\text{eff}}(\text{Al}_2\text{O}_3)$	$m_{\text{eff}}(\text{Si}_3\text{N}_4)$	$m_{\text{eff}}(\text{Si})$	$\delta E_{CB}(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}_3\text{N}_4)$	$m_{\text{eff}}(\text{SiO}_2)$	$\delta E_{CB}(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_x)$
1.7 V	$0.42 m_0$	$0.5 m_0$	$0.33 m_0$	0 eV	m_0	1.3 eV

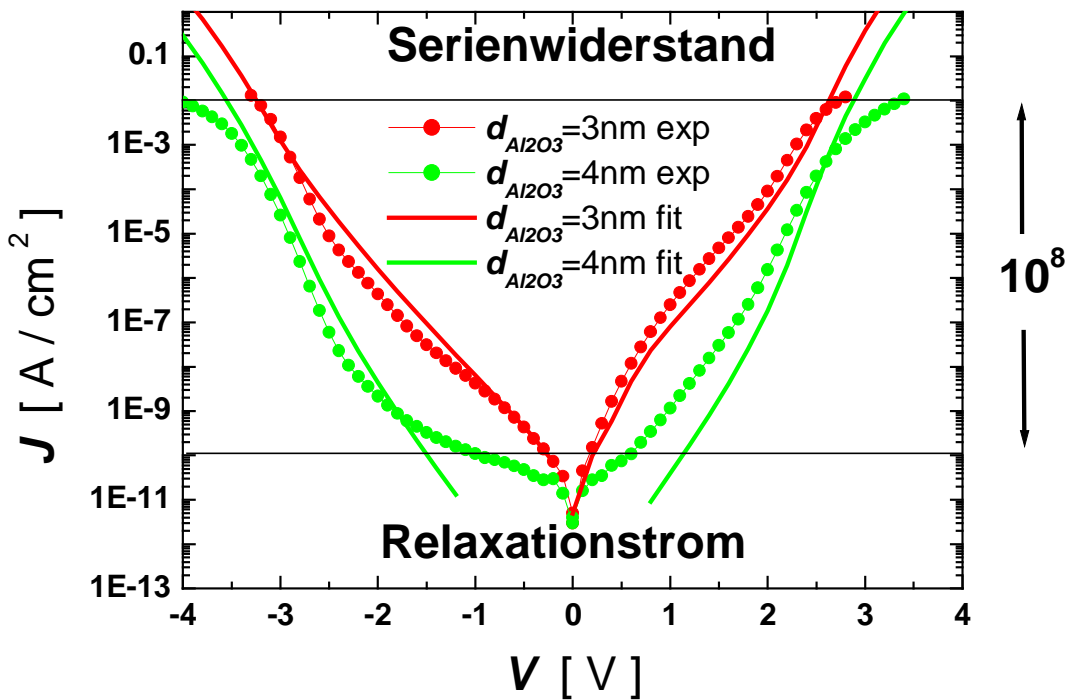


Abbildung 5-17: Gemessene und berechnete $J(V)$ -Charakteristik der ALD- Al_2O_3 Proben. Die Messung deckt einen Bereich von 8 Größenordnungen im Leckstrom ab. Unterhalb von 10^{-10} A/cm^2 dominiert der Relaxationsstrom und oberhalb 0.01 A/cm^2 ist der Leckstrom durch einen Serienwiderstand begrenzt.

Im Folgenden werden die verwendeten Parameter (Tabelle 6) diskutiert:

Der Si/ Al_2O_3 Leitungsbandoffset von 1.7eV liegt in dem großen Bereich an Werten, den die Literatur vorgibt. Pollack et al. [26] simulierten den Tunnelstrom durch Al/ Al_2O_3 /Al-Strukturen. Sie verwendeten eine Al/ Al_2O_3 -Barriere von 1.5eV , was einem Si/ Al_2O_3 Leitungsbandoffset von 1.45eV entspricht. Mit Hilfe der inneren Elektronen-Photoemission erhielten Afanas'ev et al. [25] einen Si/ Al_2O_3 Leitungsbandoffset von 2.1eV . Ludeke et al verwendeten „ballistische Elektronen-Emissions-Mikroskopie“ und fanden ein Si/ Al_2O_3 Leitungsbandoffset von $\delta E_{CB}=2.78\text{eV}$. Die Al/ Al_2O_3 Barriere für das CVD- Al_2O_3 (5.1.1.3) von 2.4eV entspricht einem Si/CVD- Al_2O_3 Leitungsbandoffset von 2.35eV . Der Unterschied zwischen dem ALD- und dem CVD- Al_2O_3 lässt sich durch die unterschiedliche Abscheidungs-methoden erklären.

Auch die effektive Elektronenmasse im ALD- Al_2O_3 ($m_{eff}=0.42m_0$) weicht von dem Wert des CVD- Al_2O_3 ($m_{eff}=0.28m_0$) ab, wobei beide in dem Bereich den die Literatur vorgibt liegen ([27] $0.2m_0$, [28] $0.4m_0$).

Die Potentialbarriere und die effektive Elektronenmasse sind die entscheidenden Parameter für die Temperaturabhängigkeit der Leckströme. Je kleiner die Barriere und je größer die effektive Elektronenmasse desto größer ist die Temperaturabhängigkeit der Leckströme. Physikalisch lässt sich die größere Temperaturabhängigkeit bei größeren effektiven Elektronenmassen dadurch erklären, dass das Verhältnis der Transmissionskoeffizienten $D(E+\Delta E)/D(E)$ größer ist je größer m_{eff} . Elektronen mit höheren Energien als die Fermienergie haben im Vergleich zu den Elektronen an der Fermienergie eine umso größeren Transmissionskoeffizienten je größer die effektive Elektronenmasse ist. Da die Energie der Elektronen durch die temperaturabhängige

Fermiverteilung gegeben ist, steigt die Temperaturabhängigkeit mit größeren effektiven Massen. Die größere Temperaturabhängigkeit bei kleineren Barrieren folgt aus dem größeren Verhältnis von $\phi_B/(\phi_B - \Delta E)$ bei kleineren Barrieren. Bei kleinen Barrieren macht sich eine Energieänderung der Elektronen stärker bemerkbar hinsichtlich des Transmissionskoeffizienten als bei größeren Barrieren.

Die verwendeten Parameter ($\delta E_{CB}(\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4)=1.7\text{eV}$, $m_{\text{eff}}(\text{Si}_3\text{N}_4)=0.5m_0$) für die Si_3N_4 -Schicht sind nahe an den Literaturwerten. Shi et al. [30] and Yeo et al. [31] modellierten den Leckstrom durch Si_3N_4 -Schichten durch Betrachtung des quantenmechanischen Tunnelleffektes und verwendeten ein $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4$ Leitungsbandoffset von 2.1eV und eine effektive Elektronenmasse von $0.5m_0$.

Die verwendeten Parameter für die SiO_x -Schicht ($\delta E_{CB}(\text{Si}/\text{SiO}_x)=0.4\text{eV}$, $m_{\text{eff}}(\text{Si}_3\text{N}_4)=m_0$) sind weit von den Werten für eine SiO_2 -Schicht entfernt, liefern aber die besten Fitergebnisse. Allerdings hängen die berechneten Tunnelströme nur schwach von diesen Parametern ab. Der Hauptgrund weswegen die SiO_x -Schicht eingeführt wurde ist, dass die Energie der Leitungsbänder der Al_2O_3 - und der Si_3N_4 -Schicht bei negativen Gatespannungen um $eF(\text{SiO}_x)d(\text{SiO}_x)$ erniedrigt werden. Bei positiven Gatespannungen kann die SiO_x -Schicht vernachlässigt werden.

Die Temperaturabhängigkeit der $J(V)$ -Charakteristik ist durch eine Grafik (Abbildung 5-18) bei der das Verhältnis $J(400\text{K})/J(300\text{K})$ als Funktion der Gatespannung aufgetragen ist, dargestellt. Die berechneten Tunnelströme stimmen mit der Temperaturabhängigkeit der Messdaten gut überein. Hier ist zu beachten, dass der berechnete Tunnelstrom bei $T=400\text{K}$ über einen Faktor 20 größer als der Tunnelstrom bei $T=300\text{K}$ ist (für $V<0$ und 4nm Al_2O_3 -Schichtdicke). Diese starke Abhängigkeit des Tunnelstromes von der Temperatur rührt von dem relativ kleinen $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ Leitungsbandoffset von 1.7eV her, welcher bei der Berechnung verwendet wurde.

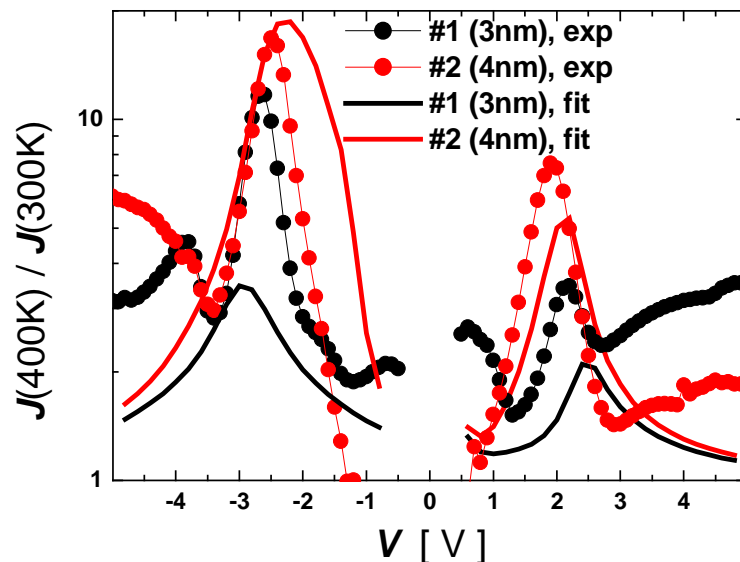


Abbildung 5-18: Das Verhältnis von der Stromdichte bei $T=400\text{K}$ und der Stromdichte bei $T=300\text{K}$ als Funktion der Gatespannung für die ALD- Al_2O_3 Proben 1 und 2.

Die Gatespannung bei der das Verhältnis $J(400\text{K})/J(300\text{K})$ ein Maximum hat, wird im Folgenden mit „transition voltage“ V_{tr} bezeichnet. Die „transition voltages“ von Theorie

und Experiment stimmen für beide Proben und Polaritäten gut überein. Bei der „transition voltage“ erfolgt der Übergang von DT zu FNT, d. h. für $|V| < |V_{tr}|$ tunneln die Ladungsträger direkt in das Leitungsband des Substrats, während für $|V| > |V_{tr}|$ die Ladungsträger in das Leitungsband des Isolators tunneln. Dies kann anhand von **Abbildung 5-19** verifiziert werden. Die Temperaturabhängigkeit bzw. das Verhältnis $J(400K)/J(300K)$ ist bei der Spannung, bei welcher der Übergang DT zu FNT stattfindet, maximal, da für die Transmissionskoeffizienten des DT-Prozesses D_D und des FNT-Prozesses D_{FN} folgende Relationen gelten:

$$D_{FN}(E+\Delta E)/D_{FN}(E) < D_D(E+\Delta E)/D_D(E)$$

$$D_{FN}(E+\Delta E, F)/D_{FN}(E, F) > D_{FN}(E+\Delta E, F+\Delta F)/D_{FN}(E, F+\Delta F).$$

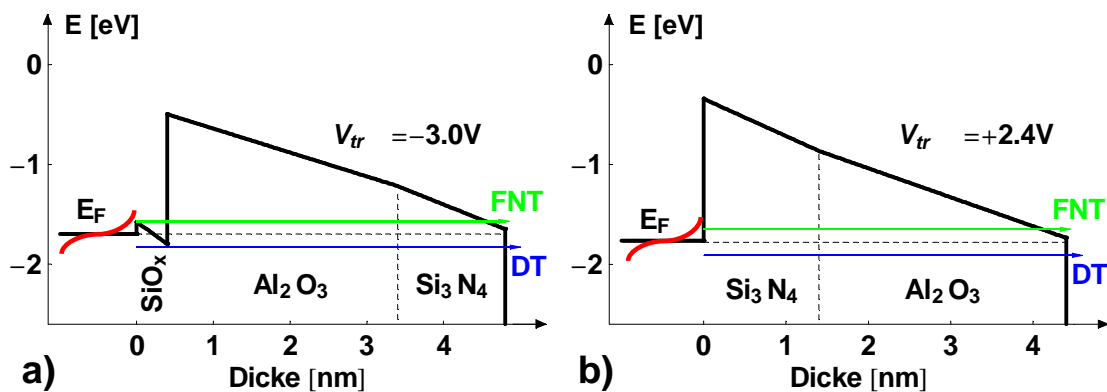


Abbildung 5-19: Berechnetes Banddiagramm der 3nm Al_2O_3 -Probe bei einer Gatespannung von a) -3.0V und von b) $+2.4\text{V}$. Diese Spannungen entsprechen genau den Spannungen bei denen das Verhältnis $J(400\text{K})/J(300\text{K})$ maximal ist. Genau bei diesen Spannungen findet der Übergang zwischen DT und FNT statt. Die rote Linie zeigt die Fermifunktion schematisch.

5.1.2.2 Poole-Frenkel (PF)-Fit der berechneten Tunneldaten

Der folgende Abschnitt dient zum Beweis, dass das PF-Modell temperaturabhängige $J(V)$ -Daten falsch interpretieren kann. Zu diesem Zweck wurde anstatt eines real gemessenen Stromes ein **berechneter** reiner Tunnelstrom verwendet, also ein Strom, der mit absoluter Sicherheit nicht durch die thermisch aktivierte PF-Emission zu erklären ist. Als berechneter Tunnelstrom wurde der im vorangegangenen Kapitel 5.1.2.1 berechnete Tunnelstrom, der den Leckstrom der ALD- Al_2O_3 -Proben fittet, verwendet. Sodann wurde versucht diesen berechneten Strom mit dem PF-Formalismus zu erklären.

Es zeigte sich, dass das PF-Modell scheinbar erfolgreich auf diesen berechneten Tunnelstrom angewandt werden kann. Die Qualität der Fits (siehe **Abbildung 5-20** und **Abbildung 5-21**) entspricht den Fits, die aus der Literatur bekannt sind. Als Beispiele von Veröffentlichungen, in denen das PF-Modell auf das Leckstromverhalten von Al_2O_3 und von Si_3N_4 scheinbar erfolgreich angewandt wurde, dienen [6] und [9]. Allerdings konnte in diesen Arbeiten der Leckstrom innerhalb eines Temperaturbereichs von $T=300\text{K}$ bis $T=400\text{K}$ nur über 3 bis 4 Größenordnungen mit dem PF-Modell angefitet

werden. In den anderen Bereichen der $J(V)$ -Charakteristik wurden andere Leitungsmechanismen angewandt.

Der quantenmechanische Tunneleffekt beschreibt die $J(V)$ -Charakteristik von den $\text{Si}/\text{SiO}_x/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$ -Strukturen über den gesamten Messbereich von 8 Größenordnungen (Abbildung 5-17). Das PF-Modell kann prinzipiell nur dann angewandt werden, wenn die Temperaturabhängigkeit des Leckstromes mit wachsendem elektrischen Feld abnimmt (Vergleich Gleichung [2-39]), d. h. für Spannungen $|V| > |V_{tr}|$. Da in den Messungen von **Abbildung 5-17** der Serienwiderstand die $I(V)$ -Messung begrenzt und V_{tr} relativ groß ist, könnte das PF-Modell nur in einem sehr kleinen Bereich erfolgreich angewandt werden.

