



Estudo da Rugosidade Eletrônica em Capacitores MOS Nanometricos

Manoel Cesar Valente Lopes

Tese apresentada na Faculdade de Engenharia
Elétrica e de Computação da Universidade
Estadual de Campinas para a obtenção do
Título de Doutor em Engenharia Elétrica

Orientador: Prof. Dr. Vitor Baranauskas

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Ioshiaki Doi
Prof. Dr. Maurício Ribeiro Baldan
Prof. Dr. João Roberto Moro
Prof. Dr. Luiz Carlos Kretly
Prof. Dr. Vitor Baranauskas

Departamento de Semicondutores, Instrumentos e Fotônica
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação
Universidade Estadual de Campinas

2000

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

L881e Lopes, Manoel Cesar Valente
 Estudo da rugosidade eletrônica em capacitores MOS
nanometricos / Manoel Cesar Valente Lopes. --Campinas,
SP: [s.n.], 2000.

 Orientador: Vitor Baranauskas.
 Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de
Computação.

 1. Simulação (Computadores). 2. Silício –
Propriedades elétricas. 3. Filmes finos – Propriedades
elétricas. 4. Dielétricos. 5. Transistores. 6. Aspereza de
superfície. I. Baranauskas, Vitor. II. Universidade
Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Elétrica e
de Computação. III. Título.

Dedico este trabalho a
Ana Paula,
Guilhermina Valente e
Claus Martin Hasenack (in
memorian)

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Vitor Baranauskas pela orientação e apoio.

Ao Prof. Dr. Claus Martin Hasenack pela amizade e pelas valiosas discussões.

Aos colaboradores e amigos do LSI/PEE/EPUSP, Sebastião G. dos Santos Filho, José C. de Souza Filho, Jarbas Tavares, Ana Neilde e a todos aqueles que participaram de alguma maneira pela realização deste trabalho.

Aos colaboradores e amigos do DSIF/FEE/UNICAMP, Marcelo Fukui, Lee BinBin, Alfredo Peterlevitz, Helder, Cesar e Marcelo Tosin.

Ao Rui Tadaharu Hayashi e Young Man To pelo apoio.

A Iara e Caio pela amizade e pelo apoio prestado ao longo do trabalho.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

A todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

O avanço na minituarização dos circuitos integrados depende do entendimento dos processos eletrônicos que ocorrem nas escalas nanométricas nas vizinhanças da superfície dos filmes finos de SiO_2 , que são o principal material dielétrico da microeletrônica atual. Apesar da alta qualidade com que estes filmes são atualmente produzidos, a diminuição nas dimensões dos componentes tornam cada vez mais crítica a ação dos seus defeitos estruturais, químicos e morfológicos no campo elétrico e conseqüentemente, na densidade de injeção de elétrons. Nesta tese estudamos a simulação da distribuição espacial do campo elétrico local em função de diferentes defeitos estruturais e de material, tais como precipitados metálicos, cargas elétricas, em estruturas de capacitores MOS. As rugosidades estruturais de interfaces de Si- SiO_2 foram medidas experimentalmente por Microscopia de Força Atômica (AFM) e utilizadas nas simulações de tal forma a obter uma distribuição do campo elétrico local bem próximo da realidade. Os resultados da simulação são comparados com os valores de campo de ruptura obtidos experimentalmente em capacitores MOS.

Palavras-Chave: Si- SiO_2 , simulação computacional, MOS, filmes dielétricos.

Abstract

Progress in microelectronics requires a better understanding of electronic processes that occur on the nanoscale on the surface of films of SiO_2 , which is the most important dielectric material used in microelectronics technology. Despite the present high quality of such films, the continuous reduction in the dimensions of components implies that structural, chemical and morphological defects have important effects on the gradient of the electric field and therefore on the distribution of the electric currents. In this thesis we studied the simulation of the electrical field distribution in MOS capacitors as a function of the dielectric defects such as metallic precipitates, fixed charges, roughnesses, and so on. The structural roughnesses of the Si- SiO_2 interfaces were experimentally measured using Atomic Force Microscopy (AFM) and employed in the computer simulations of the MOS capacitors to obtain an accurate estimate of the distribution of the local electric field. The computer simulation results are compared with the experimentally determined values of the breakdown electric field in MOS capacitors.

Key-words: Si- SiO_2 , computer modeling, MOS, dielectric thin films.

Sumário

Dedicatória	iv
Agradecimentos	v
Resumo/Abstract	vi
Sumário	vii

Capítulo I: Influências das Imperfeições Estruturais, Químicas e Elétricas em Capacitores MOS

Nanométricos	1
1. Avanço da Microeletrônica para a Nanoeletrônica	1
2. Objetivos.....	4
3. Abordagem do problema	5
4. Organização da Tese	6
5. Bibliografia	7

Capítulo II: Mecanismos de condução em isolantes

1. Introdução.	8
2. Alguns conceitos importantes	9
2.1 Elétrons de condução.....	10
2.2 Homogeneidade do isolante.	10
2.3 Densidade de estados eletrônicos no isolante.	11
2.4 Diagrama de energia de uma estrutura não polarizada.	11
2.4.1 Preenchimento das bandas de energia.....	14
2.5 Interface metal-isolante.....	15
2.6 Efeito força imagem.	17
2.7 Efeito Schottky:	18
2.8 Campo elétrico médio e local.	20
3. Correntes limitadas pela injeção de elétrons pelos eletrodos	22
3.1 Expressão geral da corrente.	23
3.2 Corrente termoiônica (Schottky).	24

3.3 Corrente de tunelamento.....	27
3.4 Corrente de Fowler-Nordheim.	30
4. Correntes Limitadas pelo volume do Dielétrico.	34
4.1 Densidade de carga no isolante.....	37
4.1.1 Isolante espesso.....	39
4.1.2 Isolante fino.....	40
4.2 Expressão geral da corrente limitada pelo volume	40
4.3 Efeito Poole-Frenkel	43
4.3.1 Isolante espesso sem sítios de armadilhamento	43
4.3.2 Isolante espesso com sítios de armadilhamento	43
4.3.3 Isolante fino com e sem sítios de armadilhamentos	43
4.3.4 Como a densidade de corrente varia com o campo elétrico	44
4.4 Corrente de Hopping	44
4.5 Corrente limitada pelo espaço de carga	45
5. Como reconhecer experimentalmente o tipo de condução	49
6. Comentários finais	49
7. Bibliografia	50
Capítulo III: Possíveis Mecanismos de Ruptura de Dielétricos	53
1. Introdução	53
2. Caracterização empírica da ruptura	57
3. Modelos fundamentados no processo de avalanche	58
3.1 Modelo de Stratton	58
3.2 Modelo de DiStefano e Shatzkes	59
4. Modelos fundamentados em regiões fracas ("weak spots")	60
4.1 Modelo de Budenstein	61
4.2 Model de Harari	62
4.3 Modelo de carga de ruptura	62
5. Bibliografia	65

Capítulo IV: Modelamento de Rugosidades	67
1. Introdução	67
2. Modelos de quantificação da rugosidade	68
2.1 Valor médio	68
2.2 Desvio padrão	70
2.3 Valor de pico-a-pico	72
2.4 Síntese dos três parâmetros: $\bar{\gamma}$, σ_{γ} e γ_p	72
2.5 Rugosidade fractal	78
2.6 Razão das áreas	82
3. Conclusões	84
4. Bibliografia	85
 Capítulo V: Técnicas de Medição de Rugosidades	 87
1. Introdução	87
2. Perfilometria mecânica	87
3. Microscopia de tunelamento	88
4. Microscopia de força atômica	88
5. Elipsometria	89
6. Espalhamento de luz	89
7. Conclusões	90
8. Bibliografia	91
 Capítulo VI: A Rugosidade Eletrônica	 92
1. Introdução	92
2. Uma definição matemática.....	95
3. Ruptura intrínseca e a rugosidade eletrônica	97
4. Rugosidade eletrônica versus rugosidade topográfica	98
4.1 Estatística e distribuição de frequência do campo elétrico local	99
5. Possíveis efeitos elétricos resultantes de defeitos estruturais	100

5.1 Rugosidades topográficas	100
5.2 Falha de estequiometria e impurezas	100
6. Validade das equações de Maxwell na escala microscópica	101
7. Bibliografia	102
Capítulo VII: Procedimentos para a medida da rugosidade da superfície de Si/SiO ₂	104
1. Introdução	104
2. Método de análise	104
3. Oxidação das lâminas	106
4. Medidas de microscopia de força atômica	106
5. Análise matemática	107
5.1 Medida da rugosidade	110
5.2 Histograma de frequência	112
5.3 Seções transversais	114
6. Bibliografia	115
Capítulo VIII: Procedimentos para a simulação de capacitores MOS com defeitos idealizados	116
1. Introdução	116
2. Estrutura do capacitor ideal	116
3. Simulação de capacitores com rugosidades positiva e negativa	119
4. Efeito da curvatura de uma rugosidade topográfica na rugosidade eletrônica	121
5. Influência do potencial de porta na rugosidade eletrônica	122
6. Precipitados	123
7. Estrutura com precipitado real	127
8. Bibliografia	128
Capítulo IX: Procedimentos para a comparação de capacitores reais com capacitores virtuais	130
1. Introdução	130

2. Oxidação das duas lâminas	134
2.1 Processo de oxidação	134
2.2 Processo de resfriamento	135
3. Preparação dos dois conjuntos de capacitores	137
4. Caracterização elétrica dos capacitores MOS	138
4.1 Medidas de campos de ruptura	138
4.2 Determinação da barreira de potencial (ϕ_0)	140
4.3 Determinação da carga de ruptura	141
5. Medidas das topografias das interfaces Si/SiO ₂ por AFM	142
6. Capacitores virtuais	143
7. Bibliografia	145
Capítulo X: Resultados e discussões: rugosidades da interface Si/SiO ₂	141
1. Introdução	141
2. Resultados das oxidações	141
3. Medidas das rugosidades	142
4. Medida do desvio padrão em diferentes posições e tamanhos de áreas de análises	155
5. Resumo das medidas de rugosidades	165
6. Bibliografia	168
Capítulo XI: Simulação de Capacitores MOS com Diferentes Estruturas	169
1. Introdução	169
2. Capacitor MOS ideal	169
3. Rugosidade Geométrica	173
4. Campo elétrico dentro do silício	177
5. Efeito da curvatura de uma rugosidade topográfica na rugosidade eletrônica	179
6. Rugosidade eletrônica para diferentes potenciais de porta	190
7. Precipitados	195
8. Precipitado Metálico dentro do Si	203
9. Sumário das simulações das estruturas idealizadas	205

10. Bibliografia	205
Capítulo XII: Simulação de Capacitores com Interfaces Reais	208
1. Introdução	208
2. Medidas das rugosidades das interfaces Si/SiO ₂	208
2.1 Sumário das rugosidades	211
3. Campo elétrico local dos capacitores simulados	211
4. Medidas de campos de ruptura para as amostras RRL e PTP	214
4.1 Carga de ruptura	216
4.2 Barreira de potencial	218
4.3 Densidade de estados de interface	219
4.4 Medida das contaminações	219
4.5 Sumário das medidas elétricas	221
5. Resumo da comparação entre o capacitor real e o simulado	222
6. Alguns comentários sobre o modelo de ruptura	223
7. Bibliografia	227
Capítulo XIII: Conclusões	229
1. Medida da rugosidade da interface Si/SiO ₂	229
2. Simulações de capacitores MOS com um defeito estrutural	229
3. Dois tipos de amostras: "rugosa" e "suave"	231
Apêndice A: Usando a função seno para interpretar os gráficos de Yoshinobu	232
Apêndice B: Exemplo de um arquivo de entrada do programa simulador MEDICI	236

Capítulo I

Influências das Imperfeições Estruturais, Químicas e Elétricas em Capacitores MOS Nanométricos

1. Avanço da Microeletrônica para a Nanoeletrônica

O progresso da microeletrônica vem sendo conquistado através de aprimoramentos de projetos, assim como dos materiais que constituem os dispositivos eletrônicos. Atualmente o "estado da arte" industrial da microeletrônica está no nível de compactação de $1,8 \times 10^6$ dispositivos por cm^2 , denominada geração VLSI [1] com transistores de dimensões típicas de $0,5 \mu\text{m}$ ou menores.

Neste contexto, o estudo refinado da ruptura do dielétrico SiO_2 é da maior relevância pois os dielétricos são fundamentais na construção dos dispositivos microeletrônicos. Com a redução das dimensões, realizadas com determinadas regras de escalonamento [2] tanto no plano da superfície da lâmina quanto nas dimensões verticais, é necessário garantir que os componentes elementares destes circuitos, tais como capacitores, diodos e transistores operem em regime de campos elétricos elevados. Nestas condições, os quatro itens relevantes na fabricação de um dispositivo microeletrônico de alta qualidade, são: baixa injeção de corrente, baixo ruído, elevada estabilidade térmica e alta rigidez dielétrica. Muitos dos progressos alcançados estão relacionados com o sucesso na obtenção de óxidos de silício (SiO_2) ultra-puros, com baixíssimas concentrações de contaminantes e sem defeitos estruturais.

Nos dispositivos microeletrônicos atuais os defeitos estruturais com dimensões de micra, como as falhas de empilhamento, são eficientemente eliminados com o melhoramento dos processos de fabricação. As impurezas em salas limpas, tais como particulados e os íons móveis K^+ e Na^+ , são reduzidas à concentrações de traço (isto é, à quantidades mínimas, quase que imensuráveis) e neutralizadas através de pós-tratamentos, ou se possível completamente eliminadas através de procedimentos preventivos.

Os micro-defeitos tais como as rugosidades nas interfaces do dielétrico, micro-precipitados e cargas fixas localizadas, sempre estiveram presentes nos dispositivos microeletrônicos, mas como seus efeitos elétricos são localizados ou de curto alcance, permaneciam relativamente mascarados pelos outros defeitos maiores e mais detrimenais, existentes nos dispositivos da era pré-VLSI. Com a eliminação destes defeitos maiores e mais detrimenais houve a possibilidade de fabricação de dispositivos menores, mas em contrapartida mostrou também a emergência de uma nova categoria de defeitos, que se caracterizam pelo tamanho "nanoscópico" (1 nanômetro = 10^{-9} m).

O interesse pela distribuição espacial do campo elétrico vetorial numa estrutura MOS é devido a influência deste parâmetro no mecanismo de ruptura do dielétrico. O campo elétrico médio de ruptura \mathcal{E}_R era satisfatório na caracterização do dielétrico. Por exemplo, um filme de óxido crescido por oxidação térmica seca, à temperatura de 1200 °C, com espessura de 50 nm, sobre um substrato de silício tipo-p, tem o campo de ruptura de aproximadamente 8 MV/cm. No entanto, a evolução tecnológica vem produzindo óxidos cada vez melhores e fez com que os campos de rupturas passassem a ter valores de 12 a 13 MV/cm! Uma consequência deste avanço é que o campo elétrico de ruptura (apesar de ainda hoje ser tecnologicamente utilizado) deixou de ser característico pois, amostras nominalmente idênticas porém com "históricos" ligeiramente diferentes, poderiam produzir campos de ruptura bastante diferentes. Isto mostrou que a informação dada pelo campo elétrico médio, a respeito das características de ruptura dos dispositivos, não era mais suficiente para esta nova categoria de filmes de dielétricos. Obter uma explicação para este

fenômeno foi a força impulsora da presente tese.

O tamanho típico destes defeitos é uma fração das espessuras dos filmes de dielétricos comumente utilizados nos dispositivos microeletrônicos [Figura I.1]. O tamanho destes defeitos é portanto, inferior à espessura do óxido, mas o alcance do efeito elétrico destes defeitos, é comparável às dimensões da espessura do dielétrico, como será mostrado nesta tese.

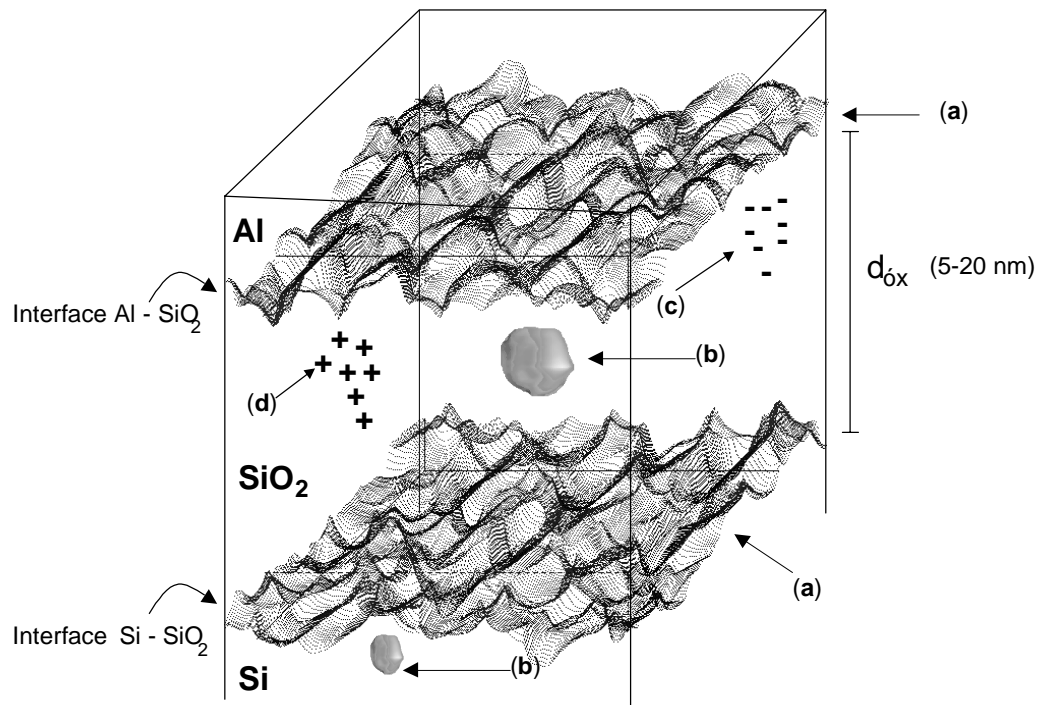


Figura I.1 - Defeitos nanoscópicos: (a) rugosidades, (b) precipitados, (c) cargas fixas e (d) cargas móveis.