Im Folgenden wird gezeigt, dass das PF-Modell auch auf die berechneten Tunneldaten scheinbar erfolgreich angewandt werden kann. D.h., dass das PF-Modell temperaturabhängige $J(V)$ -Daten fittet, obwohl der Leitungsmechanismus durch den quantenmechanischen Tunneleffekt gegeben ist. Dies beweist, dass das PF-Modell keine eindeutige Methode zur Charakterisierung von Leitungsmechanismen liefert und das Leckstromverhalten falsch deuten kann.

In **Abbildung 5-20** sind die berechneten Tunnelströme der 3nm und 4nm Proben in einem PF-Plot dargestellt. Aus der Steigung einer Geraden im PF-Plot lässt sich die dynamische Dielektrizitätskonstante eines Isolators bestimmen (siehe Kapitel 2.2.2). Die Tunnelströme liegen über 3 Größenordnungen auf einer Geraden. Dies ist der typische Bereich, in dem das PF-Modell auf Leckströme scheinbar anwendbar ist (Vergleich [6] und [9]). Für beide Proben und beide Polaritäten ergibt sich dieselbe Dielektrizitätskonstante von $\epsilon_d=1.0$. Eine notwendige Bedingung für die Anwendbarkeit des PF-Modells ist, dass die dynamische Dielektrizitätskonstante zwischen 1.0 und der statischen Dielektrizitätskonstante des Isolators liegt. Da die, durch den PF-Fit erhaltene dynamische Dielektrizitätskonstante von $\epsilon_d=1.0$ für in diesem Bereich liegt, ist das PF-Modell widerspruchsfrei auf die berechneten Tunneldaten anwendbar.

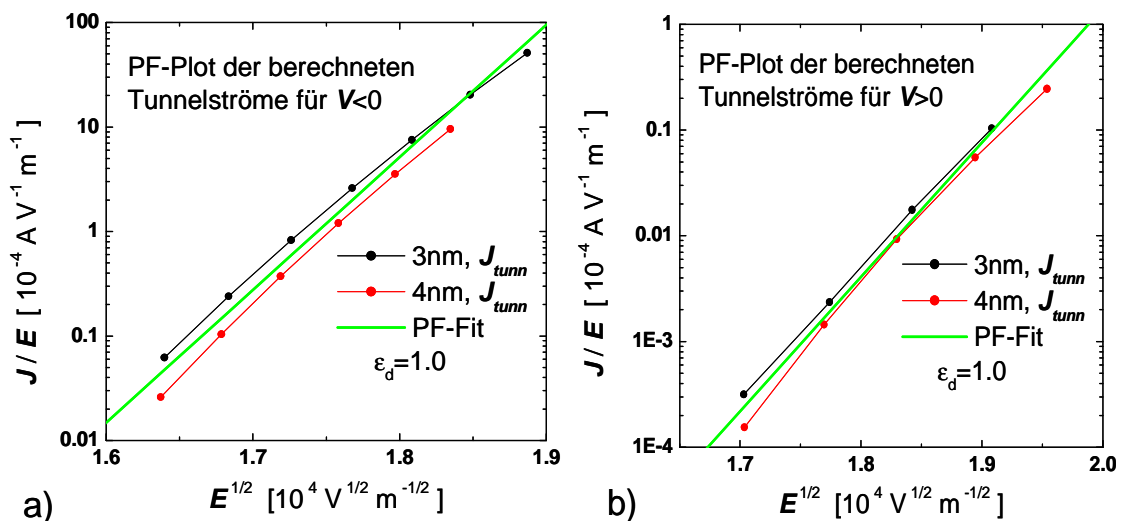


Abbildung 5-20: PF-Plot der berechneten Tunnelströme der 3nm und 4nm Proben aus Kapitel 5.1.2.1. Sowohl für beide Proben als auch für beide Polaritäten (a: $V < 0$, b: $V > 0$) erhält man durch einen PF-Fit dieselbe dynamische Dielektrizitätskonstante von $\epsilon_d=1.0$.

Auch die Temperaturabhängigkeit der berechneten Tunnelströme kann mit dem PF-Modell scheinbar erfolgreich gefittet werden. In den Arrhenius-Plots (Abbildung 5-21) sind die berechneten Tunneldaten (mit den Parametern aus Tabelle 6) der 3nm (Probe 1) und 4nm (Probe 2) ALD-Al₂O₃ Probe dargestellt. Diese Tunneldaten liegen im Arrhenius-Plot auf einer Geraden und können für beide Polaritäten und Proben mit einem Traplevel von $\phi_T=1.45V$ durch den PF-Strom beschrieben werden. Die für den PF-Fit verwendete Konstante C (Vergleich Gleichung [2-39]) unterscheidet sich nur hinsichtlich der Polarität der Gatespannung (für $V<0$ erhält man $C=0.25Acm^{-1}V^{-1}$, für $V>0$ erhält man $C=10^{-3}Acm^{-1}V^{-1}$), was kein Widerspruch zur PF-Leitung darstellt, da die untersuchten Proben nicht symmetrisch (SiO_x/Al₂O₃/Si₃N₄) sind. Das verwendete Traplevel von $\phi_T=1.45V$ liegt in dem Bereich der Traplevel, die Sze (1.3V) und Specht et al. (1.2V) bei ihren PF-Untersuchungen erhalten haben.

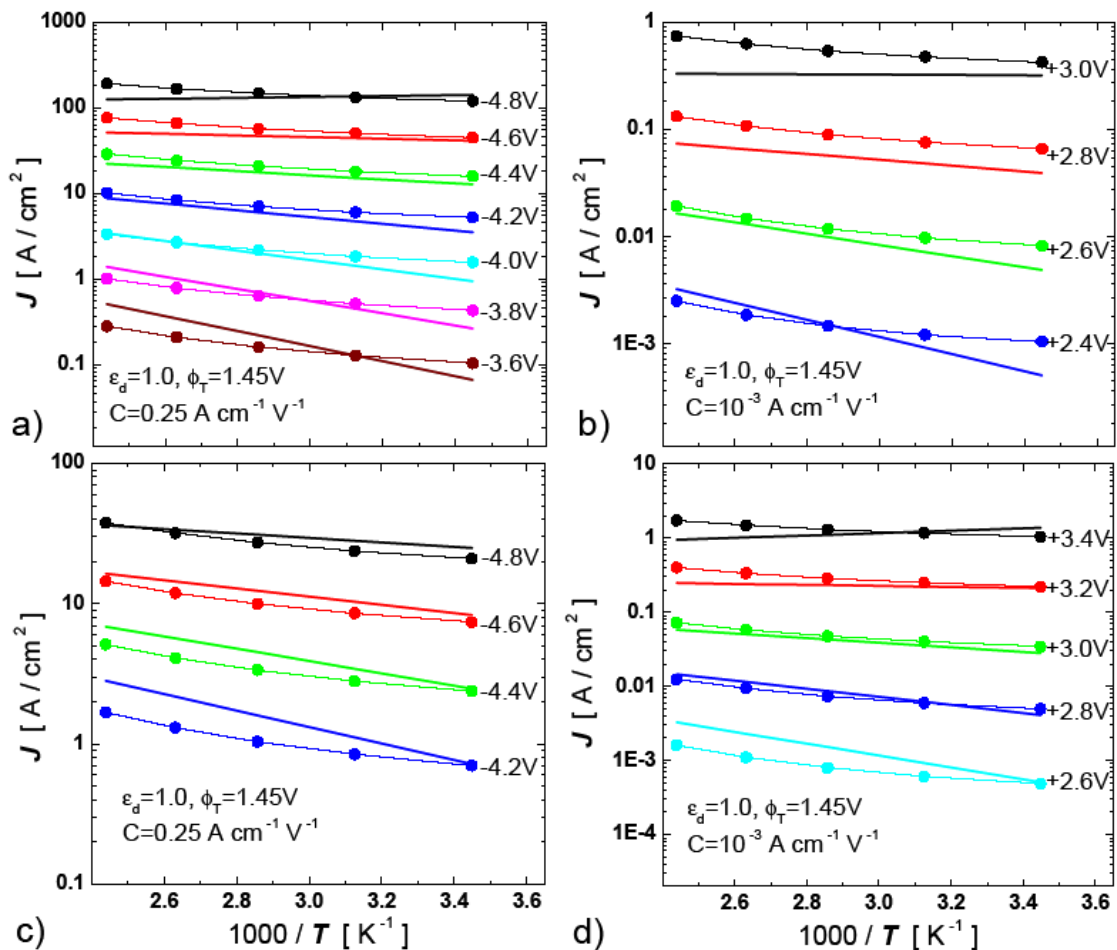


Abbildung 5-21: Arrhenius-Plots ($J-T^{-1}$ Charakteristik) von den berechneten Tunneldaten für die 3nm a), b) und 4nm c), d) ALD-Al₂O₃ Proben. Die berechneten Tunneldaten sind durch verbundenen Punkte und der jeweilige PF-Fit durch Linien dargestellt. Für beide Proben und beide Polaritäten erhält man mit $\phi_T=1.45V$ und $\epsilon_d=1.0$ (hier kein Fitparameter, da durch PF-Plot festgelegt) eine zufrieden stellende Übereinstimmung von Tunnel- und PF-Strom. Die Konstante C (siehe Gleichung [2-39]) variiert mit der Polarität (Struktur nicht symmetrisch).

Sowohl die Feldabhängigkeit als auch die Temperaturabhängigkeit des berechneten Tunnelstroms könnte man durch das PF-Modell über 3 bis 4 Größenordnungen beschreiben. Die aus dem PF-Fit resultierenden Parameter sind realistisch und sind für beide Proben identisch. Selbst für beide Polaritäten sind die dynamischen Dielektrizitätskonstanten und die Traplevel identisch. Dies ist besonders hervorzuheben, da in den Arbeiten von Sze und Specht et al. die $J(V)$ -Daten nur für eine Polarität mit dem PF-Modell gefittet wurden.

Aus der Tatsache, dass das PF-Modell scheinbar erfolgreich auf die berechneten Tunnelströme angewandt werden kann, folgt, dass das PF-Modell $J(V)$ -Daten falsch interpretieren kann. Ein typischer PF-Fit deckt ca. 3 bis 4 Größenordnungen im Leckstrom ab, was nicht zu eindeutigen Aussagen über den Leitungsmechanismus führt. Unabhängig vom Leitungsmechanismus reichen 3 bis 4 Größenordnungen im Leckstrom nicht aus, da verschiedene Parameter oder verschiedene Modelle den Leckstrom fitten können.

5.1.2.3 Titannitrid (TiN)-Elektrode

Bei künftigen DRAM-Generationen könnte als Gate-Elektrode (sowohl im Transistor als auch im DRAM-Kondensator) ein Metall in Frage kommen. Gegenüber einer poly-Si-Elektrode hat eine Metall-Elektrode folgende Vorteile: Keine Bildung von einer SiO_2 -Grenzfläche (SiO_2 senkt zwar den Leckstrom, verringert jedoch die Kapazität stark), kein Spannungsabfall im Metall (Kapazitätsgewinn), geringerer Kontaktwiderstand und variable Austrittsarbeit (durch unterschiedliche Metalle oder durch unterschiedliche Konzentrationen von Ti bzw. N im TiN). Allerdings muss das Metall (bei Anwendung in Trenches) hitzeresistent bis $1050^\circ C$ sein, da es bei der Aktivierung des poly-Si (, welches z.B. für Transistoren verwendet wird) dieser Temperatur ausgesetzt wird (Trenches werden im Prozess als erstes aufgefüllt). Ein möglicher Kandidat eines solchen Metalls ist TiN. Der Einfluss von TiN auf das Leckstromverhalten von ALD- Al_2O_3 wird im Folgenden untersucht.

Durch die Verwendung von TiN als Gate-Elektrode müsste der Leckstrom bei negativen Gate-Spannungen deutlich kleiner bei einer n^+ -poly Si-Elektrode sein, da die Austrittsarbeit von TiN um ca. $0.5eV$ größer als die des n^+ -poly Si ist, wodurch auch die um ca. $0.5eV$ größer ist. Auch die Barrierenreduzierung, welche nur bei einer Halbleiter-Elektrode aufgrund der Bandverbiegung vorkommt, müsste den Leckstrom bei Strukturen mit einer TiN-Elektrode gegenüber dem Leckstrom bei Strukturen mit einer Si-Elektrode reduzieren. Der Einfluss der Bildladung ist jedoch bei einer TiN-Elektrode größer als bei einer Si-Elektrode, was allerdings die relativ großen Leckströme nicht erklären kann. Die SiO_x -Schicht, welche nur bei Verwendung einer Si-Elektrode existiert, erhöht eher den Leckstrom (weil die Leitungsbandenergie des Al_2O_3 und des Si_3N_4 bei negativen Gate-Spannungen durch die SiO_x -Schicht erniedrigt wird). Erst durch die Verwendung einer größeren Elektronenaffinität (im Vergleich zu den Strukturen mit poly-Si Elektrode) von Al_2O_3 und Si_3N_4 (hier anstatt $\chi_{el}=2.35eV$ gilt $\chi_{el}=2.65eV$), und einer kleineren effektiven Elektronenmasse in Al_2O_3 (hier anstatt

$m_{eff}=0.42m_0$ gilt $m_{eff}=0.23m_0$) erhält man eine zufrieden stellende Übereinstimmung von den experimentellen und den berechneten Daten (Abbildung 5-22).

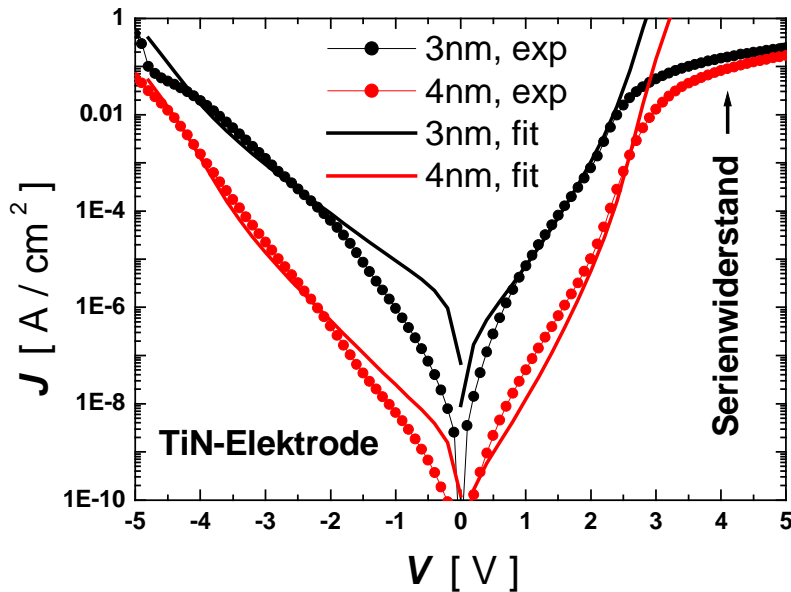


Abbildung 5-22: Experimentelle und berechnete (Tunneln) $J(V)$ -Charakteristik der 3nm und 4nm Proben mit TiN-Elektrode. Hier wurde als Elektronenaffinität für Al_2O_3 und Si_3N_4 $\chi_{el}=2-65eV$ und als effektive Elektronenmasse im Al_2O_3 $m_{eff}=0.23m_0$ verwendet. Die restlichen Parameter sind identisch mit den Parametern, die für die Leckstromsimulation der poly-Si/SiO_x/ALD- $Al_2O_3/Si_3N_4/n$ -Si-Strukturen (Kapitel 5.1.2.1) verwendet wurden.

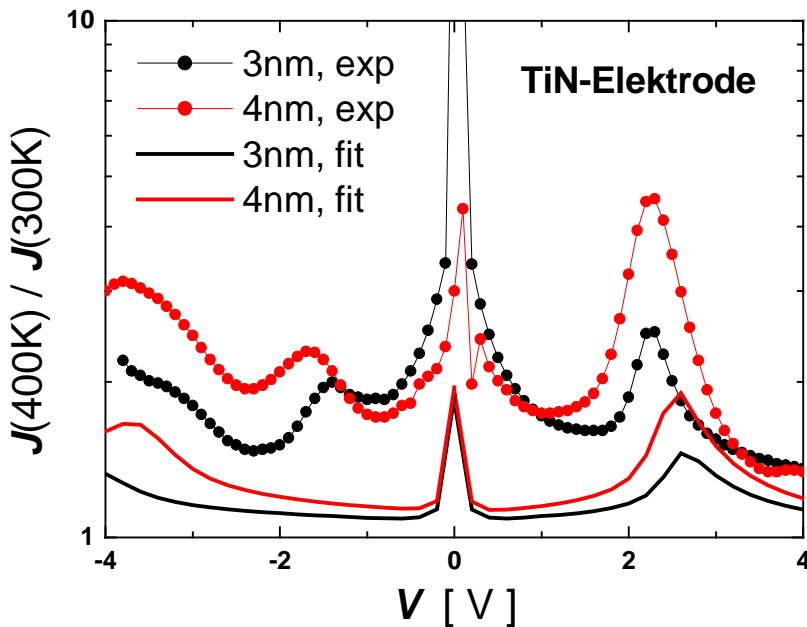


Abbildung 5-23: Das Verhältnis der Leckströme bei $T=300K$ und $T=400K$ als Funktion der Gatespannung für die TiN/ $Al_2O_3/Si_3N_4/N$ -Si-Strukturen.

Auch die berechnete Temperaturabhängigkeit stimmt mit der gemessenen gut überein. In Abbildung 5-23 ist das Verhältnis $J(400K)/J(300K)$ für die 3nm und die 4nm Probe als

Funktion der Gatespannung dargestellt. Die „transition voltages“ von Theorie und Experiment sind nahezu identisch, wobei die berechneten Verhältnisse $J(400K)/J(300K)$ etwas kleiner als die gemessenen sind. Die Temperaturabhängigkeit der Proben mit TiN-Elektrode ist kleiner als die der Proben mit n^+ -poly Si-Elektrode. Dies ist auf die verkleinerte effektive Elektronenmasse im Al_2O_3 zurückzuführen.

Der relativ hohe Leckstrom bzw. die hohe Elektronenaffinität in Al_2O_3 und in Si_3N_4 und die verkleinerte effektive Elektronenmasse im Al_2O_3 beweisen, dass sich die Isolatoren durch das TiN hinsichtlich des Leckstromverhaltens deutlich verschlechtern.

5.1.3 Durchbruchmodell von Al_2O_3

SiO_2 ist das am häufigsten untersuchte Material in Bezug auf den elektrischen Durchbruch. Trotzdem existiert kein allgemein anerkanntes mikroskopisches Modell, welches diesen Durchbruch erklärt. Bei hinreichend dicken SiO_2 -Schichten ($>3nm$, FN-Bereich) ist bekannt, dass die Schädigung kumulativ mit der geflossenen Ladung wächst, das heißt, dass die Durchbruchzeit t_{BD} der Relation $t_{BD} \sim J^1$ genügt.

Ganz anders ist das Verhalten von Al_2O_3 – es gilt näherungsweise $t_{BD} \sim J^2$. Diese Relation wurde durch sehr viele Messungen bestätigt, wurde jedoch weder beachtet noch wurde versucht eine physikalische Erklärung zu finden.

In diesem Kapitel wird ein neues Durchbruchmodell von Al_2O_3 vorgestellt. Dieses Modell stützt sich auf die intrinsischen Eigenschaften von Al_2O_3 und auf experimentelle Ergebnisse, die im Rahmen von Zuverlässigkeitsuntersuchungen bei Infineon erhalten wurden.

Die Durchbruchzeiten bei angelegten Gatespannungen um $V_{Gate} = -3.2V$ verhalten sich wie (experimentelle Daten, die in **Abbildung 5-24** dargestellt sind):

$$t_{BD} \propto \exp\left(13.8 \cdot \frac{V_{Gate}}{V}\right). \quad [5-9]$$

Für die Steigung der Tangente des Leckstromes bei $V_{Gate} = -3.2V$ gilt (**Abbildung 5-24**):

$$J \propto \exp\left(-6 \cdot \frac{V_{Gate}}{V}\right). \quad [5-10]$$

Aus den Gleichungen [5-9] und [5-10] folgt für den Zusammenhang zwischen Durchbruchzeit und Stromdichte für Al_2O_3 :

$$t_{BD} \propto J^{-2.3}. \quad [5-11]$$

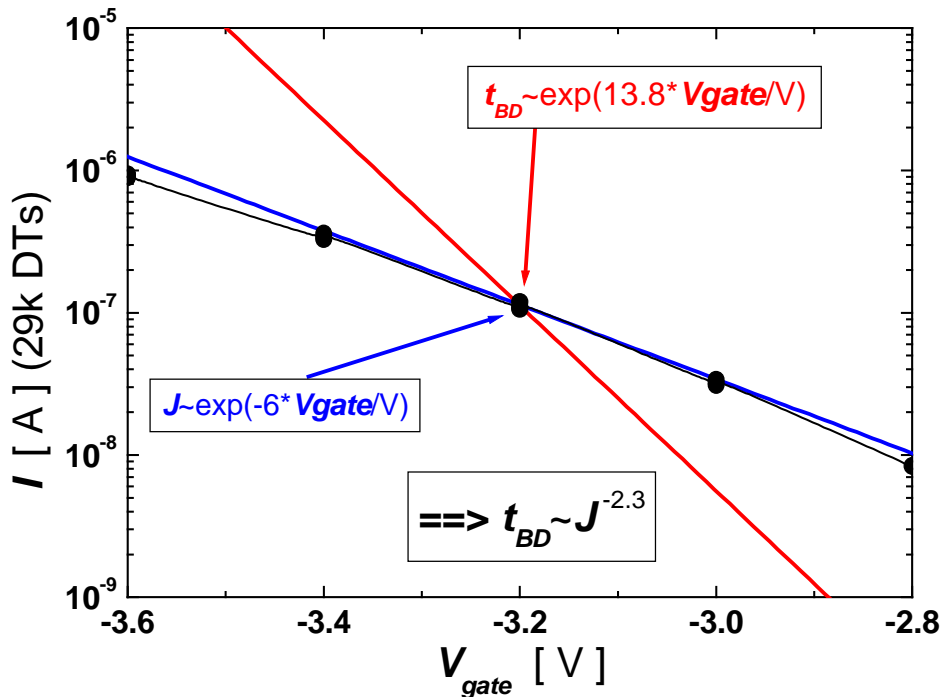


Abbildung 5-24: Strom durch 29000 „Deep Trenches“ als Funktion der angelegten Gatespannung (schwarze Punkte). Die Tangente zu diesem Strom bei $V_{Gate}=-3.2$ V ist als blaue Linie dargestellt. Die Durchbruchzeiten bei Spannungen um $V_{Gate}=-3.2$ V sind durch eine rote Linie dargestellt.

Vereinfacht lässt sich der Unterschied im Durchbruchverhalten von SiO_2 und Al_2O_3 wie folgt erklären:

Im SiO_2 reicht ein Elektron für einen Schädigungsprozess des Oxids, während im Al_2O_3 ein 2-Elektronen-Prozess für eine Schädigung notwendig ist (siehe **Abbildung 5-25**). Hier fällt die Analogie zur 2-Photonen-Absorption von Molekülen auf, bei der die Zahl der Übergänge pro Sekunde, die ein Molekül unter Absorption von zwei Photonen macht, proportional zum Quadrat der eingestrahelten Intensität ist [32].

Im Folgenden bezeichnet ΔE die Energie, die durch einen inelastischen Prozess frei wird und $E_S(\text{Iso})$ die Energie die mindestens notwendig ist, um den Isolator zu schädigen.

Beim 1-Elektron-Schädigungsprozess ($\Delta E \geq E_S(\text{Iso})$) tunnelt ein Elektron in einen angeregten Zustand (Vergleich **Abbildung 5-25**). Danach relaxiert es in den Grundzustand, wobei die dabei frei werdende Energie für eine Schädigung des Isolators ausreicht. Da in diesem Fall jedes Elektron denselben Schaden anrichtet, gilt in diesem Fall: $t_{BD} \propto J^1$.

Beim 2-Elektronen-Schädigungsprozess ($E_S(\text{Iso}) \geq \Delta E \geq E_S(\text{Iso})/2$) tunnelt ein Elektron in einen angeregten Zustand. Falls innerhalb der Lebensdauer des angeregten Zustandes ein weiteres Elektron in den angeregten Zustand tunnelt, befinden sich zwei Elektronen gleichzeitig im angeregten Zustand. Danach kann ein Elektron in den Grundzustand relaxieren und die dabei frei werdende Energie an das andere Elektron abgeben. Dieses Elektron kommt dadurch in einen virtuellen Zustand und kann nach Relaxation in den Grundzustand $2\Delta E$ abgeben, wodurch schließlich das Al_2O_3 geschädigt wird.

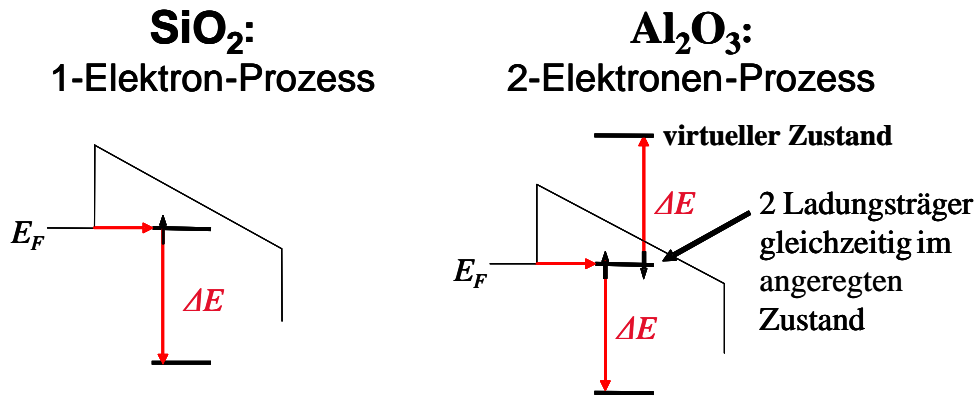


Abbildung 5-25: Schematische Darstellung des Schädigungsprinzips in SiO_2 und Al_2O_3 . Die roten Pfeile beschreiben Elektronenübergänge und die kleinen, schwarzen Pfeile beschreiben den Spin des Elektrons.

Damit der 2-Elektronen-Schädigungsprozess realisierbar ist, müssen die Zustände folgende Bedingungen erfüllen:

1. Sowohl der Grundzustand als auch der erste angeregte Zustand müssen in der Bandlücke des Isolators liegen.
2. Der Grundzustand darf nicht besetzt sein. Wäre dieser einfach besetzt, könnte das Elektron aus dem virtuellen Zustand nicht mehr relaxieren, da der Grundzustand schon voll besetzt wäre (Pauli-Prinzip).
3. Es muss gelten: $E_S(\text{Iso}) \geq \Delta E \geq E_S(\text{Iso})/2$. Wäre $E_S(\text{Iso}) < \Delta E$ dann würde der 1-Elektron-Schädigungsprozess dominieren. Wäre $\Delta E < E_S(\text{Iso})/2$ dann würde der 2-Elektronen-Prozess den Isolator nicht schädigen.

Sowohl der Grundzustand als auch der erste angeregte Zustand von den so genannten Farbzentren haben Energien, welche in der Bandlücke eines Al_2O_3 -Einkristall liegen (siehe **Abbildung 5-26a**) [33]. Farbzentren sind Sauerstofffehlstellen im Al_2O_3 . Ihren Namen verdanken die Farbzentren der Tatsache, dass bei der Relaxation der Elektronen vom ersten angeregten Zustand in den Grundzustand elektromagnetische Wellen im optischen Bereich emittiert werden (**Abbildung 5-26b**). Die energetische Lage (ϕ_F) der Zustände in der Bandlücke ist jedoch nicht exakt bekannt. Es gibt verschiedene Arbeiten, die verschiedenen Ergebnisse liefern. Außerdem handelt es sich in unserem Fall um dünne polykristalline (oder amorphe) Al_2O_3 -Schichten (und nicht um einen Einkristall), bei denen die Energie der Bandlücke kleiner als im Einkristall ist. Dadurch verändert sich auch die energetische Lage der Zustände in der Bandlücke. Hier ist zu beachten, dass nur dann Elektronen den angeregten Zustand besetzen können, wenn für das elektrische Feld im Isolator gilt:

$$F \geq \frac{e\phi_B - e\phi_F}{d_F}, \quad [5-12]$$

wobei $e\phi_F$ die Differenz von der Energie der Al_2O_3 -Leitungsbandkante und der Energie des angeregten Zustandes des Farbzentrens ist und d_F die Distanz von Farbzentrum zur emittierenden Elektrode ist (siehe **Abbildung 5-26a**). Falls die Bedingung [5-12] für

kleine elektrische Felder nicht erfüllt ist, kann das Farbzentrum nicht besetzt werden und der Isolator wird durch das Farbzentrum nicht geschädigt.

Auch die zweite Bedingung für den 2-Elektronen-Schädigungsprozess kann durch die Farbzentren erfüllt werden. Man unterscheidet Farbzentren hinsichtlich der Anzahl der Elektronen, welche sich im Farbzentrum befinden. Im F-Zentrum befinden sich zwei Elektronen, während sich im F^+ -Zentrum nur ein Elektron befindet. Also erfüllt ein F^+ -Zentrum, dessen Elektron angeregt ist und ein F-Zentrum, dessen beide Elektronen angeregt sind, die zweite Bedingung für den 2-Elektronen-Schädigungsprozess.

Die 3. Bedingung ist womöglich auch erfüllt. Die für die Erzeugung einer Sauerstofffehlstelle (eines Schadens) notwendige Energie im Al_2O_3 $E_S(Al_2O_3)$ ist nach Carrasco et al. [35] gegeben durch $E_S(Al_2O_3)=10eV$ und nach Xu et al. [36] gegeben durch $E_S(Al_2O_3)=5.83eV$. Beide Autoren betrachten große Superzellen aus Al_2O_3 und berechnen mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie die Energie, die notwendig ist, um die Bindungen eines Sauerstoffatoms zu brechen. Die Energie ΔE , die beim Übergang eines Elektrons aus dem angeregten Zustand des F-Zentrums in den nicht besetzten Grundzustand frei wird (Vergleich **Abbildung 5-26b**) beträgt 3.8eV [34]. Die 3. Bedingung ($E_S(Iso) \geq \Delta E \geq E_S(Iso)/2$) ist also nur für den Wert von Xu et al. $E_S(Al_2O_3)=5.83eV$ erfüllt. Die exakte Energie $E_S(Al_2O_3)$ in einer speziellen polykristallinen (oder amorphen) Al_2O_3 -Schicht ist nicht bekannt. Es ist auf jeden Fall nicht unrealistisch anzunehmen, dass die 3. Bedingung für das F^{2+} -Zentrum erfüllt ist.