Com a diminuição das dimensões dos dispositivos microeletrônicos os filmes de dielétricos passaram a ter espessuras cada vez menores. Os efeitos de superfície, presentes nas duas interfaces do filme, passaram a ter um efeito dominante, sendo que em alguns casos existe até uma interação entre as duas interfaces. Uma fonte de efeitos de superfície é a rugosidade das interfaces do SiO₂.

O significado de rugosidade, assim como os parâmetros utilizados para

quantificá-la é também um dos objetos de estudo desta tese.

2. Objetivos

O objetivo deste trabalho é contribuir para o esclarecimento do mecanismo que rege o processo de ruptura intrínseca de dielétrico. A ruptura extrínseca do dielétrico foi tomada como ponto de partida para este estudo, através da determinação das influências de rugosidades estruturais, impurezas e precipitados, cargas presentes no volume ("bulk") do dielétrico e níveis energéticos presentes dentro da banda proibida do dielétrico, na ruptura deste. A síntese dos efeitos elétricos de todos os defeitos supracitados é resumida em um único parâmetro: *rugosidade eletrônica*, que é definida como a perturbação do campo elétrico local, quando comparado com a distribuição dos campos elétricos do capacitor ideal.

Von Hippel [3] e Frölich [4] foram os primeiros a tentar resolver o problema do mecanismo de ruptura em dielétricos utilizando a idéia de ruptura por avalanche e até hoje variantes deste mecanismo são propostos por alguns autores, tais como Klein [5] e DiStefano [6,7]. Budenstein [8] abordou o problema da ruptura de dielétricos como sendo um fenômeno de erosão. Harari [9,10] e Wolters [11] estabeleceram a necessidade de uma quantidade limite (crítica) de carga a ser injetada no dielétrico para que haja a ruptura, conhecida como carga de ruptura Q_R .

Outro objetivo desta tese é fazer um estudo da quantificação da rugosidade de interfaces de Si/SiO₂. Este estudo procurou abordar dois aspectos da medida da rugosidade:

- i) Como a medida da rugosidade depende do tamanho da área de análise.
- ii) Como a medida da rugosidade depende da posição em que são obtidos os dados na amostra.

3. Abordagem do problema

Este estudo consiste de três partes:

- i) Quantificação de rugosidades em interfaces Si-SiO₂.
- ii) Simulação de capacitores MOS com defeitos "idealizados".
- iii) Simulação de capacitores com defeitos "reais" e posterior comparação com as características elétricas de capacitores reais com características semelhantes.

A primeira parte consistiu num estudo de quantificação da rugosidade topográfica das interfaces SiO₂, utilizando a microscopia de força atômica como técnica para obtenção da topografia das interfaces. A parte de simulação de defeitos "idealizados" consiste no modelamento dos defeitos e na simulação de um capacitor com estes defeitos modelados, através do programa simulador de dispositivos MEDICI, para determinação dos seus efeitos elétricos. A terceira parte consiste de medidas da topografia das interfaces do SiO₂ com o substrato de silício. A partir das topografias medidas das interfaces foram construídos capacitores virtuais com interfaces iguais, e simulados para que fosse determinado a distribuição dos campos elétricos locais. Foram feitos também testes de ruptura ("breakdown") nos capacitores construídos a partir das amostras reais. A partir dos resultados destas três etapas foram feitas correlações entre as rugosidades das interfaces do SiO₂ e os defeitos estruturais com a rigidez dielétrica do SiO₂.

Para atingir este objetivo foi feito inicialmente um levantamento dos defeitos estruturais, químicos e elétricos que poderiam influenciar o fenômeno da ruptura dos filmes de dielétricos ultra finos, de espessuras entre 5 a 20 nm. Para estas escalas, rugosidades, falhas de estequiometrias, cargas fixas, densidades de estados de interface e precipitados podem influenciar o evento da ruptura do dielétrico. A maneira como estes defeitos podem influenciar a ruptura do dielétrico foi estudada com auxílio de simulações de capacitores MOS virtuais, construídos a partir de características e defeitos citados na literatura. Foi

utilizado um capacitor-matriz MOS idealizado, que denominamos Capacitor Ideal, onde foi inserido um único defeito por vez, e determinada a distribuição dos campos elétricos locais, que é um parâmetro fundamental para a determinação da rugosidade eletrônica e para o mecanismo de ruptura.

4. Organização da Tese

Esta dissertação está organizada em treze capítulos, sendo este (Capítulo I) o de introdução.

O enfoque teórico é apresentado nos Capítulos II, III, IV, V e VI. Os procedimentos experimentais, incluindo as simulações, são apresentados nos Capítulos VII, VIII e IX. Os resultados e as discussões são apresentados nos Capítulos X, XI e XII. As conclusões foram apresentadas no Capítulo XIII.

O Capítulo II inicia a parte teórica abordando os diferentes mecanismos de condução em isolantes. O Capítulo III é dedicado à apresentação de um resumo dos possíveis mecanismos de ruptura em dielétricos.

O Capítulo IV trata da apresentação dos diferentes modelamentos de rugosidades. No Capítulo V são apresentadas as técnicas de medição de rugosidades em interface Si/SiO₂.

O Capítulo VI completa a parte teórica discutindo o conceito de rugosidade eletrônica.

O Capítulo VII inicia a apresentação dos procedimentos experimentais com a introdução à quantificação de rugosidades da interface Si-SiO₂.

O Capítulo VIII define os procedimentos das simulações de capacitores MOS com defeitos idealizados. O Capítulo IX descreve o procedimento utilizado na comparação de capacitores reais com capacitores virtuais.

O Capítulo X apresenta os resultados e as discussões sobre medidas rugosidades em

interface Si/SiO₂.

O Capítulo XI apresenta e discute os resultados das simulações de capacitores MOS com estruturas idealizadas.

O Capítulo XII focaliza e discute os resultados obtidos com a simulação de capacitores com interfaces reais e compara com os desempenhos conseguidos pelos capacitores reais.

O Capítulo XIII apresenta as conclusões, perspectivas e propostas para futuros trabalhos.

5. Bibliografia

- 1 FERRY, D.K.; GRONDIN, R.O; POROD, W. VLSI Electronics: Microstructure Science, Vol.15, Academic Press, New York (1987).
- 2 SZE, S.M. Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, New York (1981).
- 3 VON HIPPEL, A. J. Appl. Phys., vol.8, p.815 (1937).
- 4 FRÖLICH, H. Proc. Roy. Soc., vol. A160, p.230 (1937).
- 5 KLEIN, N. J. Electrochem. Soc., vol.116, p.963 (1969).
- 6 DiSTEFANO, T.H; SHATZKES, M. Appl. Phys. Lett., vol. 25, p.685 (1974).
- 7 DiSTEFANO, T.H; SHATZKES, M. J. Vac. Sci. Technol., vol. 13, p.50 (1976).
- 8 BUDENSTEIN, P. Proc. IEEE, vol.15, p.225 (1980).
- 9 HARARI, E Appl. Phys. Lett., vol.30, p.601 (1977).
- 10 HARARI, E. J. Appl. Phys., vol.49, p.2478 (1978).
- 11 WOLTERS, D.R. Growth, conduction, trapping and breakdown of SiO₂ layers on silicon, Tese de Doutorado- IMEEC -Eindhoven, Netherlands, (1988).

Capítulo II

Mecanismos de condução em isolantes

1. Introdução.

Em tecnologias de circuitos integrados, são amplamente utilizados filmes ou camadas de isolantes elétricos. Eles podem ser utilizados para passivar superfícies [1] ou para construção de dispositivos MOS que funcionam a partir do princípio de efeito-de-campo, como o FED (field-effect diode) e JFET (junction field-effect transistor) [2]. Se esses isolantes forem perfeitos, eles irão impedir o fluxo de qualquer corrente ao serem submetidos a uma diferença de potencial. Na verdade, vários processos físicos permitem que cargas elétricas (elétrons, lacunas e íons) se movam em um isolante, resultando em uma densidade de corrente que pode até ser considerável, especialmente quando a espessura do filme for pequena.

Neste estudo a discussão limitar-se-á a condução eletrônica. Os elétrons que fluem através do isolante podem ser *intrínsecos* (pertencentes ao isolante) ou *extrínsecos* (serem injetados por um eletrodo vizinho). No primeiro caso a condução depende das propriedades do isolante, no segundo depende da natureza da interface isolante-eletrodo.

Será utilizada uma estrutura Metal-Óxido-Semicondutor (MOS) para analisar as condições de injeção, que resumir-se-á a dois casos:

- a) condução limitada pela injeção dos eletrodos (efeito Túnel [3,4], efeito Schottky [5]).

- b) condução limitada pelo volume ("bulk") do isolante (efeito Poole-Frenkel [6,7], corrente limitada pelo efeito de carga espacial [8,9], condução "Hopping" - por salto [10]).

Foi estudado como a corrente eletrônica varia com os parâmetros do isolante (natureza, espessura), as condições de injeção (natureza do eletrodos) e com as condições externas (potencial aplicado, temperatura).

O mecanismo de condução em dielétricos é analisado neste trabalho devido a sua importância no mecanismo de ruptura de dielétricos, assim como, de maneira mais geral, no funcionamento dos dispositivos MOS. A corrente tem sido considerada como um dos parâmetros importantes na caracterização da ruptura do dielétrico [11,12], através da determinação da carga de ruptura Q_R . O estudo dos mecanismos de condução visa esclarecer a maneira como a carga é injetada no dielétrico e como estas cargas podem produzir defeitos ao interagir com o dielétrico, pois é amplamente aceito que a ruptura do dielétrico ocorre, em última instância, devido aos defeitos. No dielétrico SiO_2 convencionalmente é assumido que existem apenas os mecanismos de condução limitados pelo eletrodo que são o efeito Termo-iônico e o efeito Túnel, incluindo neste último o mecanismo de Fowler-Nordheim. Entretanto, a ação concomitante da corrente e da criação de defeitos no dielétrico, durante o funcionamento do dispositivo sugere uma condução paralela através dos defeitos, que vai aumentando gradualmente, até que, momentos antes do evento da ruptura do dielétrico, esta se torna dominante devido à elevada densidade de defeitos.

2. Alguns conceitos importantes

Nesta seção serão descritos conceitos comumente utilizados na descrição dos dispositivos MOS, mais especificamente dos capacitores MOS. Na descrição destes conceitos, sempre que possível, será analisado o caráter macroscópico assim como o caráter

microscópico do parâmetro envolvido.

2.1 Elétrons de condução.

A corrente elétrica, em um isolante, pode resultar de um fluxo de elétrons ou íons. Nesta análise iremos apenas abordar a corrente eletrônica (devida aos elétrons). A Tabela II-2 mostra os possíveis modos de condução. Os elétrons poderão ser intrínsecos ou extrínsecos.

Elétrons intrínsecos: Neste caso, a densidade de portadores é pequena (existem poucos elétrons de condução naturalmente disponíveis em um isolante) e a condução é do tipo ôhmico com uma elevada resistividade, veja Tabela II-2.

Elétrons extrínsecos: Dois casos são possíveis:

1. O eletrodo se comporta como uma fonte ilimitada de elétrons. A corrente é limitada apenas pelo "bulk" do isolante (efeito Poole-Frenkel, corrente limitada por cargas espaciais, condução por salto -"hopping").
2. O eletrodo limita a injeção de carga. O elétron introduzido viaja livremente dentro do isolante (efeito Schottky se a energia do elétron for suficiente para passar para a banda de condução do isolante, de outro modo, o efeito túnel).

2.2 Homogeneidade do isolante.

Para os diferentes modelos de mecanismos de condução, a serem descritos a seguir, será assumido que a camada do isolante é totalmente homogênea. Esta condição é satisfeita para filmes mais espessos que 50 nm mas, raramente, é satisfeita para filmes mais finos que 10 nm [13,14]. Quando o isolante não é homogêneo, é difícil de introduzir, no modelo matemático, parâmetros definidos por considerações geométricas [13,14]. Por isso os resultados, obtidos assumindo a homogeneidade, concordam apenas qualitativamente com os resultados experimentais.

2.3 Densidade de estados eletrônicos no isolante.

A seguir, iremos supor que existe, para filmes isolantes, bandas de energias permitidas e proibidas, tal como no caso de um material isolante monocristalino com dimensões infinitas. Na verdade, estas considerações não são aplicadas em filmes finos desde que:

Isolantes produzidos através de oxidação térmica ou anódica ou através de deposição em vácuo ficam no estado amorfo ou policristalino. A distribuição de energia da densidade de estados invade a banda proibida [1]. Esta distribuição dependerá muito da tecnologia utilizada para produzir o filme [1].

Mesmo para monocristais, o conceito de banda de energia tem sentido apenas se o comprimento de DeBroglie, associado aos elétrons, for pequeno comparado com às dimensões do cristal (no nosso caso seria a espessura do filme). No caso de um isolante amorfo, como o SiO_2 , os elétrons com energia cinética de 0,1 eV e massa efetiva m^* de aproximadamente $0,42 m_0$ (m_0 é a massa de repouso do elétron) [4], o comprimento de onda de DeBroglie é da ordem de 6 nm. De fato, Schulmann [13] e Caruthers [14] mostraram que, mesmo em caso de filmes muito finos (≈ 2 nm) poder-se-á definir bandas de energia, mas com parâmetros que não estão associados com o "bulk" do material. Um dos motivos disto é a não existência de volume ("bulk") em filmes muito finos pois as duas interfaces do filmes estão quase se "tocando".

Esta última observação explica porque os resultados encontrados na literatura diferem grandemente entre si, assim como o freqüente desacordo entre os valores dos parâmetros introduzidos no modelo e os medidos no "bulk" do material [1].

2.4 Diagrama de energia de uma estrutura não polarizada.

A seguir será mostrado o diagrama de energia do capacitor MOS idealizado e utilizado neste trabalho como capacitor-matriz, que foi sendo modificado através de inserção de defeitos estruturais e elétricos para a determinação dos seus efeitos elétricos. A Figura II-1

mostra o diagrama de energia, com os correspondentes valores característicos dos materiais que constituem o capacitor MOS: alumínio (Al), óxido de silício (SiO₂) e silício (Si).

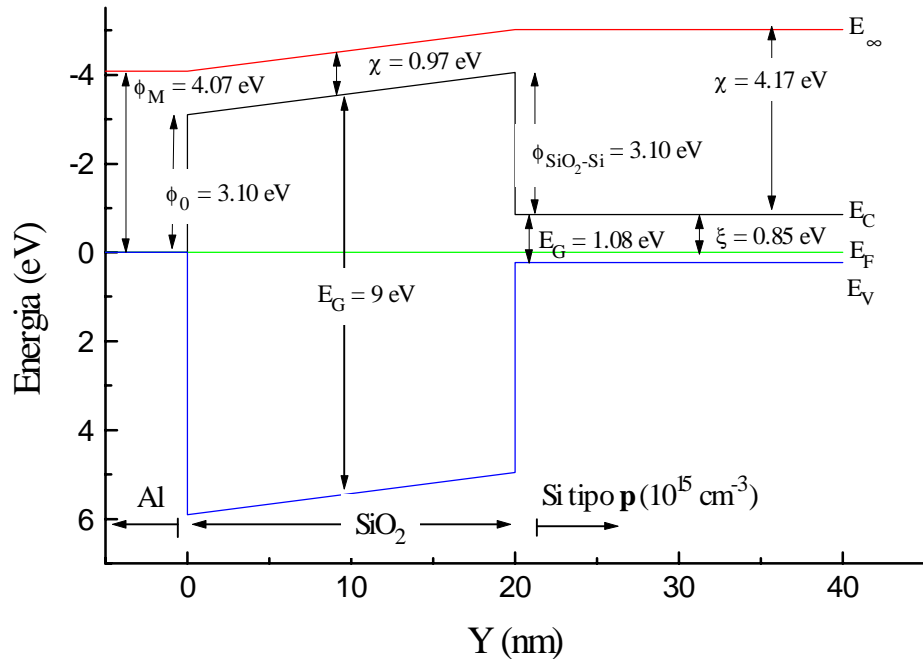


Figura II-1: Estrutura de bandas do capacitor MOS, com os valores das constantes dos materiais

A seguir serão dadas as definições de alguns parâmetros comumente utilizados na descrição do diagrama de energia da estrutura MOS:

Banda de energia proibida (E_G):

Os elétrons, dentro de um sólido, não assumem todos os valores energéticos contínuos, de zero a infinito. A mecânica quântica impõe restrição à energia que os elétrons podem assumir dentro do sólido. Como decorrência deste fato há o aparecimento de bandas contínuas de energia que são proibidas para os elétrons, assim como de bandas de energias permitidas.