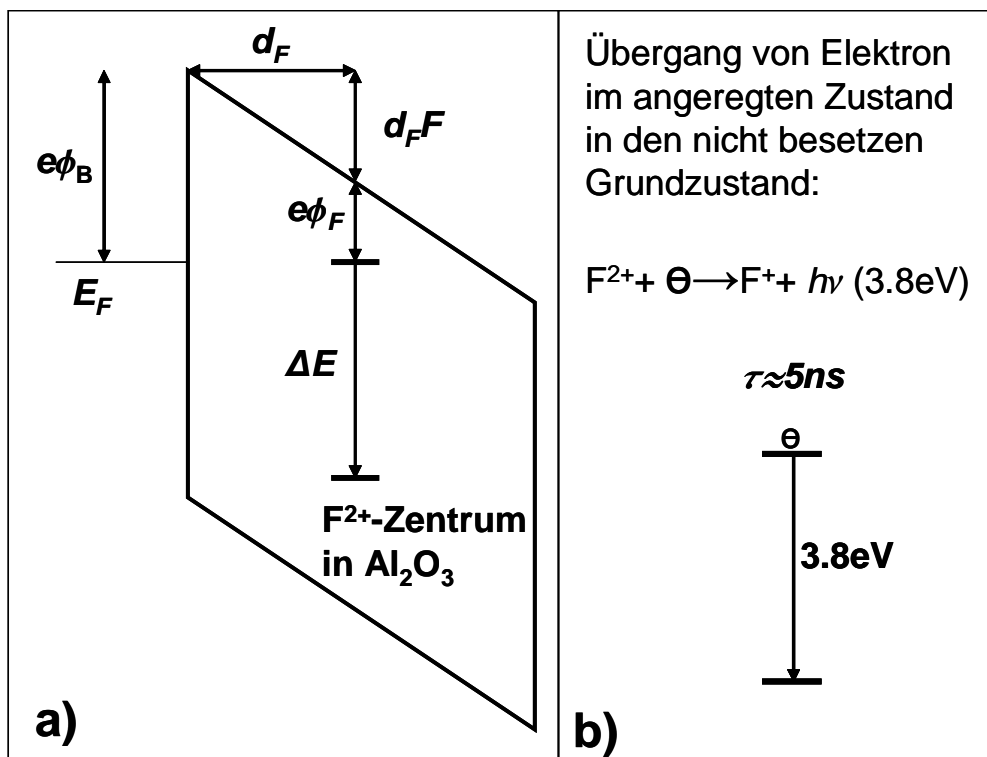


Abbildung 5-26: In a): Banddiagramm von Al_2O_3 bei angelegtem elektrischen Feld F mit dem Grundzustand und erstem aberegten Zustand eines F^{2+} -Zentrum in der Bandlücke. Links davon ist die Fermienergie der emittierenden Elektrode eingezeichnet. Die Elektronen aus der emittierenden Elektrode können den angeregten Zustand nur bevölkern, wenn die Bedingung $F \geq e(\phi_B - \phi_F)/d_F$ erfüllt ist. In b): Für den 2-Elektronen-Schadensprozess relevanter Elektronenübergang.

Im Folgenden wird die Funktion $t_{BD}(J)$ für den Fall des 2-Elektronen-Prozesses hergeleitet.

Dazu betrachtet man einen Isolator mit n Fehlstellen, welche durch einen Grundzustand E_1 und einen angeregten Zustand E_2 ($\Delta E = E_2 - E_1$) charakterisiert sind. Der Einfangquerschnitt der nicht besetzten, angeregten Zustände sei σ_0 und der Einfangquerschnitt der einfach besetzten, angeregten Zustände sei σ_1 . Die Besetzungsrate $\frac{dn_0}{dt}$ der nicht besetzten Zustände ergibt sich aus Multiplikation der Anzahl nicht besetzter Zustände $n_0 = n - n_1$ mit der Zahl an Elektronen $J\sigma_0$, die pro Sekunde auf den Zustand treffen bzw. den Zustand besetzen:

$$\frac{dn_0}{dt} = (n - n_1)J\sigma_0 . \quad [5-13]$$

Die „Entleerungsrate“ $\frac{dn_1}{dt}$ der besetzten Zustände erhält man aus dem Zerfallgesetz wie folgt:

$$n = n_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \Rightarrow n_1 = n \exp\left(\frac{t}{\tau}\right) \Rightarrow \frac{dn_1}{dt} = \frac{1}{\tau} n \exp\left(\frac{t}{\tau}\right) = \frac{1}{\tau} n_1 \quad [5-14]$$

Im thermischen Gleichgewicht sind Besetzungs- und Entleerungsrate identisch. Die Anzahl besetzter Zustände im thermischen Gleichgewicht folgt deshalb durch Gleichsetzen der Gleichungen [5-13] und [5-14] und lautet:

$$n_1 = \frac{nJ\sigma_0}{J\sigma_0 + \tau^{-1}} \quad [5-15]$$

Die Besetzungsrate $\frac{dn_1}{dt}$ der einfach besetzten Zustände folgt durch Multiplikation der Anzahl besetzter Zustände (im thermischen Gleichgewicht) n_1 mit der Anzahl der Elektronen $J\sigma_1$, welche pro Sekunde den Zustand besetzen. Mit der Gleichung [5-15] erhält man:

$$\frac{dn_1}{dt} = n_1 J\sigma_1 = \frac{n\sigma_0\sigma_1}{J\sigma_0 + \tau^{-1}} J^2 . \quad [5-16]$$

Nach einer gewissen Zeit $t=t_{BD}$ ist eine kritische Anzahl n_{krit} an zweifach besetzten angeregten Zuständen erreicht und der dadurch verursachte Schaden führt zum elektrischen Durchbruch. Aus Gleichung [5-16] folgt dann mit $\frac{dn_1}{dt} = \frac{n_{krit}}{t_{BD}}$:

$$t_{BD} = \frac{n_{krit} (J\sigma_0 + \tau^{-1})}{n\sigma_0\sigma_1} J^{-2} \approx \frac{n_{krit}}{n\sigma_0\sigma_1\tau} J^{-2} . \quad [5-17]$$

Die hier abgeleitete Durchbruchzeit ist näherungsweise proportional zu J^{-2} , was die experimentell beobachtete Abhängigkeit (Vergleich Gleichung [5-11]) sehr gut wiedergibt. Das folgende Zahlenbeispiel liefert realistische Werte für die Durchbruchzeit und bestätigt somit dieses Durchbruchmodell, welches auf einem 2-Elektronen-Schadensprozess in F^{2+} -Zentren basiert. Die Lebensdauer des ersten angeregten Zustandes des F^{2+} -Zentrums in Al_2O_3 beträgt $\tau=5ns$ (siehe **Abbildung 5-26b**) [34]. Mit $n_{krit}/n=0.01$ und $\sigma_0\sigma_1=10^{-28}cm^4$ erhält man bei einer Stromdichte von $J=1mA/cm^2 \approx 0.001/1.6 \cdot 10^{-19}/s/cm^2$ eine Durchbruchzeit von $t_{BD} \approx 500s$. Dieses Rechenbeispiel liegt in der richtigen Größenordnung. Die gemessene Lebensdauer der Daten aus **Abbildung 5-24** ist: $t_{BD}(V_{Gate} = -3.4V)=43s$, $t_{BD}(V_{Gate} = -3.2V)=686s$.

Die Berechnung der Durchbruchzeit ist allerdings sehr ungenau, da die Größen n_{krit}/n , $\sigma_0\sigma_1$ nicht bekannt sind. Außerdem wird hier die statistische Schwankung der Schichtdicke, wodurch der Leckstrom lokal variiert, nicht berücksichtigt. Hier wird angenommen, dass der Strom homogen ist.

Bei diesem Modell ist auch zu beachten, dass die Lebensdauer des angeregten Zustandes nicht nur durch den Relaxationsprozess des Elektrons in den Grundzustand bestimmt ist. Ein Elektron kann den angeregten Zustand auch verlassen, indem es in das Leitungsband des Isolators oder des Substrates tunnelt. Dominiert dieser Prozess gegenüber dem Relaxationsprozess erhält man eine kleinere Lebensdauer ($\tau < 5ns$). Die „Tunnelzeit“, die ein Elektron benötigt um aus dem angeregten Zustand zu tunnelt, hängt vom Ort und von der Energie des angeregten Zustandes, vom Gesamtpotential des Farbzentrens, vom elektrischen Feld, von der effektiven Elektronenmasse und von der Frequenz, mit welcher das Elektron auf die Barriere trifft, ab. Da diese Größen im Allgemeinen unbekannt sind, kann die Lebensdauer nicht genauer bestimmt werden. In jedem Fall aber gilt $\tau \leq 5ns$.

5.2 Tantalpentoxid (Ta_2O_5)

Mit einer hohen Dielektrizitätskonstanten von $20 < \epsilon_d < 60$ (je nach Morphologie) und den isolierenden Eigenschaften zählt Ta_2O_5 zu den Kandidaten, welche für zukünftige high-k DRAM-Anwendungen in Frage kommen. Allerdings ist es nicht temperaturresistent bis $T=1050^\circ C$, weswegen Ta_2O_5 nur bei Stacks (Isolator des DRAM-Kondensators wird erst nach der Aktivierung des Siliziums abgeschieden) Anwendung finden kann.

In diesem Kapitel werden die elektrischen Eigenschaften von Ta_2O_5 , welches sich als Isolator zwischen zwei Ru-Elektroden befindet, diskutiert. Ebenso wie TiN ist Ru eine mögliche Alternative zu hochdotiertem Silizium für die Elektroden in DRAM-Kondensatoren.

Es wurden $J(V)$ -Charakteristiken von 3 Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Strukturen mit Ta_2O_5 -Schichtdicken von $d(Ta_2O_5)=12nm$, $d(Ta_2O_5)=15nm$ und $d(Ta_2O_5)=18nm$ gemessen. Die Proben zeigen einerseits ein sehr gutes Leckstromverhalten (bei $V=1V$ und $EOT=1.8nm$

nur $J \approx 3 \cdot 10^{-11} \text{ A/cm}^2$) und andererseits eine sehr hohe Defektdichte. Es konnten nur Proben mit Elektrodenflächen $A \leq 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2$ untersucht werden, da bei den Proben mit größerer Elektrodenfläche der elektrische Durchbruch schon bei sehr kleinen elektrischen Felder erfolgt.

Durch Kapazitätsmessungen wurde eine Dielektrizitätskonstante von Ta_2O_5 in allen drei Proben von $\epsilon(Ta_2O_5)=26$ bestimmt. Die $J(V)$ -Daten konnten mit dem MSTAT-Modell gefittet werden. Allerdings sind hier die Traps nicht wie in den Kapiteln 3.1, 5.1.1 und 5.4 elektrisch neutral, sondern positiv geladen (Gesamtladung des Isolators muss deswegen nicht zwangsweise positiv geladen sein, da auch negativ geladene Traps, welche kaum Einfluss auf den Strom haben, im Isolator existieren können). Die Traps sind also durch das Coulombpotential

$$eV_T(x) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_d|x-x_T|} \quad [5-18]$$

charakterisiert, wobei x_T den Ort des Traps (Vergleich Kapitel 2.2.3, **Abbildung 2-8**) beschreibt. Die dynamische Dielektrizitätskonstante ϵ_d bestimmt hier neben dem Bildladungspotential auch das Trappotential. Es ist zu beachten, dass das Trappotential prinzipiell beliebig ist. Hier wurde Gleichung [5-18] gewählt, damit keine zusätzlichen Fitparameter im MSTAT-Modell hinzukommen. Wie später gezeigt wird, erniedrigt sich durch den Einfluss der positiv geladenen Traps die Energie der Leitungsbandkante des Isolators.

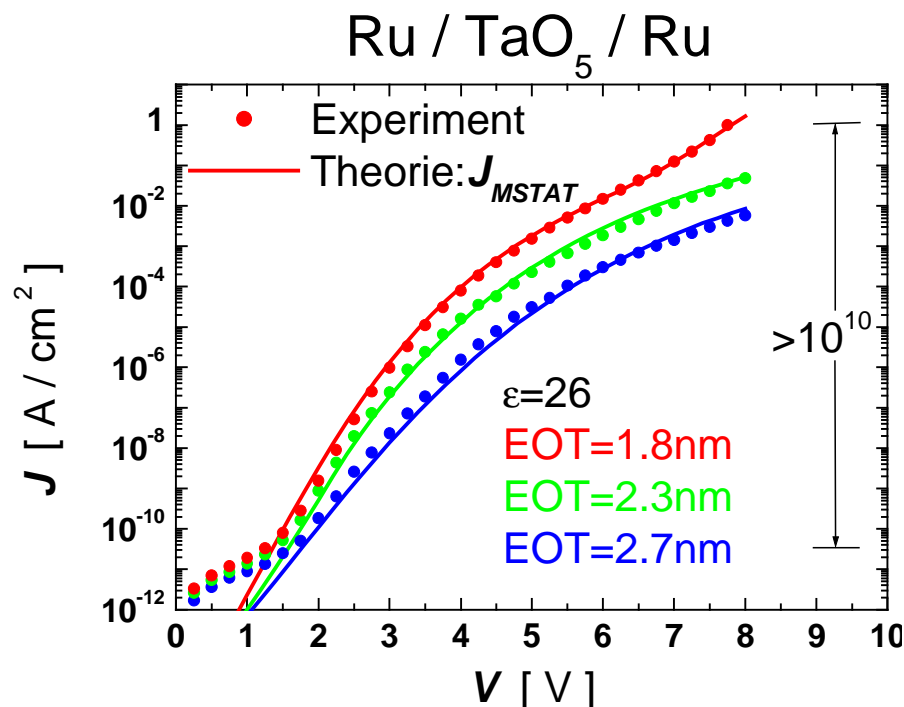


Abbildung 5-27: Gemessene und berechnete $J(V)$ -Daten von drei $Ru/Ta_2O_5/Ru$ -Strukturen mit unterschiedlichen Ta_2O_5 -Schichtdicken. Die Berechnung wurde mit Hilfe des MSTAT-Modells durchgeführt. Bei allen drei Proben erhält man eine nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment über 10 Größenordnungen im Leckstrom.

Die gemessenen und die mit dem modifizierten MSTAT-Modell berechneten $J(V)$ -Daten der drei Ta_2O_5 -Proben sind in **Abbildung 5-27** dargestellt. Die nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie bestätigt das MSTAT-Modell. Hier ist besonders die Übereinstimmung bei der dünnen (in **Abbildung 5-27** rot) Probe hervorzuheben, da diese über 10 Größenordnungen im Strom zutrifft und der Übergang von MSTAT zu FNT (zwischen $V=6.5V$ und $V=7.0V$) durch die Rechnung korrekt simuliert wurde.

Die für die Berechnungen verwendeten Parameter sind in **Tabelle 7** aufgelistet. Bis auf den zu kleinen Einfangquerschnitt sind diese Werte realistisch. Angesichts der positiv geladenen Traps, müsste der Einfangquerschnitt deutlich größer als $10^{-21}cm^2$ sein.

Tabelle 7: Die Parameter für die Berechnung des MSTAT-Stromes in den drei Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Strukturen.