Um elétron que se propaga no metal com energia E , que vem na direção da interface metal-isolante, cruzará a interface metal-isolante se no isolante o nível energético E não estiver dentro da banda proibida; caso contrário, o elétron poderá "refletir" na interface e voltar a se propagar para dentro do metal ou, se a espessura do dielétrico for muito pequena, poderá ocorrer o fenômeno de tunelamento do elétron através do dielétrico.

Nível de vácuo (E_{∞}):

Um elétron no vácuo, em repouso e isolado, possui uma energia potencial que iremos considerar como nível de energia de referência. Esta energia é chamada de *nível de vácuo*. É a energia mínima de escape com energia cinética nula no vácuo.

Função Trabalho (ϕ_M):

Em metais o nível de Fermi E_F está localizado na banda de condução. Na temperatura $T = 0$ K, a máxima energia do elétron é E_F . Se queremos extrair este elétron do nível de Fermi do metal, e levá-lo para o nível de vácuo, precisaremos fornecer uma quantidade de energia ϕ_M , onde ϕ_M é chamada *função trabalho do metal* - o conceito de função trabalho pode ser estendido para temperaturas maiores que zero Kelvin. O parâmetro ϕ_M é característico de um dado metal. É útil na descrição do diagrama de energia da interface metal-vácuo. Em semicondutores e isolantes a função trabalho não é característica do material pois o nível de Fermi varia com a dopagem, resultando em diferentes funções trabalhos para diferentes dopagens. Para estes materiais a afinidade eletrônica, que será descrita a seguir, é o parâmetro característico.

Afinidade Eletrônica (χ):

Para um isolante ou um semicondutor, o nível de Fermi está localizado dentro da banda proibida. Esta localização varia com a dopagem e a temperatura. Definimos afinidade eletrônica como sendo a energia necessária para levar um elétron da base da banda de

condução (E_C) até o nível de vácuo. É utilizada na descrição da interface de isolante e semiconductor com o vácuo ($\chi = 4,17$ eV para o Si e $\chi = 0,97$ eV para o SiO_2).

2.4.1 Preenchimento das bandas de energia.

Em cristais, os elétrons se localizam em bandas de energia permitidas, separadas pelas bandas proibidas. Vamos revisar, rapidamente, como estas bandas são preenchidas.

Para $T = 0$ K, todos os níveis abaixo do E_F (nível de Fermi) estarão totalmente preenchidos.

A probabilidade de um nível E estar ocupado é $f_n(E)$:

$E < E_F$	$f_n(E) = 1$
$E > E_F$	$f_n(E) = 0$

Para $T > 0$ K, a probabilidade de um nível de energia E estar ocupado - assumindo que os elétrons são férmions obedecendo a estatística de Fermi-Dirac - é:

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right)} \quad [\text{II-1}]$$

sendo k_B a constante de Boltzmann, E a energia do elétron e μ o *potencial eletroquímico*, que é dependente do campo elétrico [15] e da temperatura. O potencial eletroquímico μ deve ser escolhido de forma tal que $\sum_i f(E_i) = N$ em todas as temperaturas, sendo N o número total de partículas no sistema. Para satisfazer esta condição μ , para temperaturas extremamente elevadas, chega a assumir valores negativos, veja referência [15] para maiores detalhes. Porém, no intervalo de temperatura de 0 até 10×10^4 K o potencial eletroquímico permanece essencialmente constante.

Na Equação II-1, a parte da curva correspondente às altas energias, ou seja, $E - \mu \gg k_B T$, o

termo exponencial do denominador domina tão fortemente que $f_n(E)$ toma a forma:

$$f_n(E) = \exp\left(\frac{\mu - E}{k_B T}\right) \quad [\text{II-2}]$$

que é essencialmente a distribuição de Boltzmann.

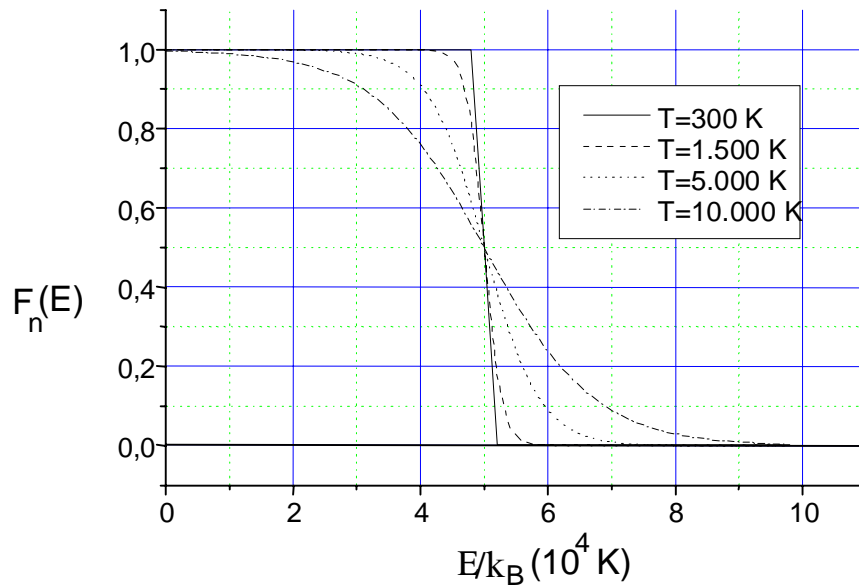


Figura II-2: Função de distribuição de Fermi-Dirac para várias temperaturas. Estes resultados são aplicados a um gás de elétrons tridimensional. $T_F = E_F/k_B = 5 \times 10^4$ K.

k_B/T dá o valor da dispersão dos níveis preenchidos, nas vizinhanças de μ , ou de E_F . Quanto maior a temperatura maior será a probabilidade de ser encontrado um elétron nos níveis mais energéticos. Observe, na Figura II-2, que quanto maior a temperatura, maior é o nível de preenchimento dos níveis acima do nível de Fermi, às custas do esvaziamento dos níveis abaixo do nível de Fermi. Os elétrons que populam os níveis mais energéticos são conhecidos como elétrons quentes.

2.5 Interface metal-isolante.

Se colocarmos em contato um isolante e um condutor, logo que o equilíbrio termodinâmico

é atingido, os níveis de Fermi dos dois materiais ficarão equalizados. A equalização dos níveis de Fermi poderá ser realizada às custas de um entortamento das bandas de energia, tudo dependerá da relação estabelecida entre os valores de ϕ_M do metal e a soma $\chi + \xi$ do isolante (o valor de $\chi + \xi$ é a "função trabalho" do isolante.). Dependendo dos valores de ϕ_M e $\chi + \xi$, a diferença entre E_C e E_F na interface poderá ser maior, igual ou menor que ξ (ξ é a diferença entre E_C e E_F no "bulk" do material), originando contatos com diferentes naturezas. Se houver entortamento de banda haverá o aparecimento de um campo elétrico nas vizinhanças da interface. Para filmes de isolantes muito finos, em uma estrutura MOS, praticamente não há entortamento das bandas do isolante. Neste caso, a equalização energética é feita diretamente entre os níveis de Fermi do metal com do semiconductor; e às custas do entortamento das bandas do semiconductor.

Podemos classificar os contatos em quatro tipos:

Contato Neutro:

Quando $\phi_M = \chi + \xi$, os níveis de Fermi de ambos os materiais se equalizam sem requerer qualquer curvatura das bandas de energia do isolante, portanto não há formação de campo elétrico. A altura da barreira de potencial do metal-isolante (ϕ_0), isto é, a energia necessária para que um elétron seja levado do nível de Fermi do metal para a banda de condução do isolante, é igual a:

$$\phi_0 = \phi_M - \chi = \xi \quad [\text{II-3}]$$

Este tipo de contato conduz a um tipo de condução pelo qual a corrente é controlada pelo eletrodo. Desde que $(E_C - E_F)$ seja constante no isolante, próximo à interface, a concentração de elétrons livres permanece baixa (correspondente à concentração intrínseca do "bulk" do isolante). Uma corrente significativa irá fluir somente quando o eletrodo metálico injetar elétrons no isolante. O fluxo de elétrons irá, então, depender da altura da barreira ϕ_0 , isto é, da natureza da combinação metal-isolante e da

dopagem do isolante.

Contato Schottky:

Quando $\phi_M > \chi + \xi$, o alinhamento necessário dos níveis de Fermi nos dois materiais forçará a curvatura da banda de energia do isolante para cima. Um campo elétrico interno aparecerá de forma a repelir o elétron da interface, criando uma camada depletada de elétrons. A largura desta camada será chamada de W_{depl} . Para garantir a neutralidade da estrutura aparecerá uma camada de elétrons acumulados no lado metálico.

Contato Ohmico (Mott Gurney):

Este caso corresponde a $\phi_M < \chi + \xi$. A equalização dos níveis de Fermi, na interface, força a curvatura das bandas de energias no isolante para baixo. Com isso há a formação do campo elétrico nesta região do isolante, que irá atrair os elétrons para a interface e assim, será formada uma camada de elétrons acumulados no isolante. A neutralidade eletrônica requer que seja formada uma região depletada no lado metálico.

Neste caso, quando temos uma baixa densidade de centro de armadilhamento, N_t , a largura da região acumulada, λ , será grande (para $N_t = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $\lambda = 100 \text{ }\mu\text{m}$) o que implica que $E_C(x)$ é quase constante para longas distâncias no isolante. Conseqüentemente, a densidade de elétrons é muito maior que a densidade de elétrons livres intrínsecos do "bulk" do isolante. Este tipo de contato é um ejetor perfeito e é chamado de contato ohmico. O fluxo de corrente, para este caso, é limitado apenas pelo "bulk" do isolante.

2.6 Efeito força imagem.

Quando um elétron estiver a uma distância x_0 da interface Al-SiO₂, dentro do SiO₂, uma distribuição de cargas positivas será induzida na superfície do alumínio. A força atrativa entre o elétron, situado na posição x_0 , e as cargas positivas, induzidas na superfície do alumínio, será equivalente à força existente entre o elétron e uma carga positiva de

igual carga localizado na posição $-x_0$. Esta carga positiva é conhecida por carga imagem. A força atrativa, conhecida por força imagem, é dada por:

$$\vec{f}(x_0) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_i} \cdot \frac{1}{4x_0^2} \cdot \vec{i} \quad [\text{II-4}]$$

sendo \vec{i} um vetor unitário na direção OX. O sinal negativo mostra que a força imagem é sempre atrativa; se tivéssemos um buraco ("hole"), no lugar do elétron, no metal seria induzida uma distribuição de cargas negativas, resultando em uma força imagem também atrativa. A energia potencial da carga imagem é dada pelo trabalho necessário para trazer a carga do infinito até o ponto x_0 e é dada por:

$$\phi_{im}(x_0) = \int_{\infty}^{x_0} f_o(x) dx = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_i} \cdot \frac{1}{4x_0} \quad [\text{II-5}]$$

sendo que $\phi_{im}(x_0)$ é expresso em eV.

2.7 Efeito Schottky:

Ocorre quando há uma ação conjunta da força imagem com um campo elétrico constante \mathcal{E} , veja Figura II-3; o resultado desta ação conjunta é o abaixamento da barreira de potencial. A energia potencial resultante é dada por:

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_i} \cdot \frac{1}{\mathbf{x}} + q \mathcal{E} \mathbf{x} \quad (\text{eV}) \quad [\text{II-6}]$$

o valor do abaixamento da barreira de potencial e a posição onde a barreira é máxima são obtidas impondo a condição $d\phi(x)/dx = 0$, e são dados por:

$$\Delta\phi = (q \cdot \mathcal{E} / 4\pi\epsilon)^{1/2} = 2 \cdot \mathcal{E} \cdot x_m \quad [\text{II-7}]$$

e

$$x_m = (q/16\pi\epsilon \mathcal{E})^{1/2} \quad [\text{II-8}]$$

No caso particular da interface Al-SiO₂, com um campo elétrico aplicado externamente de 12 MV/cm, teremos um abaixamento da barreira de potencial de $\Delta\phi = 0,67$ eV sendo que a posição da máxima altura da barreira de potencial fica em $x_m = 28$ nm da interface Al-SiO₂.

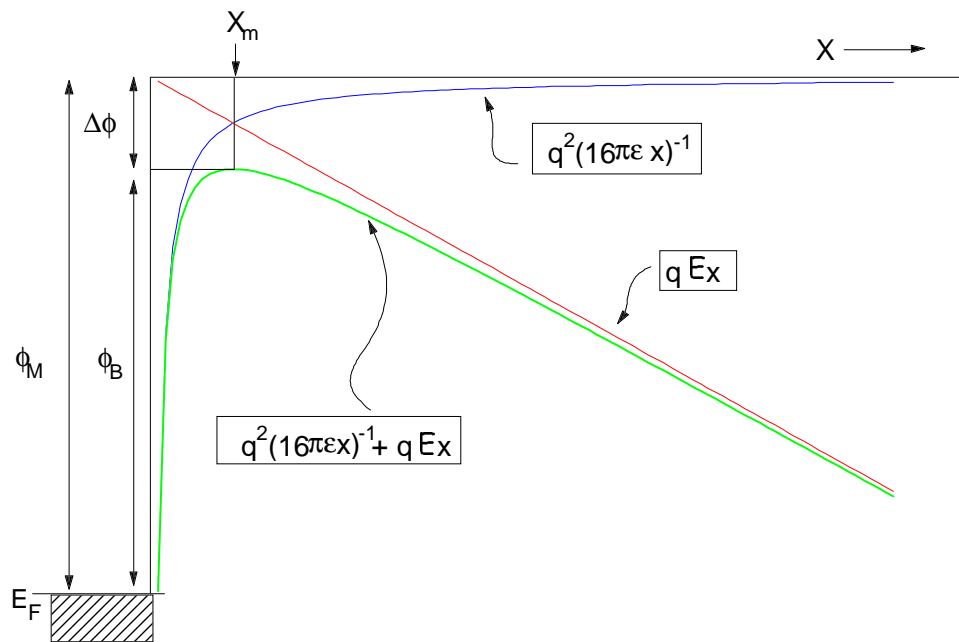


Figura II.3 - Diagrama de energia na interface Al-SiO₂. A função trabalho efetiva do metal é reduzida pelo efeito combinado da força imagem e do campo elétrico externo \mathcal{E} .

Existe um campo crítico $\mathcal{E}_{\text{crit}}$ no qual a barreira de potencial é totalmente anulada pelo efeito do campo elétrico. No caso de uma interface Al-SiO₂, onde a barreira de potencial é dada por $\phi_0 = 3,13$ eV, o campo com o qual a barreira de potencial é totalmente anulada, é dado por $\mathcal{E}_{\text{crit}} = 66,3$ MV/cm. Para um capacitor constituído de Al-SiO₂-Si há uma ruptura "intrínseca" do dielétrico para $\mathcal{E}_R = \mathcal{E}_M \approx 14$ MV/cm, não atingindo o valor crítico, e atingindo um abaixamento de barreira de potencial de $\Delta\phi = 0,72$ eV, ou seja, 23% do valor necessário para anular a barreira de potencial.

2.8 Campo elétrico médio e local.

O campo elétrico médio é dado por:

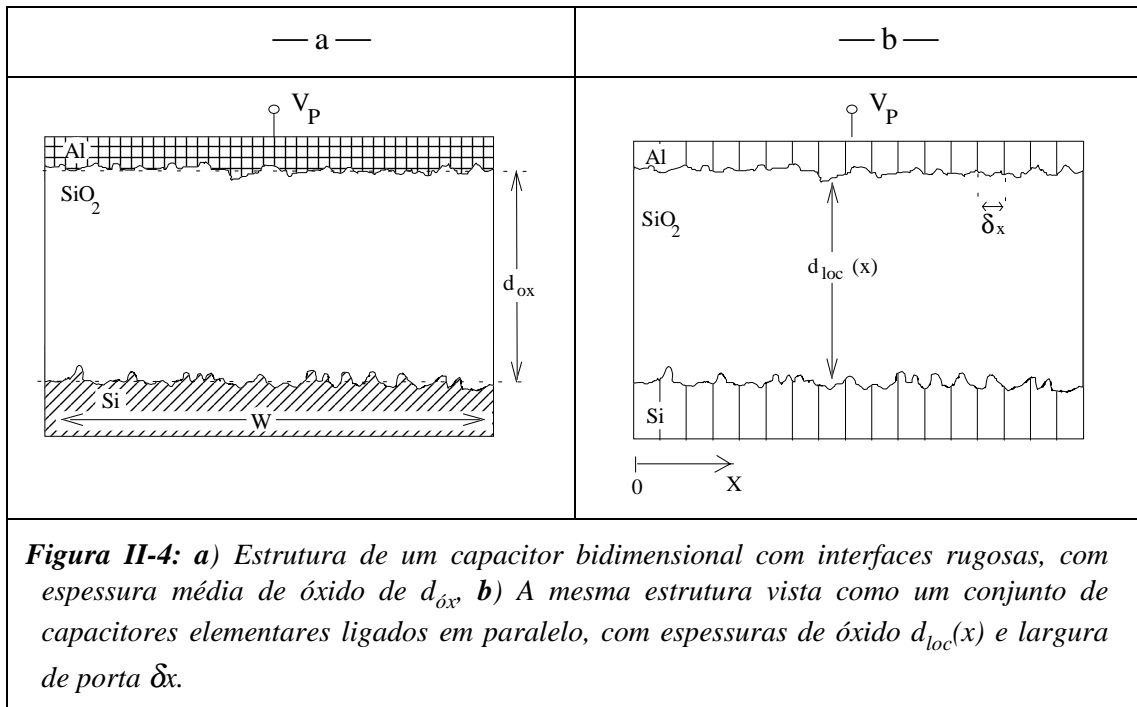
$$\mathcal{E}_M = V_P/d_{\text{óx}} \quad , \quad \text{[II-9]}$$

que é o resultado de uma primeira aproximação, em que se utiliza um capacitor ideal com placas planas e paralelas, e que em muitos casos vem sendo bastante útil. Em um capacitor real a espessura do óxido não é constante e igual a $d_{\text{óx}}$, mas variável, assumindo valores $d_{\text{loc}}(x)$ dependente da posição na interface (veja Figura II-4). Em medidas experimentais, tais como a técnica C-V (Capacitância versus Tensão) ou I-V (Corrente versus Tensão), a espessura $d_{\text{óx}}$ considerada, ou obtida, é uma espessura efetiva, que é uma espécie de média das espessuras locais. O campo elétrico local, por outro lado, é definido ponto-a-ponto.

O campo elétrico local é decorrência da não idealidade do capacitor MOS, havendo em sua estrutura defeitos estruturais, como rugosidades e precipitados, químicos, como falha de estequiometria e impurezas, e elétricos como cargas fixas no óxido, cargas móveis, etc. Atualmente a determinação do campo elétrico local, ou das perturbações no campo elétrico local devido a defeitos, vem sendo de importância fundamental para o avanço da nanoeletrônica [16], assim como no estudo de ruptura de dielétricos ultra finos, em que o aumento localizado do campo elétrico pode ser tal que exceda a rigidez dielétrica do material, havendo com isso a ruptura do dielétrico.

Para ilustrar o efeito dos defeitos citados na perturbação do campo elétrico local, pode-se determinar o efeito da rugosidade no valor do campo elétrico local seria considerar o capacitor com interfaces rugosas como sendo uma associação em paralelo de capacitores elementares planos, e que não interagem um com o outro. Através da Equação II-9, pode-se determinar uma primeira aproximação para o valor do campo elétrico local, sabendo-se que o valor de V_P continuará o mesmo, pois o conjunto de capacitores estão associados em paralelo e as espessuras locais do dielétrico será dada por $d_{\text{loc}}(x)$, que varia de capacitor-a-

capacitor.



Após a divisão do capacitor em elementos de capacitores infinitesimais pode-se constatar, que aqueles capacitores que apresentarem menores espessuras locais de óxido são os que terão os maiores campos elétricos.

Veja representação do campo elétrico local na Figura II-5, onde o módulo e a direção dos campos elétricos locais foram obtidos através da simulação de um capacitor MOS com a interface Si- SiO_2 rugosa. Nesta simulação os efeitos das pontas são levados em conta.

É importante observar que atualmente não existem técnicas para se determinar experimentalmente o campo elétrico local dentro do capacitor MOS. O'Shea [17] determina o campo elétrico de ruptura em uma região microscópica, através da utilização do cabeçote do microscópio de força atômica como eletrodo de porta. É importante observar neste trabalho, que apesar do eletrodo de porta ter um tamanho muito pequeno, o campo elétrico medido continua sendo uma média dos campos locais existentes no dielétrico, entre o substrato de silício e o eletrodo de alumínio. Outra observação é que o eletrodo de porta,

neste caso, é praticamente pontual, o que faz com que o campo elétrico varie com r^{-2} (sendo r a distância do eletrodo de porta).

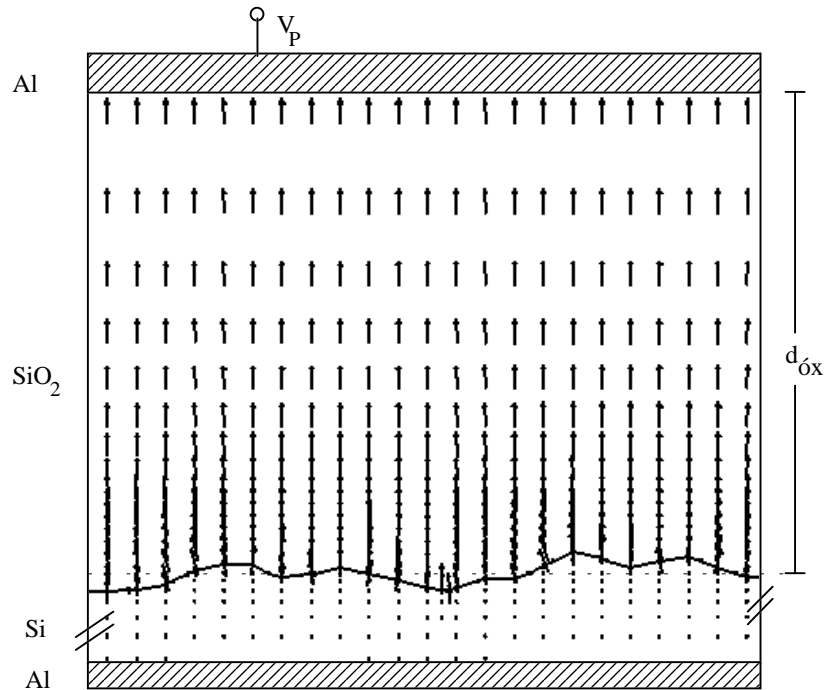


Figura II-5: Ilustração dos campos elétricos locais, em um capacitor MOS com rugosidade na interface Si-SiO₂

Neste trabalho o campo elétrico local é determinado teoricamente através de simulações de capacitores MOS com defeitos estruturais, químicos e elétricos. Os valores dos campos elétricos locais obtidos por simulação são uma boa estimativa da distribuição espacial dos campos elétricos dentro de um dispositivo com dimensões nanoscópicas. O conhecimento da distribuição espacial dos campos elétricos locais, obtida por simulação, enriquece em muito este panorama tecnológico, em que já estão sendo construídos dispositivos com dimensões nanométricas [16].

3. Correntes limitadas pela injeção de elétrons pelos eletrodos

As correntes limitadas pela injeção de elétrons pelos eletrodos são essencialmente de

dois tipos: termoiônico e tunelamento. O tunelamento se divide em clássico e Fowler-Nordheim. A seguir será dado um embasamento teórico partindo de uma estrutura MIM (Metal-Isolante-Metal), que tem um comportamento funcional equivalente à estrutura MOS (Metal-Óxido-Semicondutor), quando o mecanismo de condução é limitado pela injeção de elétrons pelos eletrodos.

3.1 Expressão geral da corrente.

Vamos considerar a estrutura de sanduíche formada pelas camadas de Metal 1 (M_1) / Isolante / Metal 2 (M_2) conhecida por estrutura MIM. Alguns elétrons fluem da banda de condução do M_1 para a do M_2 e outros do M_2 para o M_1 . Ambos os fluxos de elétrons dependem da probabilidade de um elétron cruzar a barreira de potencial imposta pelo isolante. Quando $V = 0$, ambos os fluxos são iguais e a corrente líquida é zero. Quando $V > 0$, o fluxo de M_1 para M_2 é maior que de M_2 para M_1 , produzindo uma corrente líquida de M_1 para M_2 . Para elétrons de M_1 com energia E , o fluxo de elétrons em direção a M_2 é proporcional a:

- i) Densidade de estados.
- ii) Probabilidade do estado energético E estar ocupado em M_1 .
- iii) Probabilidade do estado E estar vazio no M_2 .
- iv) Ao coeficiente de transmissão da barreira.
- v) Velocidade do elétron ao longo da direção OX (a análise é unidimensional, com a direção do eixo X normal às superfícies do eletrodos. A origem do sistema será na interface metal-isolante.).

Na análise será considerado também que:

- A probabilidade de o estado E estar ocupado é dada pela estatística de Fermi-Dirac,

Equação II-1.

- Coeficiente de transmissão $D(E)$, de um elétron indo de M_1 para M_2 , é dado pela razão da probabilidade de um elétron estar em M_2 com energia E , pela probabilidade de estar em M_1 com energia E .
- A velocidade, ao longo do eixo OX , de um elétron com energia E , com um componente de vetor de onda k_x , é dada por: $(1/\hbar)\partial E/\partial k_x$.

A expressão da corrente eletrônica (J) é dada pela Equação II-10:

$$J = \frac{4\pi q m^*}{h^3} \int_{E_m}^{\infty} [f_n(E) - f_n(E+V)] \left[\int_{E_m}^E D(E_x) dE_x \right] dE \quad [\text{II-10}]$$

sendo que E_m é a mínima energia dos elétrons de condução, E_x é a energia do elétron ao longo da direção X , E é a energia total do elétron em eV, e m^* a massa efetiva pseudo-clássica do elétron no isolante.

A estrutura analisada neste trabalho é Al-SiO₂-Si, sendo que a análise da estrutura Metal-Dielétrico-Metal é uma boa aproximação [1].

3.2 Corrente termoiônica (Schottky).

A corrente termoiônica, também conhecida por corrente Schottky, é devida aos elétrons que transitam por sobre a barreira de potencial, isto é, aqueles que têm energias $E_x > \phi_m$, como está ilustrado na Figura II-6 (figura na qual ϕ_0 representa a altura da barreira de potencial metal-isolante, sem o efeito Schottky). O termo termoiônico é referente à excitação dos elétrons, que a zero Kelvin estão todos abaixo do nível de Fermi, mas que a temperaturas maiores passam a popular níveis mais energéticos que E_F , obedecendo a distribuição de Fermi-Dirac. Quanto maior a temperatura, maior será a quantidade de

elétrons com energias maiores que a barreira de potencial ($E > \phi_0$), e conseqüentemente, a corrente termoiônica será maior. A denominação corrente Schottky vem da associação da emissão termoiônica, um efeito predominantemente térmico, com o abaixamento da barreira de potencial devido à presença de um campo elétrico aplicado externamente, efeito este conhecido por efeito Schottky; neste caso, quanto maior for o campo elétrico, maior será o abaixamento da barreira de potencial e conseqüentemente, o limiar energético será menor para a emissão de elétrons por sobre a barreira, e assim maior será a quantidade de elétrons emitidos por sobre a barreira de potencial. Veja na Figura II-6 que a altura da barreira, sem o campo elétrico é ϕ_0 , enquanto que com o efeito de força imagem a altura passa a ser ϕ_m .

O coeficiente de transmissão D, é dada pelas condições:

$E_x < \phi_m$	$D = 0$	[II-11]
$E_x \geq \phi_m$	$D = 1$	

Neste caso está sendo desprezada a contribuição dada pelos elétrons que conseguem passar pela barreira através do efeito túnel, o qual será analisado no próximo parágrafo.

Integrando a Equação II-10, com $E_m = \phi_m$ e D sendo definido pela Equação II-11, teremos:

$$J = \frac{4\pi m^* q k_B^2 \cdot T^2}{h^3} \exp\left(-\frac{\phi_0}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{\beta_s \mathcal{E}_M^{1/2}}{k_B T}\right) \quad \text{[II-12]}$$

onde:

$$\beta_s = \left(\frac{q}{4\pi\epsilon_i}\right)^{1/2} \quad \text{[II-13]}$$

sendo que \mathcal{E}_M é o campo elétrico médio, no interior do dielétrico.

Em um processo termicamente ativado há um fluxo de corrente, quando o elétron passa sobre a barreira de potencial e atravessa o isolante. A energia de ativação, para este processo é a diferença entre a altura da barreira de potencial do metal-isolante (ϕ_0) e o abaixamento desta barreira pelo efeito Schottky ($\beta_s \sqrt{\mathcal{E}_M} = 0,67 \text{ eV}$), que para o caso da interface Al-SiO₂ é dado por:

$$\phi_m = \phi_0 - \beta_s \sqrt{\mathcal{E}_M} = (3,10 - 0,67) \text{ eV} = 2,43 \text{ eV} , \quad [\text{II-14}]$$

para um campo elétrico aplicado de 12 MV/cm.

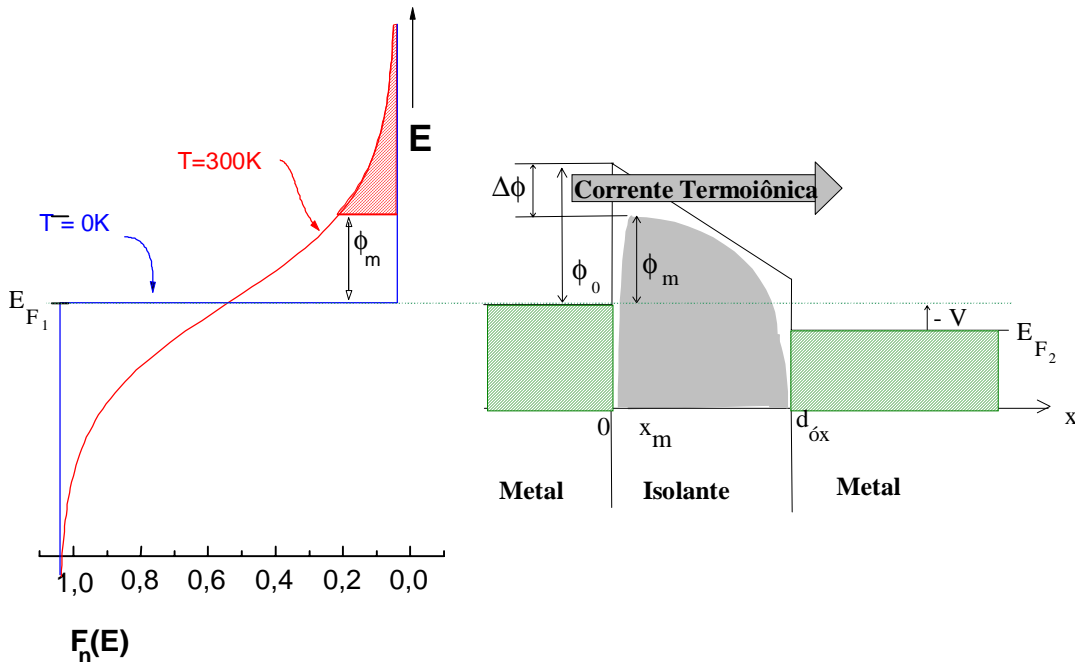


Figura II-6 - Diagrama de energia de uma estrutura metal-isolante-metal (MIM). O "abaixamento" da barreira, devido ao efeito da força-imagem, também é mostrado na curva preenchida. À direita o gráfico da distribuição de Fermi-Dirac, e os elétrons excitados termicamente que passam sobre a barreira de potencial.

Se o mecanismo de condução não for conhecido, uma das maneiras de determinar se o mecanismo é termo-iônico é observar se o gráfico $\ln(J)$ versus $\sqrt{\mathcal{E}_M}$ é linear para uma

temperatura constante; se for, será termoiônico. Do coeficiente angular da reta obtém-se o valor de β_s .

O valor da barreira de potencial é determinado a partir do coeficiente angular da reta resultante do gráfico $\log(JT^{-2})$ versus T^{-1} . Com a variação apenas da temperatura, teremos a variação da emissão de elétrons sobre a barreira devido à excitação dos elétrons, populando os níveis energéticos acima da barreira de potencial, causado pela elevação da temperatura. A barreira de potencial, ϕ_o , é comumente chamada, neste caso, de energia de ativação [31].

Para que a Equação II-12 fosse estabelecida foram assumidos as seguintes condições:

- i. O isolante é fino e as interfaces podem ser *consideradas neutras*.
- ii. O livre percurso médio do elétron dentro do isolante é grande, quando comparado com a espessura do isolante.

Quando estas condições não são verificadas, o resultado obtido é diferente. O fator pré-exponencial é modificado se o elétron é espalhado no isolante [18]. Para óxidos ultra finos, da ordem de 3 nm, o livre percurso médio do elétron no SiO₂ é da ordem de 0,6 nm [19,20], enquanto que para óxidos espessos é da ordem de 3,5 nm [21]. Para contatos Schottky, a energia potencial não varia da forma mencionada anteriormente e J não segue a Equação II-12.

3.3 Corrente de tunelamento.

Um elétron no eletrodo M₁ com energia E, menor que a barreira de potencial ϕ_m tem uma probabilidade diferente de zero de chegar no eletrodo M₂. O elétron poderá atingir M₂ tunelando através da barreira de potencial. A corrente de tunelamento poderá ser obtida pela Equação II-10, assumindo $E_m = 0$ (observe que com esta condição a corrente termiônica já vem "embutida" na corrente resultante, pois o intervalo de integração em E é

de 0 à ∞). Os elétrons que atravessarão a barreira são aqueles da banda de condução de M_1 . A dificuldade consiste em calcular o coeficiente de transmissão $D(E_x)$.

Em mecânica quântica, a função de onda $\psi(x)$ associada com o elétron pode ser calculada através da equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E_x - \phi(x))\psi(x) = 0 \quad [\text{II-15}]$$

onde $\phi(x)$ é a energia potencial e m^* é a massa efetiva do elétron.

Uma solução analítica é em geral difícil, sem a utilização de aproximações. Quando o comprimento de onda de DeBroglie associado ao elétron é pequeno comparado com a espessura do dielétrico ($d_{\text{óx}}$), as propriedades do sistema são pseudo-clássicas e $\psi(x)$ pode ser avaliado em toda a estrutura. Para se ter uma idéia das grandezas envolvidas, um elétron com energia de 0,1 eV e massa efetiva de 0,42 m_0 , o comprimento de onda de DeBroglie é da ordem de 6 nm; enquanto que as espessuras dos óxidos tratados neste trabalho são da ordem de 10-20 nm.