N_T	m_{ox}	$e\phi_B(Ru/Ta_2O_5)$	ϵ_d	σ_T
$5 \cdot 10^{18} cm^{-3}$	$0.33m_0$	2.4eV	1.45	$10^{-21}cm^2$

Der Einfluss der positiv geladenen Traps und des Bildladungseffektes auf die Leitungsbandkante des Ta_2O_5 ist anhand der 15nm dicken Probe in **Abbildung 5-28** dargestellt. Die Erniedrigung der Leitungsbandkante des Isolators durch die positiv geladenen Traps und den Bildladungseffekt hängt stark von der dynamischen Dielektrizitätskonstanten (siehe die Gleichungen [5-18] und [2-15]) und von der Trapkonzentration (da für den Abstand d der Traps gilt $d=N_T^{-1/3}$) ab.

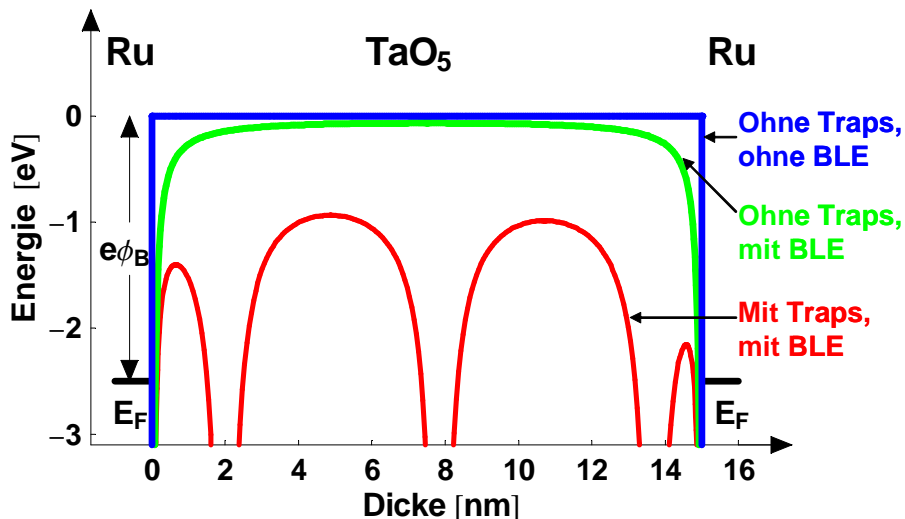


Abbildung 5-28: Banddiagramm einer Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Struktur mit einer Ta_2O_5 -Schichtdicke von $d(Ta_2O_5)=15nm$ und einer Position des „ersten Traps“ bei $y=2nm$. Die Werte für die Trapkonzentration, die Barriere und die dynamische Dielektrizitätskonstante wurden von Tabelle 7 übernommen. Die Leitungsbandkante von Ta_2O_5 wurde sowohl ohne Berücksichtigung der Traps und ohne Berücksichtigung des Bildladungseffektes (BLE) (blau) als auch ohne Berücksichtigung der Traps und mit Berücksichtigung des BLE (grün) und mit Berücksichtigung der Traps und mit Berücksichtigung des BLE (rot) berechnet. Durch Berücksichtigung der positiv geladenen Traps wird die Leitungsbandkante bzw. die Barriere deutlich reduziert.

Die Temperaturabhängigkeit der $J(V)$ -Charakteristik konnte nicht bestimmt werden, da die Proben bereits bei Temperaturen von $T=50^\circ\text{C}$ stark degradieren (auch ohne elektrisches Feld). Aufgrund des großen Parameterfeldes der Leckstrommodelle sind die Informationen bezüglich der Temperaturabhängigkeit der $J(V)$ -Charakteristik notwendig, um eindeutige Simulationsergebnisse zu erhalten. Deswegen und wegen dem auffallend kleinen Einfangquerschnitt sind die erhaltenen Fitparameter (siehe **Tabelle 7**) nicht eindeutig und deswegen mit Vorsicht zu genießen.

5.3 Praseodymoxid (Pr_2O_3)

Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten $Al/Pr_2O_3/p\text{-Si}$ -Strukturen wurden an der Universität der Bundeswehr prozessiert. Bei den durchgeführten $I(V)$ -Messungen wurden die Proben vor der Messung in Luft annealed. Die Annealtemperaturen lagen zwischen Raumtemperatur und 220°C . Nach dem Anneal wurden die Proben immer auf Raumtemperatur abgekühlt. Anschließend wurde die $J(V)$ -Charakteristik gemessen (siehe **Abbildung 5-29**). Es zeigt sich, dass sich die Proben nach einem Anneal bei $T \geq 445\text{K}$ irreversibel verändern. Bei größerer Annealtemperatur und längerer Annealdauer sinkt die Stromdichte durch die $Al/Pr_2O_3/p\text{-Si}$ -Struktur. Allerdings sinkt auch die Kapazität nach einem Anneal bei $T=495\text{K}$ für 640 Minuten deutlich (bis um Faktor 3, siehe **Abbildung 5-30**).

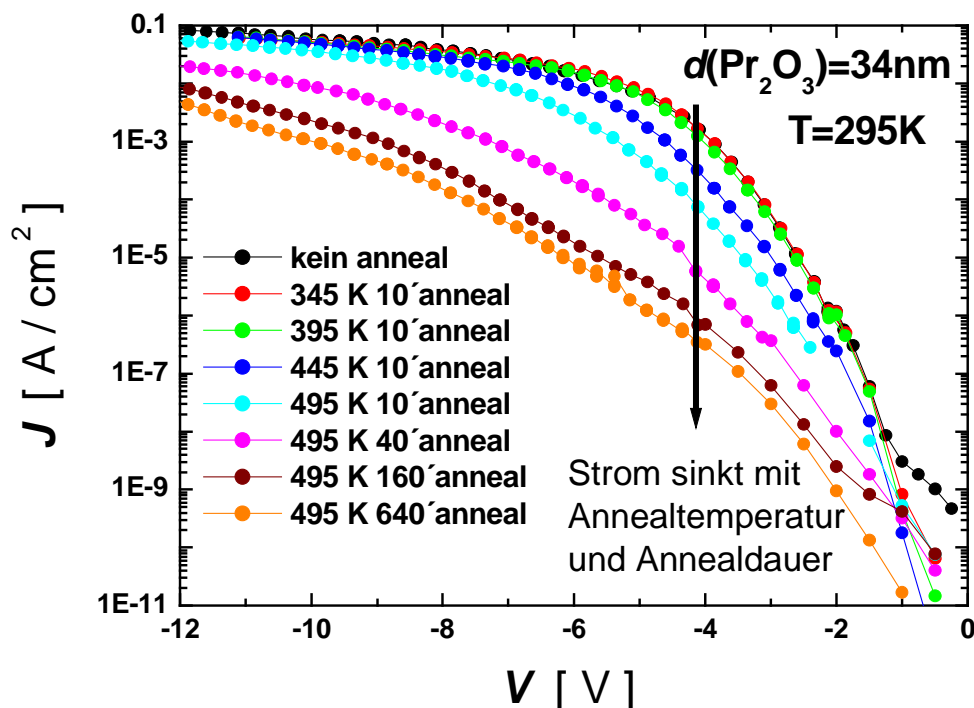


Abbildung 5-29: $J(V)$ -Messungen an einer $Al/Pr_2O_3/p\text{-Si}$ -Struktur bei Raumtemperatur nach verschiedenen Annealtemperaturen und verschiedener Annealdauer (Anneal an Luft). Durch den Anneal für Temperaturen $T > 445\text{K}$ verändert sich die Probe irreversibel. Je höher die Annealtemperatur und je länger der Anneal (bei 495K) desto geringer die Stromdichte.

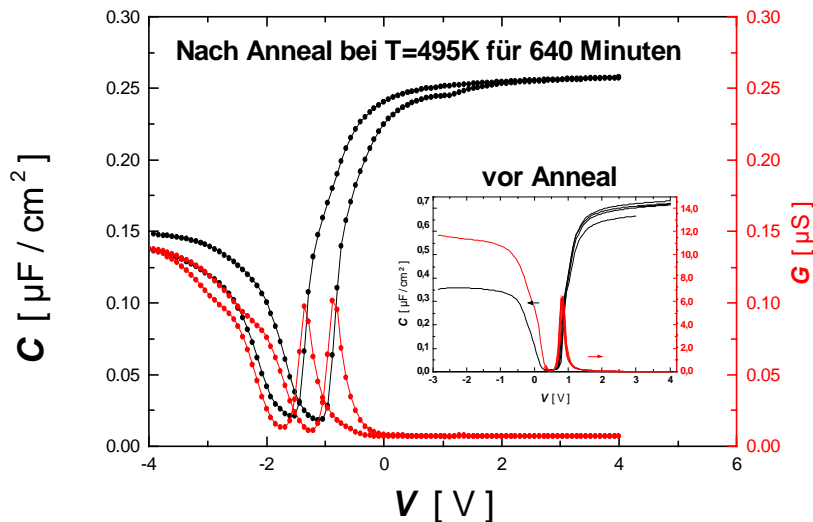


Abbildung 5-30: $C(V)$ - und $G(V)$ -Charakteristik einer $\text{Al}/\text{Pr}_2\text{O}_3/\text{p-Si}$ -Struktur vor (eingebettetes Diagramm) und nach einem Anneal an Luft bei $T=495\text{K}$ für 640 Minuten. Nach dem Anneal sinkt die Kapazität um einen Faktor 3 und zeigt im Gegensatz zu der Probe vor dem Anneal Hysterese.

Dadurch, dass sich die Proben bei hohen Temperaturen irreversibel verändern und wir den Grund dafür nicht kennen, wurde hier auf eine Leckstromsimulation verzichtet. Interessant ist, dass nach weiteren Annealsteps bei niedrigeren Temperaturen die Probe sich nicht mehr verändert. Dies ist bemerkenswert, da alle Proben zuvor schon bei 600°C in O_2 annealed wurden und in diesem Fall aber eine Probenänderung durch weitere Anneals bei niedrigeren Temperaturen stattgefunden hat. Dies schließt aus, dass die Probenänderung durch Erhitzung zustande kommt, dass sich eine SiO_2 -Schicht an der $\text{Pr}_2\text{O}_3/\text{Si}$ -Grenzfläche bildet, da diese sich bei dem 600°C Anneal in O_2 gebildet hätte. Letztendlich bleibt der Grund für die Probenänderung durch Erhitzen unklar. Dies war ein Grund weswegen die weitere Herstellung und Optimierung von Pr_2O_3 eingestellt wurde.

5.4 Siliziumdioxid (SiO_2)

Da die Energien der Leitungs- und Valenzbandkante und die effektive Elektronenmasse von SiO_2 bekannt sind, eignet sich SiO_2 für die Elektrodencharakterisierung. Wie in Kapitel 5.1.2.3 beschrieben bieten Metall-Elektroden in einem DRAM-Kondensator Vorteile gegenüber einer Poly-Si-Elektrode. Neben TiN ist Nb ein weiterer Kandidat, der für den Einsatz in künftigen DRAM's in Frage kommt. In diesem Abschnitt werden die $J(V)$ -Charakteristiken von verschiedenen $\text{Nb}/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$ -Strukturen dargestellt und untersucht. Der Vergleich mit den $J(V)$ -Charakteristiken von $\text{Al}/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$ -Strukturen gibt dann Aufschluss über die Eigenschaften der Nb-Elektrode.

Es wurden 4 Proben mit Nb-Elektrode, die sich hinsichtlich der Schichtdicke, der Herstellungsart (trocken oder feucht) und der Temperaturbehandlung (Tempern vor und

nach der Nb-Abscheidung). Ebenso unterscheiden sich die drei Referenzproben mit Al-Elektrode. Der Splitplan ist in **Tabelle 8** dargestellt.

Tabelle 8: Splitplan der Nb (und Al)/ SiO_2 /p-Si-Strukturen.

Probe	Elektrode	$d_{\text{SiO}_2}(\text{C-V})[\text{nm}]$	Oxid	Tempern
1	Nb	5.9	trocken	vor
2	Nb	5.3	trocken	nach
3	Nb	4.7	feucht	vor
4	Nb	3.9	feucht	nach
5	Al	6.8	trocken	vor
6	Al	6.0	trocken	nach
7	Al	5.9	feucht	vor

Die gemessene und die berechnete (reines Tunneln ohne Traps, Vergleich Kapitel 2.1.1.5) $J(V)$ -Charakteristik der Proben mit Al-Elektrode ist in **Abbildung 5-31** dargestellt. Bei der Berechnung wurden nur die Schichtdicke und die Barriere verändert, während die effektive Elektronenmasse im SiO_2 von $m_{\text{eff}}(\text{SiO}_2)=m_0/2$ und die dynamische Dielektrizitätskonstante (zur Bestimmung des Bildladungspotentials an der Metall/ SiO_2 -Grenzfläche) von $\epsilon_d=3$ nicht variiert wurden.

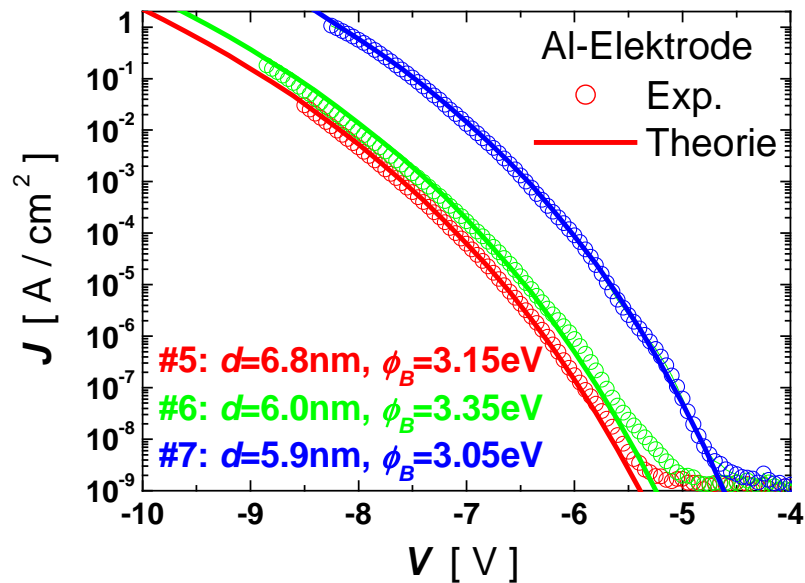


Abbildung 5-31: Gemessene (Symbole) und berechnete (Linien) $J(V)$ -Charakteristik der Proben 5 bis 7. Die Berechnung basiert auf dem Tunneleffekt (ohne Traps) und wird wie in Kapitel 2.1.1.5 beschrieben berechnet. Bei der Berechnung wurden nur die Schichtdicke und die Barriere verändert.

Die Al/ SiO_2 -Barriere ϕ_B variiert kaum bei den Proben 5-7 (3.15eV, 3.35eV, 3.05eV). Mit $e\chi_{el}=W-e\phi_B$ erhält für die durchschnittliche Elektronenaffinität des SiO_2 der Proben 5-7 von $e\chi_{el}=0.92\text{eV}$ (Austrittsarbeit von Al beträgt $W=4.1\text{eV}$). Dies entspricht dem Literaturwert 0.9eV [23].

5 Messergebnisse und Simulation

Die gemessenen und berechneten $J(V)$ -Daten der Proben 1-4 mit Nb-Elektrode sind in **Abbildung 5-32** dargestellt.