Wentzel, Kramers e Brillouin [22,23] utilizaram esta hipótese (método WKB) e obtiveram:

$$D(E_x) = \exp\left[\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1(E_x)}^{x_2(E_x)} P(x) dx\right)\right] \quad [\text{II-16}]$$

onde $P(x)=[2m^*q(\phi(x)-E_x)]^{1/2}$ é o momento do elétron no dielétrico, e $x_1(E_x)$ e $x_2(E_x)$ são os pontos onde começa e termina, respectivamente, a barreira de potencial para o nível energético E_x , ou seja, são os limites da região classicamente acessível. Esta integral, com $\phi(x)$ deformado pelo efeito de força imagem, é uma integral elíptica completa e foi calculada pela primeira vez em 1923 por Nordheim.

Esta expressão tem maior validade quando $D(E_x)$ é pequeno. A Equação II-16 ainda é difícil de usar, mas alguns comentários adicionais podem ser feitos:

- a) O coeficiente de transmissão aumenta se a energia E_x aumentar.
- b) No metal, a uma temperatura suficientemente baixa, poucos elétrons têm energias superiores a E_F .

Estas considerações levaram Stratton [24] a propor que apenas elétrons com energia $E_x \approx \xi_1 (= E_F - E_C)$ cruzariam o dielétrico. Isto permite desenvolver $D(E_x)$ em função de $(E_x - \xi_1)$. Integrando a Equação II-10, obtém-se:

$$J(V, T) = \frac{4\pi m^* q e^{-b_1}}{h^3 c_1^2} \frac{\pi c_1 k_B T}{\text{sen}(\pi c_1 k_B T)} (1 - \exp(-c_1 V)) \quad [\text{II-17}]$$

onde

$$b_1 = \alpha^* \int_{x_{11}}^{x_{21}} (\phi(x) - \xi_1)^{1/2} dx$$

$$c_1 = \frac{\alpha^*}{2} \int_{x_{11}}^{x_{21}} (\phi(x) - \xi_1)^{-1/2} dx$$

$$\alpha^* = \alpha \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^{1/2} \quad \text{sendo } \alpha = \frac{2(2m_0 q)^{1/2}}{\hbar} = 10,25 \quad [eV^{-0,5} \text{ nm}^{-1}]$$

A temperatura influencia a corrente apenas através do termo $\pi c_1 k_B T / \text{sen}(\pi c_1 k_B T)$, que tem um valor próximo da unidade quando $\pi c_1 k_B T \ll 1$. Pode-se verificar que este é quase sempre o caso, o que significa que a influência deste termo na variação de J com c_1 e com V , pode ser desprezado.

Consideremos uma estrutura MIM com altura de barreira de potencial ϕ_0 e desprezando o efeito de imagem força. Quando a estrutura é polarizada, a energia

potencial do elétron é dada por:

$$\phi(x) = \xi_1 + \phi_0 - \mathcal{E}_M \cdot x \quad [\text{II-18}]$$

Para pequenos valores de polarizações temos a corrente, em $T = 0$ K, dada por:

$$J(V,0) = \frac{q^2}{\pi h} \frac{\phi_0}{d_{\text{ox}}^2} e^{-\alpha^* d_{\text{ox}} \phi_0^{1/2}} \text{sh} \left(\frac{\alpha^* d_{\text{ox}} V}{4\phi_0^{1/2}} \right) \quad [\text{II-19}]$$

neste caso foi considerado, também, que $\mathcal{E}_M \cdot d_{\text{ox}} \ll \phi_0$. Pode-se observar, desta equação:

- Quando $\alpha^* d_{\text{ox}} V / (4\phi_0^{1/2}) \ll 1$, a estrutura MIM tem um comportamento ôhmico.
- O termo com sh (seno hiperbólico) vem de $1 - \exp(-c_1 V)$ da Equação II-17, que está associado ao fluxo de elétrons de M_1 para M_2 menos M_2 para M_1 . Quando V é grande ($\alpha^* d_{\text{ox}} V / (4\phi_0^{1/2}) \gg 1$), o fluxo de M_2 para M_1 é desprezível e a corrente varia com $\exp[\alpha^* d_{\text{ox}} V / (4\phi_0^{1/2})]$.

3.4 Corrente de Fowler-Nordheim.

A corrente de Fowler-Nordheim (F-N) aparece para polarizações elevadas, ou seja, $V > \phi_0$ e a Equação II-17, após as substituições, pode ser escrita como:

$$J = A(\mathcal{E}_M)^2 \exp(-B/\mathcal{E}_M) \quad [\text{II-20}]$$

onde foi considerado o campo elétrico médio, dado por $\mathcal{E}_M = V_P/d_{\text{ox}}$. Portanto, a relação $\ln(J/\mathcal{E}^2)$ varia linearmente com $1/\mathcal{E}_M$.

$$J = \frac{q^2}{8\pi h \phi_0} \left(\frac{V}{d_{\text{ox}}} \right)^2 \exp \left(- \frac{4\sqrt{2m_0} q}{3\hbar} \sqrt{\frac{m^* \phi_0^3}{m_0}} \frac{d_{\text{ox}}}{V} \right) \quad [\text{II-21}]$$

sendo, para o caso da estrutura Si-SiO₂-Al, os parâmetros A e B são dados por:

$$A = \frac{q^2}{8\pi h} \frac{1}{\phi_0} = 1,54 \times 10^{-6} \frac{1}{\phi_0} \quad (AV^2)$$

$$B = \frac{4\sqrt{2m_0q}}{3\hbar} \sqrt{\frac{m^*\phi_0^3}{m_0}} = 6,83 \times 10^7 \sqrt{\frac{m^*\phi_0^3}{m_0}} \left(\frac{V}{cm} \right)$$

Na dedução anterior não foi considerado o efeito de força imagem. Se este efeito for considerado os coeficientes A e B sofrerão correções dadas por [4]:

$$A_{\text{corr}} = A t(y)^{-2}$$

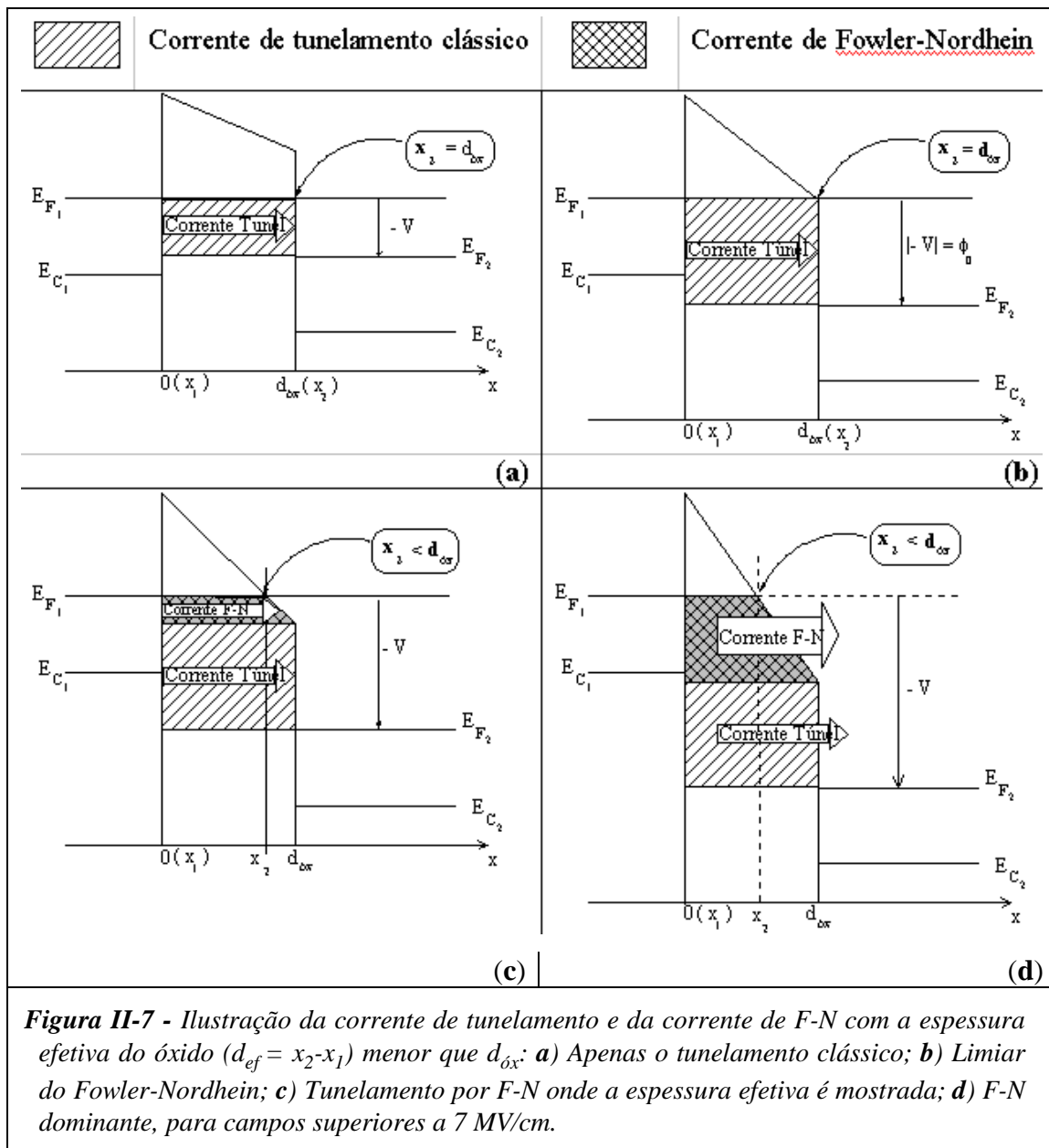
e

$$B_{\text{corr}} = B v(y),$$

onde t(y) e v(y) são integrais elípticas tabuladas e $y = (1/\phi_0)(q\mathcal{E}/4\pi\epsilon)^{1/2}$. Esta correção causa um aumento no coeficiente linear da curva de F-N, enquanto que para o coeficiente angular há uma diferença de aproximadamente 1% para $y < 0,23$, que correspondem aos casos tratados neste estudo [31].

Se o efeito da temperatura for considerado, o termo A será corrigido pelo fator multiplicativo dado por: $\pi c k_B T \text{sen}^{-1}(\pi c k_B T)$, com $c = 2(2m\phi_0)^{1/2}t(y)/(\hbar q\mathcal{E}_M)$.

A Equação II-20 não é completa, pois não inclui o efeito das rugosidades eletrônicas, que inclui desde o abaixamento da barreira de potencial, em não uniformidade da barreira de potencial, assim como das rugosidades estruturais. No entanto a Equação II-20 é uma boa aproximação para as medidas ou caracterizações médias feitas sobre toda a área do eletrodo de porta; como são feitas pela técnica I-V em um capacitor MOS [25].



A rugosidade estrutural das interfaces Al-SiO₂ e SiO₂-Si desempenham um papel bastante importante na intensidade da corrente de F-N, pois o elemento fundamental das correntes de tunelamento é que as mesmas dependem da espessura da barreira de potencial, em primeiro lugar, e em segundo, como é o caso do mecanismo de F-N, além do afinamento da barreira de potencial devido ao efeito do campo elétrico, teremos também o efeito de um afinamento da barreira devido às rugosidades estruturais nas interfaces e

até mesmo devido a um precipitado metálico dentro do dielétrico; com isso, nas regiões onde a espessura local for menor a corrente de tunelamento será maior, criando desta maneira, regiões preferenciais de passagem de elétrons.

Observe que até este momento o mecanismo de condução foi abordado apenas sob um aspecto unidimensional. Porém, o capacitor MOS real é tridimensional possuindo defeitos como rugosidades nas interfaces Si-SiO₂ e Al-SiO₂, impossíveis de serem descritas em uma abordagem unidimensional. Uma primeira aproximação na determinação do efeito da rugosidade na corrente injetada no dielétrico pelo mecanismo de F-N, seria considerar o capacitor com interfaces rugosas como sendo um conjunto de capacitores elementares planos, todos em paralelo. As espessuras desses capacitores planos seriam iguais à espessura local do óxido d_{loc} no ponto, veja o parágrafo 2.8.

As rugosidades podem colaborar também, de outra maneira, no incremento da corrente de tunelamento, pois nas regiões onde a espessura do óxido é menor, o campo elétrico é maior, devido à relação $\mathcal{E}_M \cong V_P/d_{ox}$. Há também o efeito das pontas, presentes nas vizinhanças das regiões com espessuras pequenas. Segundo a Equação II-20 a corrente depende do produto $(\mathcal{E}_M)^2$ pelo $\exp(\mathcal{E}_M)$, ou seja, com uma pequena variação do campo elétrico a corrente variará exponencialmente, para campos elevados, e quadraticamente, para campos pequenos, ou seja, é uma dependência bastante forte. A Equação II-20 é uma descrição macroscópica, sendo que o campo elétrico e a espessura do óxido são médias sobre uma região bastante grande. Comumente é calculada a média sobre a área da porta do capacitor. No estudo de rupturas de capacitores com filmes de SiO₂ ultra finos, é importante estimar o valor das correntes locais injetadas, pois estes efeitos locais passam a ser determinantes nos mecanismos de rupturas de dielétricos. Como exemplo, temos a importância da constância das cargas de ruptura Q_R nos mecanismos de rupturas, já observada em vários estudos [11,12], e o desenvolvimento de uma idéia análoga: constância das *cargas locais de rupturas*, que é uma idéia atraente pois a quantidade de cargas de

ruptura é uma média sobre toda a área do eletrodo de porta, e assim como foi dito sobre o \mathcal{E}_M , com certeza haverá regiões, dentro do dielétrico não homogêneo, com maiores injeção de cargas e outras com menores injeção.

Além do afinamento local do dielétrico pode-se mencionar o efeito "ponta", que é um efeito que não pode ser observado em um capacitor unidimensional. O efeito ponta consiste num incremento do campo elétrico local devido a geometria da interface, sendo que este incremento se restringe a uma região relativamente pequena. Um campo elétrico maior em uma região significa que as bandas de energia irão se curvar, mais do que em média, nesta região. Uma ponta na interface injetora levará a uma injeção maior de corrente nesta região pois a distância X_2-X_1 , mostradas na Figura II-7, será menor nesta região que em outras que não possuam "pontas". Continuando com este raciocínio, pode-se generalizar que, para a corrente de F-N, a rugosidade mais importante será a da interface de onde é injetado o elétron, sendo que a rugosidade da outra interface irá participar apenas na componente de corrente de tunelamento clássico, pois aí a espessura local do filme será menor.

4. Correntes Limitadas pelo volume do Dielétrico.

Quando o eletrodo da interface metal-isolante for injetor a corrente é limitada pelo efeito do volume, ou seja, depende das características do interior ("bulk") do isolante. No isolante, existem níveis de doadores profundos com algumas unidades de eV abaixo da banda de condução. Existem também armadilhas ("traps") rasas para elétrons, localizadas alguns décimos de eV abaixo da banda de condução. A Figura II-8 mostra a estrutura de bandas de um isolante com níveis de doadores (energia E_D e densidade N_D) e nível de armadilhamento (energia E_T e densidade N_T).

Estes sítios de níveis doadores e aceitadores podem ser resultantes de impurezas presentes na rede do SiO_2 , como o sódio com o nível centrado em 2,4 eV, disperso por 0,5 eV abaixo da banda de condução [26,27], ou de irradiação de partículas energéticas, como a

implantação iônica, que podem deslocar os átomos da rede, ou mesmo danificar a rede [25].

Uma categoria bastante curiosa de sítios de armadilhamento é o associado à água [28,29,25], assim chamado pela proporcionalidade da densidade destes sítios com a concentração de água incorporada pelo óxido durante a oxidação térmica. A natureza química destes centros ainda é desconhecida, mas ao contrário dos centros convencionais que ao capturar e emitir os elétrons permanecem estáveis, estes, ao capturar um elétron, iniciam uma reação química que terá como produto um centro carregado negativamente mais um hidrogênio. Esta reação química continuará até que todos os sítios associados à água sejam consumidos.

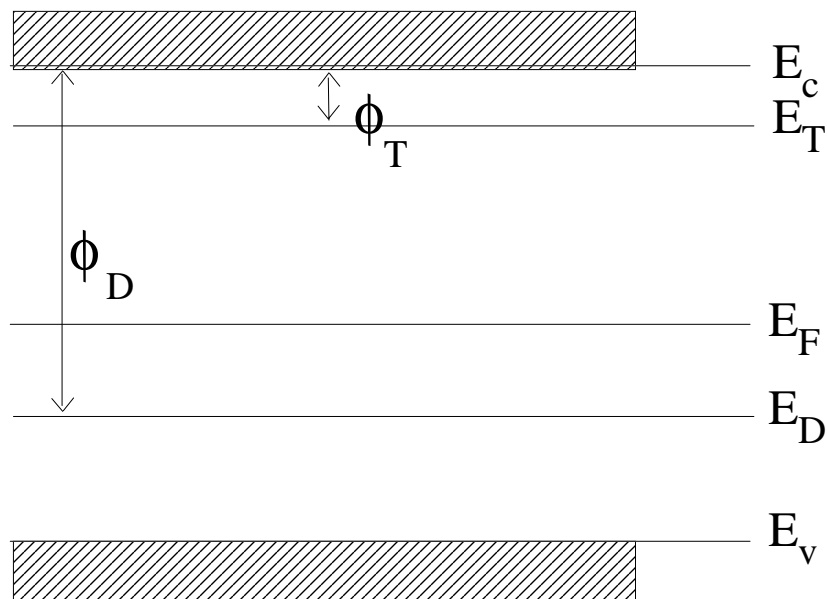


Figura II-8 - Diagrama de energia do volume de um isolante com níveis de armadilhamento, com energia E_T , e um centro de doadores, com energia E_D

Na estrutura Al-SiO₂-Si, os elétrons irão transitar em grandes quantidades pela banda de condução do dielétrico quando da ocorrência do mecanismo de Fowler-Nordheim (F-N), em que o elétron é tunelado pelo topo da barreira de potencial e aparecerá na banda de condução do óxido, e pela banda de condução irá se locomover pelo mecanismo de deriva, até atingir o silício ou o alumínio.