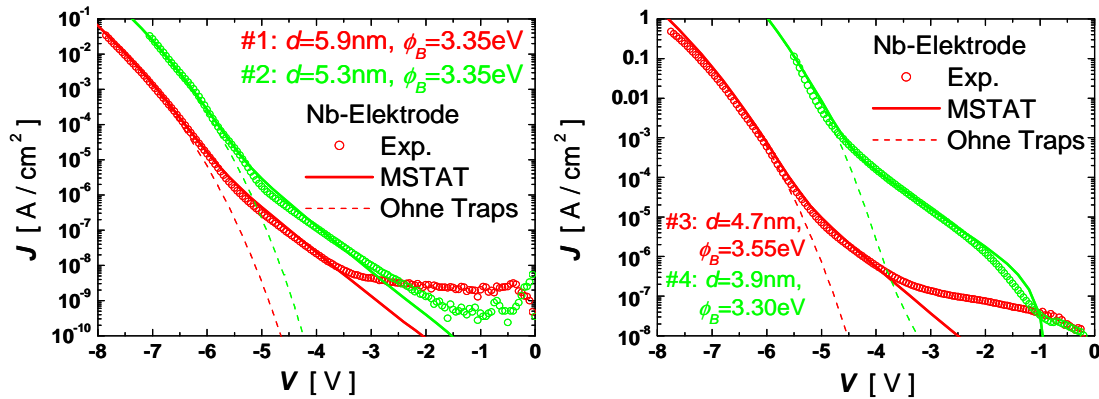


Abbildung 5-32: Die gemessenen (Symbole) und berechneten (Linien und Striche) $J(V)$ -Daten der Proben 1 und 2 (links) und der Proben 3 und 4 (rechts). Nur bei Annahme von Traps (Linie) in der SiO_2 Bandlücke erhält man gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Ohne Traps (Striche) lässt sich der hohe Strom bei kleinen Spannungen nicht erklären.

Bei allen vier Proben mit Nb-Elektrode zeigt sich ein erhöhter Leckstrom bei kleinen Spannungen. Bei den Berechnungen wurde hier das MSTAT-Modell verwendet (siehe Kapitel 3.1). Dabei wurde wie bei den Berechnungen für die Proben mit Al-Elektrode die effektive Elektronenmasse im SiO_2 von $m_{\text{eff}}(\text{SiO}_2)=m_0/2$ und die dynamische Dielektrizitätskonstante (zur Bestimmung des Bildladungspotentials an der Metall/ SiO_2 -Grenzfläche) von $\epsilon_d=3$ verwendet. Neben der Nb/ SiO_2 -Barriere kommen hier jedoch noch die Trapkonzentration und der Einfangquerschnitt der Traps als Fitparameter hinzu. Dieser Einfangquerschnitt wurde bei den Berechnungen der $J(V)$ -Charakteristik der verschiedenen Proben nicht variiert und beträgt $\sigma=2 \cdot 10^{-19} \text{cm}^2$. Das Trappotential wurde wie auch in den Berechnungen vom Leckstrom in CVD- Al_2O_3 (Kapitel 5.1.1) hier vernachlässigt. D. h., es wurden elektrisch neutrale (ungeladene) Traps simuliert, die im Allgemeinen kleine Einfangquerschnitte besitzen. Der hier verwendete Einfangquerschnitt ist sehr klein. Die Nb/ SiO_2 -Barrieren bzw. Al/ SiO_2 -Barrieren und die Trapkonzentrationen im SiO_2 der Proben 1-7 sind in **Tabelle 9** dargestellt.

Tabelle 9: Metall/ SiO_2 -Barrieren $e\phi_B$ und die daraus resultierende Elektronenaffinität von SiO_2 und die Trapkonzentration im SiO_2 für die Proben 1-7.

Probe	$N_T [10^{19} \text{cm}^{-3}]$	$e\phi_B [\text{eV}]$	$e\chi_{el}$
1	6.5	3.35	0.95
2	7	3.35	0.95
3	10	3.55	0.75
4	17	3.30	1.00
5	-	3.15	0.95
6	-	3.35	0.75
7	-	3.05	1.05

Die bei den Berechnungen verwendeten Elektronenaffinitäten variieren kaum und ergeben im Mittel den Literaturwert von 0.9eV [23]. Durch den Einsatz von Nb als Elektrode verschlechtern sich die isolierenden Eigenschaften von SiO_2 , was bei den Berechnungen durch Annahme von Traps in der SiO_2 Bandlücke realisiert wurde. Die durch die Fits erhaltenen Trapkonzentrationen haben realistische Größenordnungen und variieren etwas (siehe **Tabelle 9**). Die gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen und mit dem MSTAT berechneten $J(V)$ -Daten (siehe **Abbildung 5-32**) und die realistischen Fitparameter (siehe **Tabelle 9**) bestätigen nochmals das MSTAT-Modell (siehe Kapitel 3.1) und dessen erfolgreiche Anwendbarkeit auf beliebige Isolatoren, welche Traps besitzen.

6 Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschreibt Methoden, um Isolatoren elektrisch so zu charakterisieren, dass eine eindeutige Bestimmung der leckstromrelevanten Parameter durch Simulation der $J(V)$ -Charakteristik möglich ist. Dies ist vor allem bei Isolatoren, deren Leckstrom durch Traps in der Bandlücke bestimmt ist, nicht trivial, da die Anzahl unbekannter Parameter durch die Existenz von Traps erhöht wird. Alle Isolatoren außer SiO_2 – also alle high-k Materialien (mit Ausnahme des ALD- Al_2O_3) – zeigen ein Leckstromverhalten, das nur durch Traps in der Bandlücke erklärt werden kann. Das multistep trap-assisted-tunneling (MSTAT) Modell wurde eingeführt, um den Leckstrom von Isolatoren mit Traps in der Bandlücke richtig beschreiben zu können. Dadurch wurde die Basis geschaffen, high-k Materialien vollständig hinsichtlich ihrer elektrischen Eigenschaften zu untersuchen.

Zahlreiche Messungen haben gezeigt, dass die physikalischen Parameter wie die Elektronenaffinität, die effektive Elektronenmasse und die Trapkonzentration des Isolators, sensitiv vom Abscheideverfahren – insbesondere von der Prozess- bzw. Annealtemperatur – und vom Elektrodenmaterial abhängen.

Das Leckstromverhalten des mit dem CVD-Abscheideverfahren hergestellten Al_2O_3 kann nur durch Traps in der Bandlücke erklärt werden (Kapitel 5.1.1). Im Gegensatz hierzu ist der Einfluss der Traps im ALD- Al_2O_3 zu vernachlässigen (Kapitel 5.1.2). Darüber hinaus unterscheiden sich die Elektronenaffinität und die effektive Elektronenmasse von CVD- und ALD- Al_2O_3 . Auch die in der Literatur angegebenen Elektronenaffinitäten und effektiven Elektronenmassen von Al_2O_3 decken einen sehr großen Bereich ab. Die unterschiedlichen Werte konnten jedoch noch nicht unterschiedlichen Herstellungsverfahren zugeordnet werden. Um das optimale Herstellungsverfahren hinsichtlich der elektrischen Eigenschaften von Al_2O_3 zu erkennen, müsste man zunächst die CVD- und ALD-Prozesse optimieren und anschließend die Proben mit Hilfe der in der vorliegenden Arbeit eingeführten Methoden vergleichen.

Bei den $J(V)$ -Messungen für die Pr_2O_3 -Proben hat sich gezeigt (Kapitel 5.3), dass sowohl das Leckstromverhalten als auch die Kapazität der Proben nach unterschiedlicher Temperaturbehandlung variiert. Dies ist bei Ta_2O_5 ebenso der Fall, was in **Abbildung 6-1** dargestellt ist. Je höher die Annealtemperatur – das heißt je weiter der Ta_2O_5 -Kristallisationsprozess fortgeschritten ist – desto höher sind Kapazität und Leckstrom. Die in Kapitel 5.2 diskutierten Simulationen wurde an der Probe durchgeführt, die im linken Schaubild von **Abbildung 6-1** rot dargestellt ist. Durch ein tieferes Verständnis für die Abhängigkeiten der leckstromrelevanten Parameter von der Annealtemperatur bzw. der Kristallisation, könnte man die Herstellungsverfahren der high-k Materialien für die DRAM-Anwendung optimieren. Dazu müsste die Temperaturabhängigkeit (bei diesen Proben problematisch, siehe Kapitel 5.2) der in **Abbildung 6-1** gezeigten $J(V)$ -Daten gemessen und anschließend mit dem MSTAT-Modell simuliert werden, so dass alle leckstromrelevanten Parameter als Funktion der Annealtemperatur eindeutig bestimmt werden.

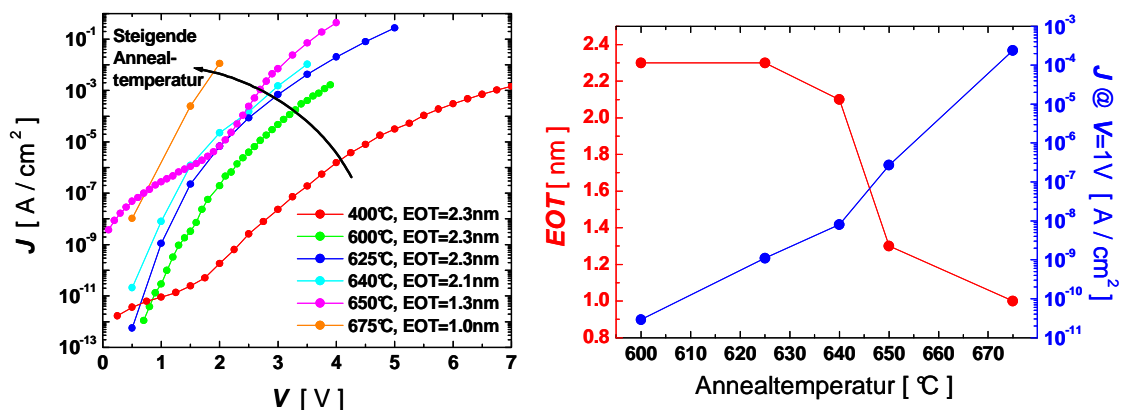


Abbildung 6-1: Links ist die $J(V)$ -Charakteristik von einer 15nm dicken Ta_2O_5 -Schicht (Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Struktur) für verschiedene Annealtemperaturen (jeweils für 10 Minuten) dargestellt. Rechts sind die zugehörigen EOT s (rot) und Stromdichten bei $V=1\text{V}$ (blau) als Funktion der Annealtemperatur eingetragen. Je höher die Annealtemperatur desto höher sind Kapazität und Leckstrom.

Auch der Einfluss verschiedener Elektrodenmaterialien auf die Trapkonzentration, Elektronenaffinität und effektive Elektronenmasse, kann durch die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden (siehe Kapitel 5.1.1.5, 5.1.2.3 und 5.4) bestimmt werden. Dies ist die Grundvoraussetzung, um ein geeignetes Metall als Ersatz für das bisher in DRAM-Elektroden verwendete poly-Si zu finden.

Bei DRAM-Produkten darf auf der Kondensatorfläche von etwa 10m^2 höchstens ein elektrischer Durchbruch in 10 Jahren stattfinden. Neben einem geringen Leckstrom bei Betriebsspannung und vorgegebener Kapazität ist die Zuverlässigkeit das wichtigste Kriterium eines Isolators für DRAM-Anwendungen. Vor der Freigabe eines Produktes muss dies durch Qualifikationsuntersuchungen, in denen die gemessene Durchbruchzeit bei hohen Spannungen auf Betriebsspannung extrapoliert wird, bestätigt werden. Für eine korrekte Extrapolation benötigt man ein physikalisches Modell, welches das Durchbruchverhalten des Isolators beschreibt. Das in dieser Arbeit eingeführte mikroskopische Durchbruchmodell ist das erste seiner Art und könnte nach entsprechender Erweiterung (mit Weibull-Statistik) exakte Extrapolationen liefern. Dies müsste man anhand von Zuverlässigkeitsmessungen verifizieren.

Anhang

A1 Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Tabelle 10: Liste der verwendeten Symbole.

Symbol	Bedeutung
A, a	(Elektroden-) Flächen
A^*	Richardson-Konstante
A_{relax}	Relaxationsstromkonstante
a_0	Bohrradius
ALD	Atomic layer deposition
BLE	Bildladungseffekt
C	Kapazität oder
C	Konstante
C_{HF}	Hochfrequenzkapazität
CVD	chemical vapor deposition
c_s	Schallgeschwindigkeit
d	Schichtdicke
D	Transmissionskoeffizient
D_D	Transmissionskoeffizient für direktes Tunneln
d_F	Abstand des Farbzentrums von der emittierenden Elektrode
D_{FN}	Transmissionskoeffizient für Fowler-Nordheim Tunneln
d_i	Schichtdicke des Isolators i
$D_{i \rightarrow j}$	Transmissionskoeffizient für den Übergang von Trap i zu Trap j
D_{mzT}	Transmissionskoeffizient mit Zurücktunneln
D_{ozT}	Transmissionskoeffizient ohne Zurücktunneln
DRAM	dynamic random access memory
d_T	„Trapdicke“: Breite des Trappotentials im Grundzustand
DT	Direktes Tunneln
D_{tot}	Totaler Transmissionskoeffizient
e	Elementarladung
E	Energie
E_0	Grundzustandsenergie
E_B	Energie des Leitungsbandes
E_F	Fermienergie
$E_{F,1}$	Fermienergie der emittierenden Elektrode
$E_{F,2}$	Fermienergie der Akzeptor-Elektrode
$E/I/E$	Elektrode/Isolator/Elektrode
E_{iso}	Energie vom Leitungs- bzw. Valenzbandes des Isolators
E_{kin}	Kinetische Energie
EOT	equivalent oxide thickness
$E_S(Iso)$	Energie, die notwendig ist um einen Isolator zu schädigen
ESR	Serienwiderstand
E_x	Kinetische Ladungsträgerenergie parallel zur Tunnelrichtung

E_{\perp}	Kinetische Ladungsträgerenergie senkrecht zur Tunnelrichtung
f	Verteilungsfunktion
F	Elektrisches Feldstärke
F_i	Elektrisches Feldstärke im Isolator i
FNT	Fowler-Nordheim-Tunneln
F_{krit}	Kritische elektrische Feldstärke
$F(R)$	Kumulative Fehlerrate
h	Plancksches Wirkungsquantum
\hbar	Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum
i	Index
I	Elektrischer Strom
I_{PF}	Poole-Frenkel-Emissionsrate
I_{TAT}	Tunnelemissionsrate
J	Elektrische Stromdichte
J_{em}	Emissionsstromdichte
J_{inj}	Injektionsstromdichte
J_{mD}	Stromdichte durch Isolatoren mit Defekten
J_{MSTAT}	Stromdichte durch einen Isolator, in welchem die Traps gleichmäßig im Raum angeordnet sind
J_{MSTATr}	Stromdichte durch einen Isolator, in welchem die Traps statistisch im Raum angeordnet sind
J_{oD}	Stromdichte durch Isolatoren ohne Defekten
J_{PF}	Stromdichte durch Poole-Frenkel-Effekt
J_{relax}	Stromdichte aufgrund der dielektrische Relaxation
k	Boltzmann-Konstante
\ln	Natürlicher Logarithmus
\log	Dekadischer Logarithmus
m_0	Freie Elektronenmasse
m_{eff}	Effektive Elektronenmasse
m_{el}	Effektive Elektronenmasse in der Elektrode
$m_{iso,i}$	Effektive Elektronenmasse im Isolator i
MOS	metal oxide semiconductor
m_{ox}	Effektive Elektronenmasse im Oxid
m_{Si}	Effektive Elektronenmasse im Silizium
MSTAT	multistep trap-assisted-tunneling
N, n	Anzahl (an Traps, besetzten Zuständen...) oder
N	Supply Funktion
N_T	Trapkonzentration
p	Impuls
P	Wahrscheinlichkeit
PF	Poole-Frenkel
P_{PF}	Wahrscheinlichkeit der thermischen Emission aus einem PF-Trap
P_{TAT}	Tunnelwahrscheinlichkeit aus einem PF-Trap
Q	Ladung
Q_{inj}	Injizierte Ladung