Tabela II-1 – Seção de choque de captura de elétron dos sítios de armadilhamentos presentes no SiO_2 .

Armadilha	σ (cm ²)	ϕ_T (eV)	Referência
Associada a água	$1,5 \times 10^{17}$		29
Associada ao Sódio	10^{12}	$2,4 \pm 0,25$	26
Tungstênio depositado	10^{14} a 5×10^{14}		27
Tungstênio implantado	10^{15}		27
Alumínio	10^{15} a 10^{18}		27
Arsênio	10^{15}	3 a 4 eV	27
Fósforo	3×10^{17}	3 a 4 eV	27

Quando um elétron viaja através do SiO_2 ele tem grande possibilidade de ser armadilhado, devido à grande concentração de defeitos na rede deste material (veja os valores de seção de choque na Tabela II-1). Mesmo assim a condução eletrônica ainda pode ser realizada se o elétron puder transitar de uma armadilha para outra vizinha. A altura da barreira de potencial local ϕ_m , apresentada na Figura II-9, dependerá das interações coulombianas (devido aos elétrons já armadilhados nas vizinhanças), do campo elétrico local e do intervalo de energia que separa o nível da armadilha da base da banda de condução. O elétron poderá vencer esta barreira de duas maneiras:

- i.* Através do mecanismo termoiônico, quando a energia do elétron E_x ao longo do eixo x , é tal que $E_x \geq \phi_m$. Neste caso o mecanismo é conhecido como *efeito Poole-Frenkel* [30].
- ii.* Através do mecanismo de tunelamento, quando $E_x < \phi_m$, conhecido como

condução por saltos ("hopping").

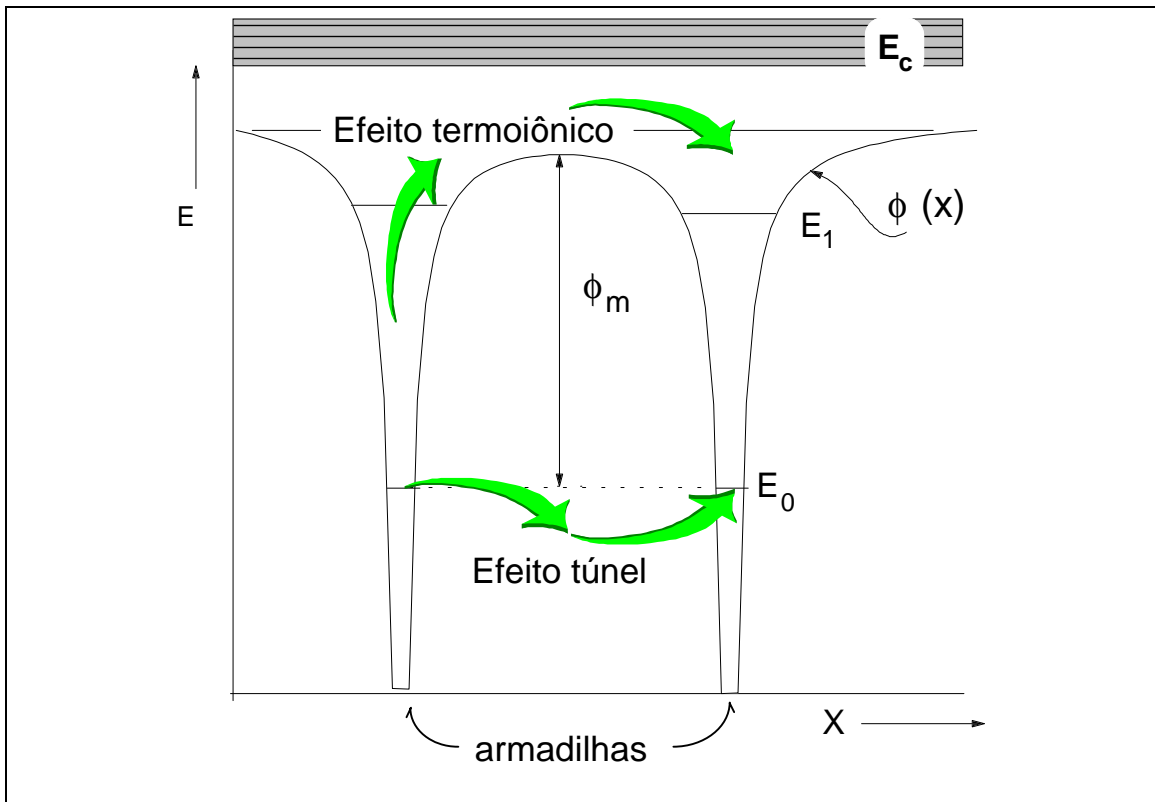


Figura II-9 - Diagrama de energia de um isolante com níveis de armadilhamento ("traps"). O efeito termoiônico corresponde à condução Poole-Frenkel e o efeito túnel à condução por saltos ("hopping").

Quando os centros de doadores são neutros e a quantidade de corrente é grande, um espaço de cargas é construído no isolante devido a:

- i. Elétrons da banda de condução, quando não existir armadilha.
- ii. Aos elétrons armadilhados, quando existirem armadilhas.

4.1 Densidade de carga no isolante.

Considerando um isolante contendo armadilhas rasas e níveis de doadores profundos e utilizando a estatística de Fermi-Dirac, dada pela Equação II-1, temos que a concentração dos doadores ionizados ($E_D \ll E_F$) é:

$$N_D^+ = N_D [1 - f_n(E_D)] \sim N_D \exp[(E_D - E_F)/k_B T], \quad \text{[II-22]}$$

e a concentração de doadores neutros é:

$$N_D^o = N_D f_n(E_D) \sim N_D. \quad \text{[II-23]}$$

A concentração de elétrons armadilhados (com $E_T > E_F$) é:

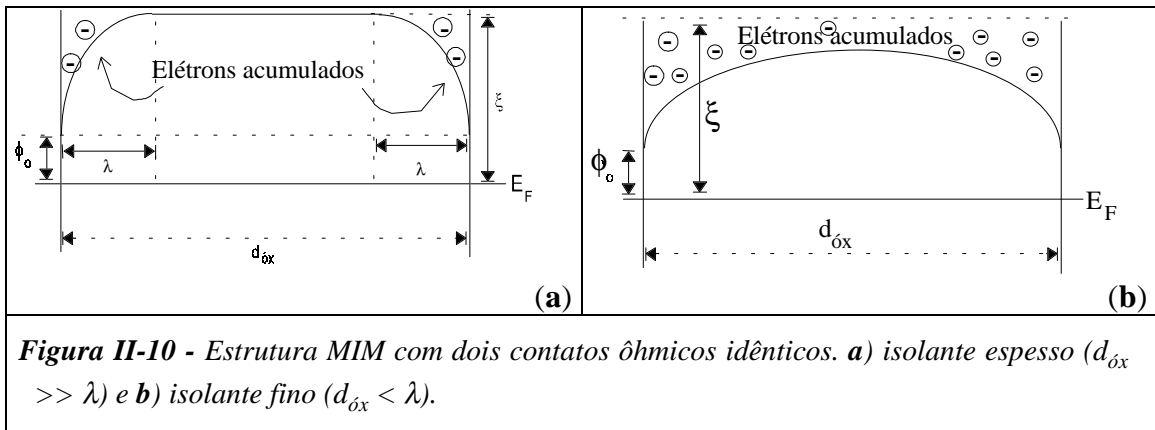
$$n_T^- = N_T f_n(E_T) \sim N_T \exp[(E_F - E_T)/k_B T], \quad \text{[II-24]}$$

e a concentração de elétrons livres no isolante é:

$$n = N_C \exp[(E_F - E_C)/k_B T]. \quad \text{[II-25]}$$

Para calcular estas concentrações, será necessário conhecer as posições de E_F e E_C . A diferença ($E_C - E_F$) pode depender (vide Figura II-10):

- Das propriedades do "bulk" do isolante quando o filme for espesso.
- Das propriedades da interface isolante-metal se o filme for fino.



Vamos a seguir apresentar as soluções [31] para os casos de isolante espesso e de isolante fino, com armadilhas e sem armadilhas, respectivamente.

4.1.1 Isolante espesso.

O isolante está em um estado de quase-equilíbrio e a quase-neutralidade deve ser satisfeita em todo o volume, então:

$$n + n_T^- = N_D . \quad [\text{II-26}]$$

A diferença entre $(E_C - E_F)$ dependerá dos valores relativos de n e n_T^- , que é dado pelo parâmetro θ , definido como:

$$\theta = \frac{n}{n_T^-} = \frac{N_C}{N_T} \exp \left[- \frac{E_C - E_T}{k_B T} \right] . \quad [\text{II-27}]$$

Será considerado que a presença de armadilhas só será sentida quando $\theta \ll 1$, o que acontece para uma densidade $N_T \gg N_C \exp [-(E_C - E_T)/k_B T]$.

a) Isolante sem armadilhas.

A Equação II-26 reduz a $n = N_D^+$. Portanto n e N_D^0 poderão ser calculados por:

$$n = (N_C N_D)^{1/2} \exp [-(E_C - E_D)/2k_B T] . \quad [\text{II-28}]$$

e

$$N_D^0 \cong N_D . \quad [\text{II-29}]$$

As equações acima foram obtidas eliminando E_F das equações.

b) Isolante com armadilhas.

A Equação II-26 fica reduzida a $n_T^- = N_D^+$ ($\theta \ll 1$), o que resulta em:

$$N_T^- = (N_T N_D)^{1/2} \exp \{ [(E_C - E_T) - (E_C - E_D)] / 2k_B T \} . \quad [\text{II-30}]$$

$$n = N_C (N_D / N_T)^{1/2} \exp \{ - [(E_C - E_T) + (E_C - E_D)] / 2k_B T \} . \quad [\text{II-31}]$$

4.1.2 Isolante fino.

Neste caso a diferença ($E_C - E_F$) é determinada pelo valor de ϕ_0 , veja Figura II-10, e teremos:

a) Isolante sem armadilhas.

$$n = N_C \exp[(E_F - E_C)/k_B T] . \quad [\text{II-32}]$$

$$N_D^0 \cong N_D . \quad [\text{II-33}]$$

b) Isolante com armadilhas.

$$n = N_C \exp[(E_F - E_C)/k_B T] . \quad [\text{II-34}]$$

$$n_T^- = N_T f_n(E_T) \sim N_T \exp[(E_F - E_T)/k_B T], \quad [\text{II-35}]$$

4.2 Expressão geral da corrente limitada pelo volume.

Na primeira parte calculamos a concentração eletrônica para diversos tipos de isolantes. Serão analisados agora, os diferentes mecanismos de condução. Existem duas possibilidades:

- a) O elétron tem energia suficiente para passar sobre a barreira de potencial que separa os dois sítios por efeito termoiônico. Os elétrons viajam pela banda de condução com mobilidade μ_e , a qual é dependente do espalhamento da rede. A densidade de

corrente J pode ser expressa como:

$$J = q n(x) \mu_e \mathcal{E}. \quad [\text{II-36}]$$

a concentração de elétrons $n(x)$ depende da altura da barreira entre os dois sítios e \mathcal{E} é o campo elétrico. A mobilidade μ_e depende fortemente do processo utilizado na fabricação do isolante e não tem um valor definitivo.

- b) O elétron tem energia E_x , inferior à barreira energética e transita entre sítios vizinhos através de efeito túnel. A corrente pode ser expressa por [10]:

$$J = (q^2 n^* D_T \mathcal{E}) / k_B T. \quad [\text{II-37}]$$

onde D_T é o coeficiente de difusão, que depende da frequência de saltos entre dois sítios, e n^* é a densidade de elétrons nos sítios.

Vamos definir agora, mais precisamente, os parâmetros da barreira de energia entre dois sítios e considerar os vários mecanismos do movimento do elétron. A energia potencial $\phi(x)$ para um elétron entre dois sítios, separados por uma distância \mathbf{a} , depende dos seguintes parâmetros:

- i.* Diferença energética entre os sítios de armadilhamento e a banda de condução, ϕ_s .
- ii.* Redução da energia potencial em virtude da interação coulombiana de um elétron, armadilhado em um sítio localizado em $x = 0$.
- iii.* Redução da energia potencial devido a um elétron armadilhado em $x = \mathbf{a}$.
- iv.* Campo elétrico \mathcal{E} .

Portanto, o potencial $\phi(x)$ dentro do dielétrico é dado por:

$$\phi(x) = \phi_S - q / (4\pi\epsilon_i x) - q / [4\pi\epsilon_i (a-x)] - \mathcal{E} x \quad [\text{II-38}]$$

sendo ϵ_i a permissividade dielétrica do SiO_2 , e q é a carga do elétron.

A altura da barreira é determinada impondo que:

$$d\phi(x)/dx = 0 \quad [\text{II-39}]$$

Assumindo que os dois sítios estão suficientemente distantes entre si, e que o máximo do potencial ($x = x_m$) está próximo de $x = 0$, ou seja, $x_m \ll a$, teremos:

$$x_m = (q / [4\pi\epsilon_i \mathcal{E}])^{1/2} \quad [\text{II-40}]$$

e a altura da barreira de potencial fica:

$$\phi_m = \phi_S - \Delta\phi = \phi_S - \beta_{\text{PF}} \mathcal{E}^{1/2} \quad [\text{II-41}]$$

sendo

$$\beta_{\text{PF}} = (q / \pi\epsilon_i)^{1/2} \quad [\text{II-42}]$$

Este cálculo é análogo ao da determinação da barreira Schottky, mas com um abaixamento de barreira duas vezes maior. A razão disto é que a variação da energia potencial com uma interação coulombiana é quatro vezes maior que com o efeito de força imagem.

A condição $x_m \ll a$ requer, para uma densidade de sítios N_S , que [31]:

$$\mathcal{E} \gg q N_S^{2/3} / (4\pi\epsilon_i) \quad [\text{II-43}]$$

ou

$$N_S \gg (4\pi\epsilon_i \mathcal{E} / q)^{3/2} \quad [\text{II-44}]$$

4.3 Efeito Poole-Frenkel.

Neste caso, o elétron tem energia suficiente para transitar sobre a barreira de potencial, que é dada pela Equação II-41. Para calcular a corrente, será utilizada a Equação II-36. O problema é determinar $n(x)$. Pode-se considerar os casos de filme fino ou espesso, com ou sem sítios de armadilhamento [1].

4.3.1 Isolante espesso sem sítios de armadilhamento.

A expressão de $n(x)$ é dada pela Equação II-28. A diferença ($E_C - E_D$) é igual a ($\phi_D - \Delta\phi$), veja Figura II-10, e a corrente é dada por [31]:

$$J = q (N_D / N_T)^{1/2} \mu \exp\{-\phi_D / 2k_B T\} \exp\{\beta_{PF} \mathcal{E}^{1/2} / 2k_B T\} \mathcal{E}. \quad [\text{II-45}]$$

4.3.2 Isolante espesso com sítios de armadilhamento.

A expressão de $n(x)$ é dada pela Equação II-31 com $E_C - E_T = \phi_T$ (a energia de um sítio de armadilhamento é neutro e a energia potencial não é abaixada) e $E_C - E_D = \phi_D - \Delta\phi$. A corrente pode ser representada como [31]:

$$J = q N_C (N_D / N_T)^{1/2} \mu \exp\{-(\phi_D + \phi_T) / 2k_B T\} \exp\{\beta_{PF} \mathcal{E}^{1/2} / 2k_B T\} \mathcal{E}. \quad [\text{II-46}]$$

4.3.3 Isolante fino com e sem sítios de armadilhamentos.

Neste caso $n(x)$ é dada pela Equação II-34, com $E_C - E_F = \phi_o$, sendo ϕ_o a altura da barreira de potencial. Consequentemente:

$$J = q N_C \mu \exp\{-\phi_o / 2k_B T\} \exp\{\beta_{PF} \mathcal{E}^{1/2} / 2k_B T\} \mathcal{E}. \quad [\text{II-47}]$$

4.3.4 Como a densidade de corrente varia com o campo elétrico.

Em todos os casos a quantidade $\ln(J/\mathcal{E})$ varia linearmente com $\mathcal{E}^{1/2}$. O coeficiente angular é igual a $\beta_{PF} / 2k_B T$ para um isolante espesso e $\beta_{PF} / k_B T$ para isolante fino. Podemos notar que a variação é similar ao observado no efeito termoiônico com coeficiente angular de $\beta_S / k_B T = \beta_{PF} / 2k_B T$ se supusermos que o valor de ϵ_i (permissividade dielétrica relativa) é igual para ambos os casos (altas ou baixas frequências). Assim é difícil distinguir entre o efeito de superfície (Schottky) e de volume (Poole-Frenkel).