A1 Symbol- und Abbildungsverzeichnis

R, r	Schichtdicken oder
R	Widerstand oder
R	Tunnelrate
t	Zeit
T	Temperatur
TAT	Trap-assisted-tunneling
t_{BD}	Zeit bis zum dielektrische Durchbruch nach Stress
TEM	transmission-electron-microscopy
V, v	Volumen oder
v	Geschwindigkeit
V	Spannung
V_{fb}	Flachband-Spannung
V_{Gate}	Gate-Spannung
V_{if}	Bildladungspotential
$V_{iso,i}$	Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators i pro Elementarladung
v_T	Elektronengeschwindigkeit im Trap (nicht Erwartungswert)
V_T	Trappotential
V_{tr}	Übergangsspannung (zwischen DT und FNT)
W	Austrittsarbeit
$w(n)$	Wahrscheinlichkeit - in einem Teilvolumen des Volumens mit N Traps - n Traps zu finden
WKB	Wentzel-Kramers-Brillouin
x	Richtung des elektrischen Feldes mit $x=0$ and der Grenzfläche von emittierender Elektrode und Isolator
XPS	X-ray photoemission spectroscopy
x_T	Abstand des Traps von emittierender Elektrode
y	Richtung senkrecht zur Richtung des elektrischen Feldes oder
y	Abstand des zur emittierenden Elektrode am nächsten liegende Trap
z	Richtung senkrecht zur Richtung des elektrischen Feldes
Z	Zustandsdichte
α	Proportionalitätskonstante
β	Proportionalitätskonstante
χ	Elektronenaffinität
δE_{CB}	Energiedifferenz der Leitungs- bzw. Valenzbandkanten
ΔE	Energiedifferenz
$\Delta\phi$	Barrierendifferenz
$\Delta\varphi$	Potentialbarrierenerniedrigung
ΔV	Spannungsdifferenz bzw. -impuls
ϵ, ϵ_r	Statische Dielektrizitätskonstante
ϵ_0	Permittivität in Vakuum
ϵ_d	Dynamische Dielektrizitätskonstante
ϕ_B	Potentialbarriere
ϕ_i	Potentialbarriere, welche ein emittierter Ladungsträger bezüglich eines Isolators i hat

ϕ_T	Grundzustandsenergie eines Traps relativ zur Leitungs- bzw. Valenzbandkante
ν	Frequenz
$\bar{\nu}$	Wellenzahl
ν_{PF}	„Escape“-Frequenz für thermische Emission aus einem Trap
ν_{TAT}	„Escape“-Frequenz für Tunneln aus einem Trap
ρ	Dichte
σ_0	Einfangquerschnitt des einfach angeregten, nicht besetzten Zustandes eines F^+ -Zentrums
σ_1	Einfangquerschnitt des einfach angeregten, einfach besetzten Zustandes eines F^+ -Zentrums
σ_T	Einfangquerschnitt eines Traps
τ	Lebensdauer
τ_i	Zeitkonstante des Relaxationsgliedes i
τ_{HF}	Hochfrequenzzeitkonstante
$\psi_{n,l,m}$	Wellenfunktion (des Wasserstoffatoms) mit den Quantenzahlen n,l,m

A2 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Schematische Darstellung des Schaltbildes einer DRAM-Speicherzelle	1
Abbildung 2-1: Schematische Darstellung einer Elektrode/Isolator/Elektrode (E/I/E) - Struktur bei $T=0K$. Die Ladungsträger mit Energien im roten Bereich sind die leckstromrelevanten Ladungsträger. Nur diese können aus der emittierenden Elektrode 1 elastisch tunneln. Die Elektronen mit Energien im blauen Bereich finden in der Akzeptor-Elektrode 2 keinen freien Zustand, da die Zustände bis zum Fermilevel besetzt sind.....	4
Abbildung 2-2: Banddiagramm einer E/I/E-Struktur mit zwei verschiedenen Isolatoren und Metallelektroden bei angelegter Flachbandspannung (Erläuterung des Bildladungseffektes siehe Text).....	7
Abbildung 2-3: Schematische Darstellung von DT und FNT. Bei DT tunneln die Ladungsträger durch einen Potentialwall der Dicke d und bei FNT durch einen Potentialwall der Dicke ϕ_B/F	10
Abbildung 2-4: Das Banddiagramm einer E/I/E-Struktur zur Bestimmung der Schottky-Emission. Die Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators (durchgehende Linie), welche sich aus der Addition des Bildladungspotentials (fein gestrichelte Linie) und des elektrostatischen Potentials (grob gestrichelte Linie) ergibt, hat bei x_{max} das Maximum $-e\Delta\phi$	15
Abbildung 2-5: Banddiagramm eines Isolators mit einem Trap am Ort x_T . Die schwarze Kurve ist die Energie der Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators ohne, und die rote Kurve mit Einfluß des Traps. Durch das Potential des Traps (hier Coulombpotential) wird die Potentialbarriere um $e\Delta\phi_T$ erniedrigt. Der Eigenzustand des Ladungsträgers im Trappotential hat eine um $e\phi_T$ (Traptiefe) kleinere Energie als die Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Isolators.	16
Abbildung 2-6: Banddiagramm eines Isolators (schwarze Linie) mit einem Trapband (schematisch, blaue Linie). Die mittlere Energie des Trapbandes liegt um $e\phi_T$ unterhalb dem Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators. Die Ladungsträger tunneln zunächst in das Trapband und dann in das Leitungs- bzw. Valenzband des Isolators oder der Akzeptor-Elektrode.	17
Abbildung 2-7: Schematische Darstellung der PF-Emission (blauer Pfeil) aus dem Grundzustand eines Coulombpotentials (blaue Linie).....	19
Abbildung 2-8: Banddiagramm eines Isolators mit einem Trap bei verschobenem Koordinatensystem zum Vergleich von PF-Emission und Tunneln.	21
Abbildung 2-9: Vergleich der Tunnelwahrscheinlichkeit (rot) (für verschiedene Dicken $d-x_T$) mit der Wahrscheinlichkeit der thermischen Emission (blau) (bei $T=300K$) eines Ladungsträgers aus einem Coulombpotential in einer bestimmten Traptiefe ϕ_T als Funktion des elektrischen Feldes. a) Hier befindet sich das Coulombpotential in Al_2O_3 , welches bei einer PF-Untersuchung die Parameter aus Tabelle 1 hat [6]. b) Hier befindet sich das Coulombpotential in Si_3N_4 , welches bei einer PF-Untersuchung die Parameter aus Tabelle 1 hat [9].	24
Abbildung 2-10: Das elektrische Feld F_{trans} , ab welchem der TAT-Strom dominiert als Funktion der Temperatur für das Si_3N_4 aus [9] und für das Al_2O_3 aus [6]. Für elektrische Felder $F < F_{trans}$ dominiert der PF-Strom.	25
Abbildung 2-11: Elektrisches Ersatzschaltbild eines Isolators, dessen Relaxation nach einer Spannungsänderung durch das Curie-von Schweidler-Gesetz beschrieben wird.....	26

- Abbildung 2-12: Banddiagramm einer E/I/E-Struktur ($V_{fb}=0V$) mit getrappten Elektronen am Ort x_T . Durch Ladungsträgerinjektion wird der Isolator am Ort x_T elektrisch mit Q_{inj} aufgeladen, wodurch sich das elektrostatische Potential verändert. Für $x < x_T$ wird das elektrische Feld erniedrigt, während es für $x > x_T$ erhöht wird. Die Anzahl der Ladungsträger pro Einheitsfläche als Funktion des Ortes sind schematisch dargestellt (rot)..... 27
- Abbildung 2-13: Schematische Darstellung der Zeitabhängigkeit der Gesamtstromdichte bei verschiedenen Spannungen mit Berücksichtigung von Trapping-Effekten. Nach einer spannungsabhängigen anfänglichen Zeitkonstanten $\tau_i = \tau(V_i)$ fließt ein zeitabhängiger Injektionsstrom. Nach einer Zeit $\tau_{GGi} = \tau_{GG}(V_i)$ gilt $J_{inj} = J_{em}$ und der Gesamtstrom wird zeitunabhängig. 29
- Abbildung 2-14: Die maximale Messzeit als Funktion der Stromdichte. Die maximale Messzeit ist durch die Bedingung $\Delta F \leq 0.1 MV/cm$ begrenzt. Die Rechnung wurde für eine Probe mit $\epsilon_r = 10$ und der Annahme, dass alle Ladungsträger getrappt werden, durchgeführt. 30
- Abbildung 3-1: E/I/E-Struktur zur Darstellung des kleinen Volumens $v = ad$ (schwarze Fläche). 34
- Abbildung 3-2: In a) sind die Übergänge eines Ladungsträgers zwischen drei, in einem gleichschenkligen Dreieck angeordneten Traps, dargestellt. Ausgangspunkt ist das untere Trap, von welchem es zwei mögliche Wege in das rechte Trap gibt. Der direkte Weg ohne Zurücktunnel (blau) hat den Transmissionskoeffizienten D_{ozT} , während der indirekte Weg mit Zurücktunnel (rot) durch den Transmissionskoeffizienten $D_{mzT}^{-1} = D_{mzT,1}^{-1} + D_{mzT,2}^{-1}$ charakterisiert ist. Der Abstand der Traps ist durch die Trapkonzentration $N_T^{-1/3}$ gegeben. In b) ist das Verhältnis D_{mzT}/D_{ozT} als Funktion des elektrischen Feldes (x -Richtung) für verschiedene Trapkonzentrationen dargestellt. Je größer die elektrische Feldstärke und je kleiner die Trapkonzentration ist, desto kleiner ist D_{mzT}/D_{ozT} und somit der Beitrag zum Gesamtstrom der durch Tunnelübergänge entgegen dem elektrischen Feld zustande kommt. 36
- Abbildung 3-3: Anzahl der möglichen „Tunnelwege“ (nop) mit (blau) und (ohne) der Möglichkeit des Ladungsträgers entgegen dem elektrischen Feld zu tunneln als Funktion der Trapanzahl n 37
- Abbildung 3-4: E/I/E-Strukturen mit 3 Traps an den Orten (x_i, y_i, z_i) , $i=1, 2, 3$ im Isolator. In a) sind die einzelnen Transmissionskoeffizienten (rot: emittierende Elektrode \rightarrow Trap i , blau: Trap $i \rightarrow$ Trap j , grün: Trap $j \rightarrow$ Akzeptor-Elektrode) dargestellt. In b) sind alle möglichen „Tunnelwege“ des Ladungsträgers, wenn nur das „Tunneln“ in Richtung des elektrischen Feldes berücksichtigt wird, dargestellt. 38
- Abbildung 3-5: MSTAT-Stromdichte (Linien) und die Stromdichte via zufällig angeordneter Traps (MSTATr-Strom, Punkte) als Funktion der Trapkonzentration für verschiedene elektrische Felder ($2MV/cm < F < 10MV/cm$). Die Berechnungen wurden für eine Al/Al₂O₃/Al-Struktur mit $d(Al_2O_3) = 5nm$, $\phi_B = 2.4V$, $m_{eff} = 0.28m_0$ und $\epsilon_d = 1.8$ durchgeführt. Die gestrichelte schwarze Linie gibt die Stromdichte an, wenn nur 2-Step-Prozesse betrachtet werden. Der dadurch verursachte Fehler liefert in diesem Beispiel bei $N_T = 10^{22} cm^{-3}$ eine Stromdichte, die um einen Faktor 10^6 kleiner ist als die MSTAT-Stromdichte. 40
- Abbildung 4-1: Vereinfachtes elektrisches Schaltbild des Messaufbaus, welcher über einen PC angesteuert wird. 43
- Abbildung 5-1: Zählerintensität bei XPS-Messungen als Funktion der Bindungsenergien. Die Eindringtiefe von XPS-Messungen beträgt einige nm, so

dass ein Wegsputtern der Oberfläche und insitu XPS-Messungen ein Tiefenprofil der untersuchten Probe liefert. Mit einer Sputterrate von ca. $4 \cdot 10^{-11}$ m/min wurde bis ca. 5.4nm (max. Sputterzeit 130min) weggesputtert. Die Peaks Si 2p und Si 2s, welche zu SiO_x gehören, werden mit steigender Sputterzeit größer, während die Peaks Al 2p und Al 2s (aufgrund von Al_2O_3) mit steigender Sputterzeit abnehmen. Dies beweist die Existenz des $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_x$ -Schichtstapels in den Proben.....45

Abbildung 5-2: TEM-Aufnahme der Probe 2 zur Dickenbestimmung der Al_2O_3 - und SiO_2 -Schicht.46

Abbildung 5-3: TEM-Aufnahme von Probe 2 mit dunklem Kontrast, welcher ein Kristallit darstellt.46

Abbildung 5-4: Experiment (Punkt-Linie), MSTAT (Linie, berechnet) und Tunneln ohne Traps (Striche, berechnet) bezüglich der $J(V)$ -Daten (über 12 Größenordnungen) der CVD- Al_2O_3 Proben 1 (grün), 2 (rot) und 3 (blau). Der berechnete Tunnelstrom ohne Traps dominiert gegenüber dem MSTAT-Strom genau ab der Gate-Spannung, bei welcher der elektrische Durchbruch stattfindet.48

Abbildung 5-5: Berechnetes Banddiagramm von Probe 2 bei angelegter Flachbandspannung. Die Traps sind hier für eine bestimmte Position des ersten Traps y blau dargestellt, wobei die Transmissionskoeffizienten den Weg der Elektronen beschreiben. Der Bildladungseffekt an der Akzeptor-Elektrode ist hier vernachlässigt.49

Abbildung 5-6: Arrhenius-Plot der experimentellen Daten von $T=42\text{K}$ bis $T=420\text{K}$ des MSTAT-Modells (mit Parametern aus Tabelle 5) und des PF-Modells von Probe 2. Zur Berechnung des PF-Stromes wurde Gleichung [2-39] mit $C_I=10^{-6}\text{AV}^{-1}\text{cm}^{-1}$, $\phi_T=1.2\text{V}$ und $\epsilon_d=1.8$ verwendet.50

Abbildung 5-7: Arrhenius-Plot der Messdaten von Probe 2 für einen kleineren Temperaturbereich (Ausschnitt von Abbildung 5-6) zur Demonstration der Nichtlinearität.51

Abbildung 5-8: Schematische Darstellung der Elektronenleitung mit Al-Elektrode und der Löcherleitung mit Au- und Pt-Elektrode bei Metall/CVD- $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_x/\text{p-Si}$ -Strukturen.52

Abbildung 5-9: Die Stromdichten der Probe 2 mit Al-, Au- und Pt-Elektrode als Funktion der angelegten Spannung abzüglich der jeweiligen Flachbandspannung.52

Abbildung 5-10: Durchbruchzeiten einer typischen CVD- Al_2O_3 Probe als Funktion von $\ln(-\ln(1-F))-\ln(A)$ für Messungen an zwei verschiedenen Elektrodenflächen.54