4.4 Corrente de Hopping

Neste caso, a energia dos elétrons é inferior ao máximo da barreira de energia potencial existente entre dois sítios. Os elétrons ainda podem transitar através do efeito túnel. A corrente pode ser expressa pela Equação II-37. O coeficiente de difusão (D) associado a este mecanismo é dado por [1]:

$$D = \Gamma_S a^2 \quad [\text{II-48}]$$

onde Γ_S é a frequência média de saltos entre dois sítios separados por uma distância a . Um elétron localizado em um poço de potencial ocupa um nível de energia bem definido o qual se divide em dois se houver dois poços vizinhos. Um salto de um poço para outro é possível. A frequência de saltos é dada por [31]:

$$\Gamma_S = \exp\{-2m^* \phi_m a / \hbar\} / \tau_0 \quad [\text{II-49}]$$

onde m^* é a pseudo massa efetiva do elétron no isolante, ϕ_m é a altura da barreira de potencial local e τ_0 é uma constante temporal da ordem de 7×10^{-14} s.

A corrente correspondente é dada por [31]:

$$J = q^2 a^2 n^* \mathcal{E} \exp\{-2m^* \phi_m a / \hbar\} / (\tau_o k_B T) \quad [\text{II-50}]$$

Quando, no isolante, não existirem sítios de armadilhamento, $n^* = N_D$ e a condução é fracamente dependente da temperatura. Quando houver sítios de armadilhamento teremos $n^* = N^* \exp\{\phi^* / k_B T\}$, sendo N^* constante e ϕ^* a energia de ativação. Neste caso a condução é fortemente dependente da temperatura. Em todos os casos o valor de J é proporcional à polarização V .

4.5 Corrente limitada pelo espaço de carga.

Nas análises das correntes de Poole-Frenkel e Hopping foi feita a hipótese de que o campo elétrico era constante. Quando a injeção é intensa, esta hipótese perde a validade e a energia potencial deve ser determinada através da equação de Poisson:

$$d^2\phi / dx^2 = - \rho(x) / (\epsilon_i) = q N_D / (\epsilon_i) . \quad [\text{II-51}]$$

Vamos calcular a expressão da corrente em função do potencial aplicado V [31].

a) Injeção muito fraca.

Quando a injeção for muito fraca, a densidade de carga no isolante $\rho(x)$ é nula e o campo elétrico é constante. Este modo ôhmico é dominante enquanto o isolante for quase-neutro, isto é, enquanto todos os centros doadores não estiverem preenchidos. Portanto, a corrente poderá ser escrita como:

$$J = q n(x) \mu V / d_{ox} . \quad [\text{II-52}]$$

onde d_{ox} é a espessura do dielétrico e μ é a mobilidade do elétron no dielétrico.

b) Injeção Forte.

Durante a injeção forte os sítios de armadilhamento são preenchidos e aparece um espaço de cargas. A razão da densidade de elétrons livres e a densidade de sítios

preenchidos, aqui definida por θ , pode ser expressa como:

$$\theta = \left(\frac{N_C}{N_T} \right) \exp \left\{ - \frac{\phi_T}{k_B T} \right\}, \quad [\text{II-53}]$$

com N_T sendo a densidade de sítios de armadilhamento, N_C a densidade de estados na banda de condução, ϕ_T a diferença de energia entre a banda de condução e o nível dos sítios de armadilhamento. Deste modo, θ é independente de V .

A densidade de carga é igual a $\rho(x) = -q n_T^- = -q n(x) / \theta$ (n_T^- é a quantidade de elétrons armadilhados nos N_T sítios). Podemos agora integrar a equação de Poisson e utilizar a Equação II-36 para obter:

$$J = 9 \epsilon_i \mu \theta V^2 / [8 (d_{ox})^3]. \quad [\text{II-54}]$$

J varia quadraticamente com V (Lei de Child) [31]. Este comportamento é típico em condução pelo modo de espaço de cargas.

Para determinar o potencial de transição V_x entre a condução pelo modo de espaço de carga para o modo ôhmico, basta igualar as Equações II-52 com II-54 para $n = n_o$, que é a densidade de elétrons livres no volume do isolante no equilíbrio. Isto resulta em:

$$V_x = 8 q n_o d_{ox}^2 / (9 \epsilon_i \theta). \quad [\text{II-55}]$$

c) Injeção muito forte.

Quando os sítios de armadilhamento estiverem totalmente preenchidos, o espaço de carga é devido a uma condução de elétrons com uma densidade de carga $\rho(x) = -q n(x)$.

$$J = 9 \epsilon_i \mu V^2 / [8 (d_{ox})^3]. \quad [\text{II-56}]$$

Integrando a equação de Poisson com $\rho(x) = -q N_T$, podemos determinar V_{TFL} , definido como o limite entre a injeção forte e a injeção muito forte que é o limite de

preenchimento dos sítios de armadilhamento. Teremos:

$$V_{TFL} = q N_T d_{ox}^2 / (2\epsilon_i) . \quad [II-57]$$

A Figura II-11 apresenta as regiões de uma curva característica de $J(V)$ de um isolante. Podemos notar a descontinuidade para $V = V_{TFL}$. No modo de injeção forte, o potencial atinge V_{TFL} , os sítios são saturados gradualmente o que pode significar que o nível de Fermi fica próximo da base da banda de condução. Isto resulta num aumento no número de elétrons livres, explicando assim o aumento de corrente para $V = V_{TFL}$.

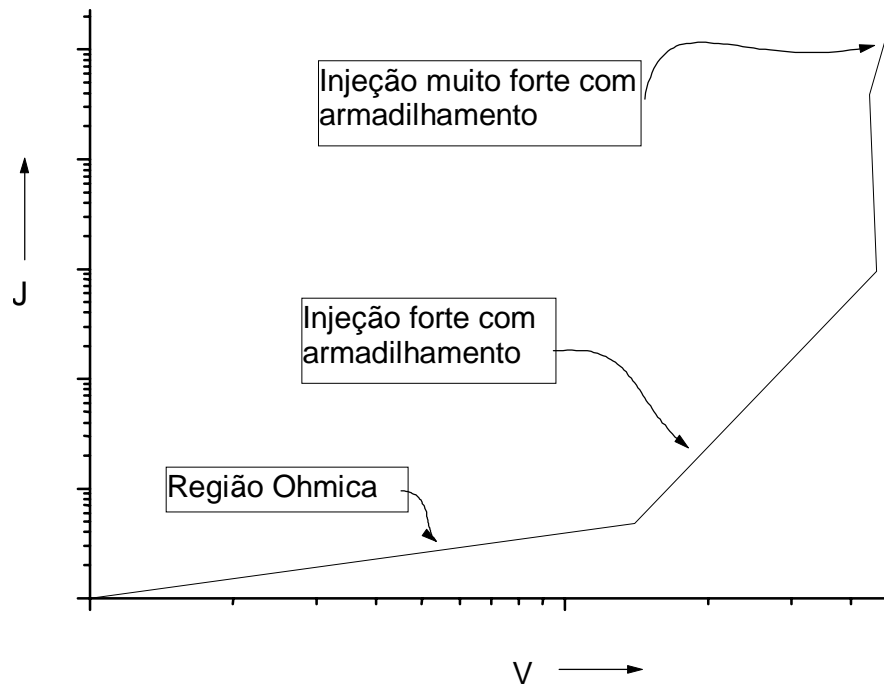


Figura II-11: Variação de $\ln(J)$ com V no caso de corrente limitada por espaço de carga.

Tabela II-2: *Sumário dos vários modos de condução em filmes de isolantes.*

Origem dos elétrons de condução	Natureza dos contatos	Magnitude da densidade eletrônica no isolante	Energia do elétron no isolante	Natureza do modo de condução	Condições de observação
Intrínseco	Não importa	Baixo e independente da injeção	$E > \phi_m$	Limitado pelo volume e Ôhmico	Isolantes espessos e baixa injeção
Extrínseco	Ôhmico ou "Mott-Gurney"	Significativo	$E > \phi_m$	Limitado pelo volume e "Poole-Frenkel"	Presença de elétrons armadilhados no isolante
		Significativo	$E < \phi_m$	Limitado pelo volume e por salto	Presença de elétrons armadilhados no isolante
		Muito elevado	$E > \phi_m$	Limitado pelo volume e por espaço de carga	Injeção intensa
	Bloqueado ou Schottky		$E > \phi_m$	Limitado pelo eletrodo, termoiônico ou Schottky	Alta temperatura e elevado campo elétrico
			$E < \phi_m$	Limitado pelo eletrodo ou Túnel	Baixa temperatura e filmes extremamente finos (≈ 15 nm)

5. Como reconhecer experimentalmente o tipo de condução.

<i>Tabela II.3 - Tipos de condução e o comportamento funcional das mesmas</i>		
TIPOS DE CONDUÇÃO	I (V)	I (T)
TERMOIÔNICO	$I \propto \alpha e^{(\beta \cdot V^{1/2})}$	$I \propto T^2 e^{-\left(\frac{cte0}{T}\right)}$
TÚNEL CLÁSSICO	$I \propto V$, para $V < \phi_0$	Nenhuma
FOWLER-NORDHEIN	$I \propto V^2 \cdot e^{-\frac{cte1}{V}}$, para $V > \phi_0$	$I \propto \frac{cte2 \cdot T}{\text{sen}(cte2 \cdot T)}$
SUPERFÍCIE DE CARGAS	$I \propto V^2$	$I \propto \mu$, a mobilidade do elétron no dielétrico

6. Comentários finais.

Neste capítulo foram apresentados os diferentes mecanismos possíveis de condução em um dielétrico, que foram divididos em duas categorias com objetivo didático. No entanto, esta divisão é apenas didática: em um capacitor real, na maior parte das vezes, existe uma coexistência de mais de um tipo de mecanismo condução. Para exemplificar, o capacitor MOS ao ser submetido a uma rampa de potencial, possui três mecanismos básicos de condução: deslocamento, tunelamento clássico e F-N. Em campos baixos o mecanismo de deslocamento domina, em campos médios e altos o mecanismo de F-N é que domina, e em capacitores com d_{ox} muito pequenos (<5 nm) o tunelamento clássico é o mecanismo dominante.

Durante o evento da ruptura total do dielétrico o valor da corrente que flui através do dielétrico é fundamental, pois ela fará com que a ruptura térmica ocorra, por efeito Joule, destruindo totalmente o dielétrico. Na ruptura térmica há uma enorme

quantidade de energia dissipada que faz com que haja a fusão dos três materiais: metal, óxido e silício. Para que isto ocorra é necessário uma grande quantidade de corrente fluindo pelo capacitor e esta corrente não pode ser atribuída somente aos três mecanismos já mencionados. Muito provavelmente, o que ocorre em um capacitor, momentos antes da ruptura do dielétrico, é o aparecimento de um quarto mecanismo de condução, que é limitado pelo volume do dielétrico, e que aparece devido à criação de defeitos nas interfaces e dentro do volume do dielétrico durante a aplicação de um potencial no eletrodo de porta do capacitor. No capítulo seguinte serão discutidos alguns mecanismos de ruptura de dielétricos existentes.

7. Bibliografia

- 1 VAPAILLE, A. and BORBOTTIN, G. Instabilities in Silicon Devices, North Holland, Amsterdam (1986)
- 2 SZE, S.M. Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, New York (1981).
- 3 SIMMONS, J.G. J. Appl. Phys., Vol.34(6), p.1793 (1963).
- 4 LENZLINGER, M.; SNOW, E.H. J. Appl. Phys., Vol.40(1), p.278 (1969).
- 5 LILLY, A.C.; MCDOWELL, J.R. J. Appl. Phys., Vol.39(1), p.141 (1968).
- 6 HARTMAN, T.E; BLAIR, J.C.; BAUER, R. J. Appl. Phys., Vol.37(6), p.2468 (1966).
- 7 PULFREY, D.L.; WILCOX, P.S.; YOUNG, L. J. Appl. Phys., Vol.40(10), p.3891 (1969).
- 8 LAMPERT, M.A. Phys. Rev., Vol.103(15), p.1648 (1956).
- 9 LILLY, A.C.; LOWITZ, D.A. J. Appl. Phys., Vol.39(9), p.4360 (1968).
- 10 BÖTTGER, H.; BRYKSIN, V.V. Phys. Stat. Sol. B, Vol.78(1-2), p.9 (1976).
- 11 HARARI, E. J. Appl. Phys., Vol.49, p.2478 (1978).

- 12 WOLTERS, D.R. Growth, Conduction, Trapping and Breakdown of SiO₂ Layers on Silicon, (Tese de Doutorado) IMEC - Eindhoven, Netherlands, 1988.
- 13 SCHULMAN, J.N.; MCGILL, T.C Phys. Rev. Lett., Vol. 39, p.1680 (1977).
- 14 CARUTHERS, E; LIN-CHUNG, P.J. Phys. Rev. B, Vol. 17, p.2705 (1978).
- 15 KITTEL, C. Introducción a la física del estado sólido, Reverté, S.A, Espanha (1976).
- 16 BALASINGAM, P.; ROYCHOWDHURY, V.P Nanoelectronic Functional Devices, Technical Reports, TR-EE 94-24, School of Electrical Engineering, Purdue University, July (1994).
- 17 O'SHEA, S.J; et al. J. Vac. Sci. Technol. B, Vol.13, p.1945 (1995).
- 18 SIMMONS, J.G. Phys. Rev. Lett., Vol. 15, p.967 (1965).
- 19 LEWICKI, G.; MASERJIAN, J. J. Appl. Phys., Vol.46(7), p.3032 (1975).
- 20 ZAFAR, S.; LIU, Q.; IRENE, E.A. J. Vac. Sci. Technol. A, Vol.13(1), p.47 (1995).
- 21 BERGLUND, C.M.; POWER, R. J. J. Appl. Phys., Vol.42, p.573 (1971).
- 22 LANDAU, L.D; LIFSHITZ, E. Física teórica, Vol. 3.1, p.214, Mir, Moscou (1974).
- 23 FOWLER, R.H; NORDHEIN, L.W Proc. Roy. Soc. (London), A119, p.173 (1923).
- 24 STRATTON, R. J. Phys. Chem. Sol., Vol.23, p.1177 (1962).
- 25 NICOLIAN, E.H.; BREWS, J.R. MOS Physics and Technology, John Wiley & Sons, New York (1982).
- 26 WILLIAMS, R. Phys. Rev., Vol.140, A569 (1965).
- 27 DiMARIA, D.J. The Physics of SiO₂ and its Interface, Chap. 4, p.160, Pergamon, New York (1978).
- 28 NICOLLIAN, E.H.; GOETZBERGER, A.; BERGLUND, C.N. Appl. Phys. Lett., Vol. 15, p.174 (1969).
- 29 NICOLLIAN, E.H.; BERGLUND, C.N.; SCHIMIDT, P.F.; ANDREWS, J.M. J. Appl. Phys., Vol.42, p.5654 (1971).

- 30 FRENKEL, J. Phys. Rev., Vol.54, p.647 (1938).
- 31 CASTAGNE, R.; HESTO P.; VAPAILLE, A. Thin Solid Film, Vol.17, p.253 (1973).

Capítulo III

Possíveis Mecanismos de Ruptura de Dielétricos

1. Introdução.

A interação do dielétrico com o campo elétrico, aplicado externamente, é sempre no sentido de anular o campo no interior do dielétrico. Este fenômeno está associado ao princípio da minimização da energia do sistema. A eficiência com que o dielétrico minimizará o campo elétrico \mathcal{E} no seu interior dependerá do valor de sua permissividade dielétrica (ϵ).

A permissividade dielétrica é uma grandeza macroscópica que dá informação da capacidade de rearranjo espacial do dipolo elétrico das moléculas ou das ligações (para redes) em resposta a um campo elétrico aplicado externamente. Microscopicamente, esta resposta pode vir na forma de uma rotação do dipolo de forma a minimizar o campo elétrico resultante local Figura III-1 ou pode vir como uma deformação da distribuição das órbitas eletrônicas, resultando em uma diminuição da intensidade do dipolo elétrico. Cada material tem uma capacidade diferente de resposta a um campo elétrico aplicado externamente. Alguns têm pouca capacidade de opor resistência, como os gases (ou vácuo), outros têm uma alta capacidade de rearranjo, como os metais. O valor de ϵ vai de ϵ_0 , para o vácuo, até infinito, que é o valor correspondente ao de um condutor perfeito.

Ainda que os átomos sejam bastante rígidos com respeito às forças elétricas, existe um ligeiro deslocamento líquido dos centros de cargas, através da deformação da

coroa eletrônica, resultando na indução de um momento dipolar. Neste caso, as órbitas dos elétrons se deformam Figura III-1a fazendo com que o centro de gravidade das cargas negativas não coincida mais com o das cargas positivas. Esta configuração neutra de cargas é equivalente, em primeira aproximação, a um pequeno dipolo. Para campos elétricos pequenos, a magnitude do deslocamento, ou momento dipolar, é proporcional ao campo elétrico. O deslocamento da distribuição de elétrons, que produz esta classe de dipolo induzido, é conhecida como polarização eletrônica [1]. Para se ter uma idéia, ao serem submetidos a um campo de 10^4 V/cm, este deslocamento entre os centros de carga negativa e positiva no átomo, o enxofre (S_{16}) tem um deslocamento de 3×10^{-6} Å, enquanto que no iodo (I_{53}) é de 10^{-6} Å.