Abbildung 5-11: Weilbull-Plot einer typischen CVD- Al_2O_3 Probe mit einer Fläche von $3.1 \cdot 10^{-4}\text{cm}^2$ bei einer angelegten Spannungen von -5.5V, -5.4V und -5.2V bei Raumtemperatur. Eine Weilbull-Steigung von $\beta=1.3$ wurde ermittelt, wobei die Fits als Linien dargestellt sind.....55

Abbildung 5-12: Extrapolierte Daten aus Abbildung 5-11 für einen 1 Gb DRAM mit der Bedingung, dass einer von 1000 DRAM's ausfallen darf.....55

Abbildung 5-13: Weilbull-Plot der typischen CVD- Al_2O_3 Probe bei Raumtemperatur und $T=80^\circ\text{C}$56

Abbildung 5-14: $C(V)$ -Charakteristik der ALD- Al_2O_3 Proben.58

Abbildung 5-15: Ladungsdichte pro ϵ_0 der ALD- Al_2O_3 Proben. Die Daten wurden durch Integration der $C(V)$ -Daten (Abbildung 5-14) nach Gleichung [5-7] ermittelt. Das elektrische Feld in Isolator i folgt durch Division der Daten mit ϵ_i58

Abbildung 5-16: Mit einem Device-Simulator ermittelte Bandverbiegung an der Oberfläche des Substrats ($V > V_{fb}$) und der Gate-Elektrode ($V < V_{fb}$).59

- Abbildung 5-17: Gemessene und berechnete $J(V)$ -Charakteristik der ALD- Al_2O_3 Proben. Die Messung deckt einen Bereich von 8 Größenordnungen im Leckstrom ab. Unterhalb von 10^{-10} A/cm^2 dominiert der Relaxationsstrom und oberhalb 0.01 A/cm^2 ist der Leckstrom durch einen Serienwiderstand begrenzt. 60
- Abbildung 5-18: Das Verhältnis von der Stromdichte bei $T=400\text{K}$ und der Stromdichte bei $T=300\text{K}$ als Funktion der Gatespannung für die ALD- Al_2O_3 Proben 1 und 2. 61
- Abbildung 5-19: Berechnetes Banddiagramm der 3nm Al_2O_3 -Probe bei einer Gatespannung von a) -3.0V und von b) $+2.4\text{V}$. Diese Spannungen entsprechen genau den Spannungen bei denen das Verhältnis $J(400\text{K})/J(300\text{K})$ maximal ist. Genau bei diesen Spannungen findet der Übergang zwischen DT und FNT statt. Die rote Linie zeigt die Fermifunktion schematisch. 62
- Abbildung 5-20: PF-Plot der berechneten Tunnelströme der 3nm und 4nm Proben aus Kapitel 5.1.2.1. Sowohl für beide Proben als auch für beide Polaritäten (a: $V < 0$, b: $V > 0$) erhält man durch einen PF-Fit dieselbe dynamische Dielektrizitätskonstante von $\epsilon_d=1.0$ 63
- Abbildung 5-21: Arrhenius-Plots ($J \cdot T^{-1}$ Charakteristik) von den berechneten Tunneldaten für die 3nm a), b) und 4nm c), d) ALD- Al_2O_3 Proben. Die berechneten Tunneldaten sind durch verbundenen Punkte und der jeweilige PF-Fit durch Linien dargestellt. Für beide Proben und beide Polaritäten erhält man mit $\phi_T=1.45\text{V}$ und $\epsilon_d=1.0$ (hier kein Fitparameter, da durch PF-Plot festgelegt) eine zufrieden stellende Übereinstimmung von Tunnel- und PF-Strom. Die Konstante C (siehe Gleichung [2-39]) variiert mit der Polarität (Struktur nicht symmetrisch). 64
- Abbildung 5-22: Experimentelle und berechnete (Tunneln) $J(V)$ -Charakteristik der 3nm und 4nm Proben mit TiN-Elektrode. Hier wurde als Elektronenaffinität für Al_2O_3 und Si_3N_4 $\chi_{el}=2-65\text{eV}$ und als effektive Elektronenmasse im Al_2O_3 $m_{eff}=0.23m_0$ verwendet. Die restlichen Parameter sind identisch mit den Parametern, die für die Leckstromsimulation der poly-Si/ SiO_x /ALD- Al_2O_3 / Si_3N_4 /n-Si-Strukturen (Kapitel 5.1.2.1) verwendet wurden. 66
- Abbildung 5-23: Das Verhältnis der Leckströme bei $T=300\text{K}$ und $T=400\text{K}$ als Funktion der Gatespannung für die TiN/ Al_2O_3 / Si_3N_4 /N-Si-Strukturen. 66
- Abbildung 5-24: Strom durch 29000 „Deep Trenches“ als Funktion der angelegten Gatespannung (schwarze Punkte). Die Tangente zu diesem Strom bei $V_{Gate}=-3.2\text{V}$ ist als blaue Linie dargestellt. Die Durchbruchzeiten bei Spannungen um $V_{Gate}=-3.2\text{V}$ sind durch eine rote Linie dargestellt. 68
- Abbildung 5-25: Schematische Darstellung des Schädigungsprinzips in SiO_2 und Al_2O_3 . Die roten Pfeile beschreiben Elektronenübergänge und die kleinen, schwarzen Pfeile beschreiben den Spin des Elektrons. 69
- Abbildung 5-26: In a): Banddiagramm von Al_2O_3 bei angelegtem elektrischen Feld F mit dem Grundzustand und erstem abgeregten Zustand eines F^{2+} -Zentrum in der Bandlücke. Links davon ist die Fermienergie der emittierenden Elektrode eingezeichnet. Die Elektronen aus der emittierenden Elektrode können den angeregten Zustand nur bevölkern, wenn die Bedingung $F \geq e(\phi_B - \phi_F)/d_F$ erfüllt ist. In b): Für den 2-Elektronen-Schadensprozess relevanter Elektronenübergang. 70
- Abbildung 5-27: Gemessene und berechnete $J(V)$ -Daten von drei Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Strukturen mit unterschiedlichen Ta_2O_5 -Schichtdicken. Die Berechnung wurde mit Hilfe des MSTAT-Modells durchgeführt. Bei allen drei Proben erhält man eine nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment über 10 Größenordnungen im Leckstrom. 73
- Abbildung 5-28: Banddiagramm einer Ru/ Ta_2O_5 /Ru-Struktur mit einer Ta_2O_5 -Schichtdicke von $d(\text{Ta}_2\text{O}_5)=15\text{nm}$ und einer Position des „ersten Traps“ bei

$y=2\text{nm}$. Die Werte für die Trapkonzentration, die Barriere und die dynamische Dielektrizitätskonstante wurden von Tabelle 7 übernommen. Die Leitungsbandkante von Ta_2O_5 wurde sowohl ohne Berücksichtigung der Traps und ohne Berücksichtigung des Bildladungseffektes (BLE) (blau) als auch ohne Berücksichtigung der Traps und mit Berücksichtigung des BLE (grün) und mit Berücksichtigung der Traps und mit Berücksichtigung des BLE (rot) berechnet. Durch Berücksichtigung der positiv geladenen Traps wird die Leitungsbandkante bzw. die Barriere deutlich reduziert. 74

Abbildung 5-29: $J(V)$ -Messungen an einer $\text{Al}/\text{Pr}_2\text{O}_3/\text{p-Si}$ -Struktur bei Raumtemperatur nach verschiedenen Annealtemperaturen und verschiedener Annealdauer (Anneal an Luft). Durch den Anneal für Temperaturen $T > 445\text{K}$ verändert sich die Probe irreversibel. Je höher die Annealtemperatur und je länger der Anneal (bei 495K) desto geringer die Stromdichte. 75

Abbildung 5-30: $C(V)$ - und $G(V)$ -Charakteristik einer $\text{Al}/\text{Pr}_2\text{O}_3/\text{p-Si}$ -Struktur vor (eingebettetes Diagramm) und nach einem Anneal an Luft bei $T=495\text{K}$ für 640 Minuten. Nach dem Anneal sinkt die Kapazität um einen Faktor 3 und zeigt im Gegensatz zu der Probe vor dem Anneal Hysterese. 76

Abbildung 5-31: Gemessene (Symbole) und berechnete (Linien) $J(V)$ -Charakteristik der Proben 5 bis 7. Die Berechnung basiert auf dem Tunneleffekt (ohne Traps) und wird wie in Kapitel 2.1.1.5 beschrieben berechnet. Bei der Berechnung wurden nur die Schichtdicke und die Barriere verändert. 77

Abbildung 5-32: Die gemessenen (Symbole) und berechneten (Linien und Striche) $J(V)$ -Daten der Proben 1 und 2 (links) und der Proben 3 und 4 (rechts). Nur bei Annahme von Traps (Linie) in der SiO_2 Bandlücke erhält man gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Ohne Traps (Striche) lässt sich der hohe Strom bei kleinen Spannungen nicht erklären. 78

Abbildung 6-1: Links ist die $J(V)$ -Charakteristik von einer 15nm dicken Ta_2O_5 -Schicht ($\text{Ru}/\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Ru}$ -Struktur) für verschiedene Annealtemperaturen (jeweils für 10 Minuten) dargestellt. Rechts sind die zugehörigen $EOTs$ (rot) und Stromdichten bei $V=1\text{V}$ (blau) als Funktion der Annealtemperatur eingetragen. Je höher die Annealtemperatur desto höher sind Kapazität und Leckstrom. 81

A3 Literaturverzeichnis

- [1] A. Gehring, Dissertation „Simulation of Tunneling in Semiconductor Devices“, TU Wien (2003)
- [2] R. H. Good und E. W. Müller, in *Handbuch der Physik*, editiert bei S. Flugge (Springer, Berlin, 1956), **21**, 176
- [3] A. S. Dawydow, *Quantenmechanik* (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1981)
- [4] Wie-Kai Shih, Everett X. Wang, Srinivas Jallepalli, Francisco Leon, Christine M. Maziar und Al F. Taschjr, *Solid State Electronics* **42**, No.6, 997-1006 (1998)
- [5] E. Suzuki, D. K. Schroder und Y. Hayashi, *J. Appl. Phys.* **60**, 3616 (1986)
- [6] M. Specht, M. Städele, S. Jakschik und U. Schröder, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3076 (2004)
- [7] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, “Electronic Properties of two-dimensional systems”, *Reviews of Modern Physics*, **54**, No. 2 (1982)
- [8] C. Kittel, ”Introduction to Solid State Physics” (Wiley, New York,1996)
- [9] S. M. Sze, *J. Appl. Phys.* **38**, No. 7, 2951 (1967)
- [10] E. Ritter von Schweidler, *Ann. Phys. Ausgabe 24*, 711 (1907)
- [11] A. K. Cheetham, P. Day, *Solid State Chemistry-techniques*, Clarendon Press, Oxford (1988)
- [12] H. Bachhofer, “Zeitaufgelöste Messungen der Tunnelströme an Feld-Effekt-Transistoren mit Dreifach-Dielektrikum“, Diplomarbeit, Regensburg (1998)
- [13] J. Robertson, M. J. Powell, *Appl. Phys. Lett.* **44**(4), 415 (1984)
- [14] R. Becker, “Theorie der Wärme” (Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1966)
- [15] O. Blank, H. Reisinger, R. Stengl, M. Gutsche, V. Capodieci, F. Wiest, J. Schulze und I. Eisele, *J. Appl. Phys.* **97**, No.4, p.44107-1-7 (2005)
- [16] R. Lackner, Diplomarbeit „Entwicklung eines hochsensiblen Elektrometers“, TU München (2004)
- [17] Y. Okomoto et al., *J. Catal.* **65**, 448 (1980)
- [18] G. E. Franklin et al., *Phys. Rev. B* **45**, 3426 (1992)
- [19] W. A. M. Aarnik et al., *Appl. Surf. Sci.* **45**, 37 (1990)
- [20] R. B. Shalvoy, B. H. Davis und P. J. Reucroft, *Surf. Interface Anal.* **2**, 12 (1980)
- [21] T. Bikkay, E. Sacher und A. Yelon, *Surf. Sci.* **217**, L377(1989)
- [22] Papparazzo E. et al., *Appl. Surf. Sci.* **25**, 1 (1986)
- [23] S. M Sze, *Physics of Semiconductor Devices* (Wiley, New York, 1981)
- [24] R. Ludeke, M. T. Cuberes und E. Cartier, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**, 2153 (2000)
- [25] V. V. Afanas’ev, M. Houssa, A. Stesmans, G. J. Adriaenssens und M. M. Heyns, *Microelectronic Engineering* **59**, 335 (2001)
- [26] S. R. Pollack and C. E. Morris, *Transaction of the Metallurgical Society of Aime* **233**, 497 (1965)
- [27] S. Meng, C. Basceri, B. W. Busch, G. Derderian und G. Sandhu, *Appl. Phys. Lett.* **83**, No. 21, 4429 (2003)
- [28] Y. Yourdshahyan, C. Ruberto, L. Bengtsson und B. I. Lundqvist, *Phys. Rew. B* **56**, 8553 (1997)

- [29] H. Reisinger und A. Spitzer, J. Appl. Phys. **79**, No.6, 3028 (1996)
- [30] Y. Shi, X. Wang und T. P. Ma, IEEE Trans. Electron Devices **46**, 362 (1999)
- [31] Y. C. Yeo, Q. Lu, C. Lee, T.-J. King, C. Hu, X. Wang, X. Guo und T. P. Ma, IEEE Electron Device Lett. **21**, No.11, 540 (2000)
- [32] H. Haken und H. C. Wolf, *Molekülphysik und Quantenchemie* (Springer, 1998)
- [33] A. Stashans, E. Kotomin und J.- L. Calais, Phys. Rev. B **49**, No.21, 14854 (1994)
- [34] V. V. Harutunyan, V. A. Gevorkyan und V. N. Makhov, Eur. Phys. J. B. **12**, 35-38 (1999)
- [35] J. Carrasco, J. R. B. Gomes und F. Illas, Phys. Rev. B **69**, 064116 (2004)
- [36] Y.-N. Xu, Z.-Q. Gu, X.-F. Zhong und W. Y. Ching, Phys. Rev. B **56**, No.12, 7277 (1997)

Danksagung

Zum Schluss möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

- Prof. Ignaz Eisele und der Universität der Bundeswehr München für die Überlassung des Themas, sein ständiges Interesse am Fortgang der Arbeit und die finanzielle Unterstützung.
- Dr. Hans Reisinger für die optimale fachliche Betreuung dieser Arbeit und die gute, freundschaftliche Zusammenarbeit. Er hatte immer zwei offene Ohren für meine Anliegen und Probleme. Durch seine wertvolle Kritik und seinen Sachverstand hat er entscheidend zu den wichtigsten Ergebnissen beigetragen.
- Dr. Reinhard Stengl für anregende Diskussionen bei theoretischen Fragestellungen, aus denen sich wesentliche Ideen ergaben.
- Dr. Jörn Lützen und Infineon Technologies für die finanzielle Unterstützung.
- Dr. Jörg Schulze für die Betreuung an der Universität der Bundeswehr München.
- Prof. Hermann Baumgärtner für fruchtbare Diskussionen.
- Dr. Martin Gutsche, Harald Seidl, Dr. Florian Wiest, Dr. Stefan Jakschik und Xavier Gay für die Bereitstellung verschiedener Proben, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden.
- Ulrich Brunner und der gesamten Abteilung RM DEV bei Infineon für eine angenehme und kollegiale Zusammenarbeit.

Mein herzlichster Dank gilt auch meiner Frau, ohne deren Unterstützung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre, und meinen Eltern, die mir das Studium ermöglichten.