Existem materiais que são formados por moléculas com polarização intrínseca p_0 , como é o caso da molécula de água ou dos eletretos. Na ausência de campo elétrico a orientação dos dipolos é aleatória. Assim, o momento dipolo macroscópico é nulo, vide Figura III-1b. Quando é aplicado um campo elétrico neste tipo de material, ocorrem dois fenômenos:

- i.* indução de um momento de dipolo (polarização eletrônica) devido ao efeito do campo elétrico sobre a distribuição de elétrons e,
- ii.* alinhamento dos dipolos intrínsecos, p_0 , produzindo um momento de dipolo resultante por unidade de volume.

Se todos os dipolos permanentes de um material se alinhassem, haveria uma polarização macroscópica muito grande, mas isto não ocorre. Em temperaturas e campos convencionais, as colisões das moléculas impedem um alinhamento maior. Existe um certo alinhamento resultante e, portanto, uma polarização.

O campo elétrico resultante que atua em uma molécula, ou átomo, é devido ao campo elétrico aplicado externamente mais o campo devido aos dipolos induzidos em todas as outras moléculas vizinhas.

É interessante notar que o campo elétrico, em escala microscópica, é bastante intenso próximo ao núcleo atômico e relativamente pequeno entre os átomos.

Quando analisamos macroscopicamente o campo elétrico dentro de um dielétrico, ou quando há a coexistência de vários dielétricos em um sistema, as deformações e alinhamentos dos átomos e moléculas são tratados pela seguinte equação:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} . \quad [\text{III-1}]$$

A permissividade dielétrica ϵ corresponde a facilidade com que o campo elétrico desloca os centros de cargas ou alinha os dipolos intrínsecos, ou seja, depende do tipo de átomos que constitui o material.

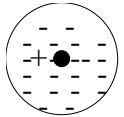
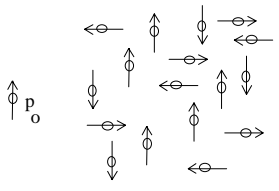
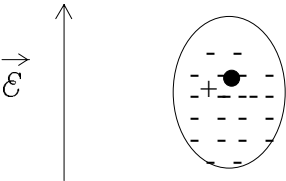
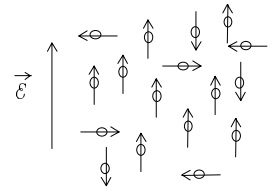
	POLARIZAÇÃO ELETRÔNICA	ALINHAMENTO DOS DIPOLOS INTRÍNSECOS	
$ \vec{E} = 0$			(a)
$ \vec{E} > 0$			(b)

Figura III-1: Indução de um momento dipolo em um átomo e alinhamento dos dipolos, associados a moléculas e ligações, devido à aplicação de um campo elétrico externo \vec{E} .

Um comentário interessante a ser feito a respeito da Equação III-1 é que ela é apenas uma boa aproximação para descrever uma propriedade da matéria. Mas a matéria é extremamente complicada e esta equação não é rigorosamente correta [1]. Por exemplo, se

o módulo de \vec{E} for muito grande, a Equação III-1 deixa de ser correta.

O limite de deformação da distribuição eletrônica está associado à rigidez dielétrica do material. A rigidez dielétrica é uma grandeza macroscópica com dimensão de campo elétrico, que dá a informação da intensidade do campo elétrico que um dado material suporta. Conforme o campo elétrico aplicado externamente vai aumentando, a distribuição das cargas ao redor da molécula, ou ligação, vai sofrendo uma crescente deformação. Esta deformação tem um limite, e quando este limite de deformação é atingido, a ligação é rompida e um ou vários elétrons são liberados.

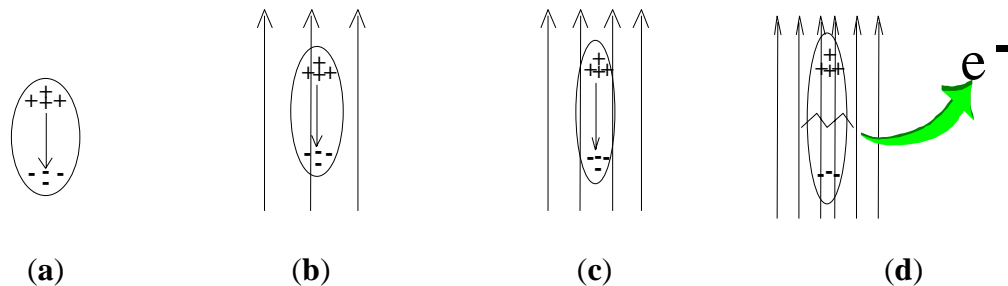


Figura III-2: Deformação da distribuição de carga de uma molécula resultante de campos elétricos aplicados externamente. As figuras de **a** até **d** mostram uma seqüência de campos elétricos crescentes até atingir o campo de ruptura, que ioniza a molécula.

O mecanismo de ruptura intrínseca, por definição, é aquele que depende apenas dos parâmetros intrínsecos do material, tais como energia de ligação, parâmetro de rede, etc..

Quando outros fatores participam do processo de ruptura, tais como impurezas, precipitados, defeitos estruturais e elétricos, o mecanismo é conhecido como ruptura extrínseca. Atualmente, estes defeitos são os principais responsáveis pela ruptura dos dielétricos pois, apesar do grande avanço atingido nas técnicas de limpeza e de purificação de materiais, as impurezas ainda estão presentes em quantidades tão ínfimas, que podem não ser mais detectáveis, mas que têm efeitos no desempenho dos dispositivos microeletrônicos, principalmente no campo de ruptura dos dielétricos.

A ruptura intrínseca, quando comparada com a ruptura extrínseca, no sentido restrito,

carece de sentido pois a ruptura intrínseca supõe uma estrutura ideal. Mas quando é observada a rede de SiO_2 pode-se constatar sua estrutura amorfa, assim como a presença de átomos de oxigênio e de silício intersticiais, sem contar as ligações livres ("dangling bonds") necessariamente existentes em estruturas amorfas. Quando as interfaces são levadas em consideração, há o aparecimento de mais defeitos, e portanto, mais longe da estrutura idealizada. Nas interfaces do dielétrico existem rugosidades estruturais, existem tensões mecânicas resultante do casamento de duas estruturas diferentes: silício cristalino com óxido amorfo, existem aí também as ligações livres. Além do que já foi dito neste parágrafo, é importante lembrar que os filmes de SiO_2 são extremamente finos, algumas dezenas de monocamadas, sendo os efeitos elétricos dos defeitos todos de primeira ordem. Todos estes defeitos, citados anteriormente, estão tão intimamente ligados à rede de SiO_2 que pode-se dizer que são intrínsecos.

Von Hippel 1937 [2] e Frölich 1937 [3] foram os primeiros a tentar resolver o problema da ruptura em dielétricos utilizando o mecanismo de avalanche e, até hoje, este mecanismo é considerado por alguns autores, tais como DiStefano [4,5] e Klein [6]. Paralelamente foram considerados outros mecanismos, como o proposto por Budenstein [7] e posteriormente modificado por Wolters [8], baseado em erosão do dielétrico através de alta injeção de corrente e elevados campos elétricos.

Atualmente, os mecanismos desenvolvidos têm como elementos principais a alta injeção de elétrons no dielétrico e altos campos elétricos.

2. Caracterização empírica da ruptura.

Falster [9] fez uma classificação empírica dos modos de ruptura correlacionando parâmetros estatísticos, com defeitos encontrados em capacitores MOS.

- a) Modo I: de zero a 8 MV/cm. Associado com contaminações de metais de transição.

- b) Modo II: de 8 a 12 MV/cm. É obtido apenas com capacitores com áreas menores que 10^{-5} cm² [9], daí o seu caráter extremamente localizado. Tem alguma relação com rugosidades na interface Si-SiO₂ e concentração de oxigênio no substrato de silício. Está associado com um recozimento pós-metalização inadequado.
- c) Modo III: maior que 12 MV/cm. Conhecido também como modo intrínseco e está associada às imperfeições intrínsecas do material dielétrico. Tem um caráter aleatório.

É interessante observar que o trabalho realizado por Falster é um trabalho dedutivo, que parte de geral, que são os parâmetros estatísticos, e a partir daí faz inferências do particular, que seria um capacitor com contaminação metálica, por exemplo. Por outro lado, o trabalho desenvolvido por nós já tem um caráter *indutivo*, ou seja, parte de efeitos de alguns defeitos elementares, inseridos em um capacitor-ideal, e faz inferência de como seria o efeito se houvesse uma concentração de defeitos, ou defeitos maiores, ou então defeitos de outra categoria.

3. Resumo dos modelos fundamentados no processo de avalanche.

Os princípios básicos dos modelos dos mecanismos de avalanche baseiam-se nos modelos de Stratton, DiStefanos e Shatzkes.

3.1 Modelo de Stratton.

Stratton resumiu a ruptura em sólidos por meio do mecanismo de *multiplicação de elétrons* [10] da seguinte forma:

"Quando um elevado campo elétrico é aplicado a um dielétrico sólido, uma certa quantidade de trabalho é realizado sobre os portadores de corrente - usualmente elétrons

livres¹ - os quais, por sua vez, transferem parte desta energia para a rede, aumentando assim a temperatura, i.e., provocando aquecimento por efeito Joule. É possível também que o número de elétrons livres seja aumentado² devido à aplicação do campo elétrico que irá incrementar a energia transferida para a rede. A ruptura do dielétrico ocorre quando a temperatura T_o atinge um valor crítico T_o^* ocorrendo então uma mudança permanente na rede. O número de diferentes teorias de rupturas de dielétricos tem aumentado devido às diferentes condições que podem governar a transferência de energia do campo elétrico para a rede, via portadores de corrente. Para campos que excedem um campo crítico, um estado não estacionário ocorrerá. Neste contexto, a corrente aumentará continuamente em função do tempo. Isto causará um aumento decisivo de temperatura em algum ponto, excedendo o valor T_o^* , quando então, uma ruptura irreversível terá início. No caso de ruptura intrínseca, é assumido que a distribuição de elétrons depende diretamente do campo elétrico aplicado \mathcal{E} . O número total de elétrons também pode aumentar, devido à aplicação de \mathcal{E} , causando ionização por colisão e emissão por campo. Então a condutividade e a taxa com a qual os elétrons fornecem energia para a rede são necessariamente funções explícitas do campo elétrico. Portanto, o problema básico da ruptura intrínseca é o cálculo do número de elétrons livres e a sua distribuição em energia e momento, quando é aplicado um campo elétrico."

¹ os elétrons livres, presentes dentro deste dielétrico, poderão advir tanto dos elétrons intrínsecos do dielétrico, que tem uma densidade muito pequena, como podem ser injetados pelo catodo.

²o aumento de elétrons com o aumento do campo elétrico pode significar tanto mais elétrons ejetados pelo catodo, como mais colisão com a rede de sílica e maior número de elétrons ionizados...

3.2 Modelo de DiStefano e Shatzkes

DiStefano [4] supõe uma estrutura em estado de equilíbrio termodinâmico em que há ionização por impacto e a recombinação é utilizada para determinar as características J-V do filme de SiO₂. A ruptura ocorrerá no limiar da resistência negativa, onde $dV/dJ=0$.

- i.* Há uma forte injeção de elétrons do catodo para o SiO₂, através do mecanismo de Fowler-Nordheim.
- ii.* O elétron injetado ganha energia do campo elétrico e a perde para a rede de SiO₂, primariamente por emissão de fônons.
- iii.* Em cada evento de emissão de fônon o elétron perde uma quantidade de energia de 0,153 eV.
- iv.* Assume se uma distribuição de Poisson para o espalhamento por elétron-fônon, no qual a probabilidade de emissão é de $1/\lambda$, por unidade de comprimento na direção normal à superfície dos eletrodos, sendo que λ independe da energia.
- v.* A distribuição de Poisson impõe que a energia do elétron dependerá da distância do catodo

4. Resumo dos modelos fundamentados em regiões fracas ("weak spots").

Os modelos baseados em regiões fracas são bastante promissores pois quando o dielétrico é analisado, localmente, pode-se constatar que ele sempre apresentará inomogeneidades, sendo que em última análise apresentará inomogeneidade em escala atômica, já que ele possui uma rede amorfa (rede vítrea). Um outro elemento que mostra a força destes modelos de regiões fracas é a melhoria das qualidades elétricas,

mais particularmente o do campo de ruptura, com a eliminação de defeitos estruturais, químicos e elétricos, ou seja, com a eliminação das regiões fracas.

Por outro lado, regiões fracas sempre existirão no filme de SiO₂-amorfo, com espessura de algumas dezenas de monocamadas, pois além dos defeitos intrinsecamente existentes nas redes amorfas, existem também os defeitos das interfaces do SiO₂ com Al e Si.

4.1 Modelo de Budenstein

No modelo de Budenstein [7] a alta condutância do dielétrico durante o processo de ruptura é associada ao desenvolvimento de canais gasosos através do dielétrico.

- i.* Há um período formativo durante o qual a energia é adicionada ao dielétrico pela ação do campo externo.
- ii.* A energia é armazenada através de rearranjo local das cargas do dielétrico através de polarização, ionização por colisão, criação de sítios de armadilhamento e deslocamento atômico.
- iii.* O resultado é o desequilíbrio localizado de carga e a quebra da ligação Si-O e a formação de microplasma.
- iv.* O plasma se expande pelo dielétrico na forma de árvore, criando passagens com elevada condutividade dentro do dielétrico, que se originam dos locais onde o campo elétrico local é maior, tais como em irregularidades do dielétrico, concentração de cargas superficiais, eletrodos com pontas.
- v.* Assume-se que o excesso de carga local é suficientemente elevado para modificar a estrutura de bandas de energia, possibilitando a existência de átomos em estados energéticos não ligados, e com esses átomos o sistema de plasma em árvore cresce rapidamente.
- vi.* O estágio final da condução ocorre quando o sistema

de plasma em árvore cruza todo o dielétrico, curto-circuitando o anodo com o catodo, e descarregando o dielétrico. A violência desta descarga, que ocorre rapidamente, alarga as passagens criadas pelo sistema de plasma e há uma forte emissão de luz.

4.2 Model de Harari

Harari foi um dos pioneiros a propor modelos de ruptura baseados em criação de sítios de armadilhamentos de elétrons [11,12]. Seus primeiros trabalhos nesta área já sugeriam que a carga de ruptura era um dos parâmetros fundamentais no mecanismo de ruptura em dielétricos. O mecanismo proposto por Harari pode ser resumido da seguinte forma:

- i) capacitor é polarizado de forma a obter alta injeção de corrente e altos campos.
- ii) há a criação de defeitos nas vizinhanças da interface injetora, catodo, de forma que eles funcionem como sítios de armadilhamentos de elétrons.
- iii) estes defeitos vão aumentando de densidade, e com isso há um aumento do campo elétrico local.
- iv) haverá um sítio onde a concentração de campos elétricos locais excederá um valor crítico, que é de 30 MV/cm [13], e ionizará a ligação Si-O, iniciando o processo de ruptura irreversível.

O modelo de Harari é um esboço de uma solução para o mecanismo de ruptura de dielétrico, pois o que ocorre após a ruptura local não é descrito.

4.3 Modelo de carga de ruptura.

Wolters, ao longo de alguns anos, propôs vários modelos de ruptura de dielétricos, um dos quais bastante engenhoso, que supõe a criação de microplasma [14], que é uma variante

do modelo de Budenstein [7]. Para um maior aprofundamento nos trabalhos de Wolters as referências [8,15] podem ser consultadas, sendo a referência [8] praticamente um sumário de seus trabalhos.

Foi observado por vários autores [12,16] a importância das cargas injetadas na degradação do dielétrico, bem como a relação da ruptura do dielétrico com uma quantidade de carga crítica (Q_R) a ser injetada. O efeito da passagem destas cargas pelo dielétrico se relaciona com um aspecto macroscópico, que é a formação de uma passagem de baixa impedância pelo óxido que permitirá a descarga abrupta da energia armazenada no capacitor ($CV^2/2$), descarga esta que é o evento da ruptura. A criação destas passagens é atribuída à energia dissipada pelos elétrons ao passarem da banda de condução do SiO_2 para o anodo, dando um salto energético igual à barreira de potencial existente nesta interface. Este salto é dado às custas da emissão de um fóton, com energia entre 3 eV a 4 eV, que corresponde a um comprimento de onda de DeBröglie dez vezes maior do que a espessura do dielétrico. Portanto, qualquer uma das interfaces poderá absorver esta energia e criar defeitos na rede de SiO_2 , que se manifestarão como sítios de armadilhamentos nas interfaces. A formação da passagem de baixa impedância é descrita em cinco etapas:

- i. Quando o fóton for absorvido pelo catodo, a rede de SiO_2 pode ter suas ligações quebradas em uma região de 1 nm a 2 nm do catodo. Os níveis energéticos gerados por estes danos podem ser observados por tunelamentos através destes sítios.
- ii. Quando os danos criados distarem mais que 3 nm do catodo, os níveis correspondentes poderão ser preenchidos permanentemente e irão formar uma região de cargas espaciais negativas, que inibirá a injeção de mais elétrons.
- iii. Quando o defeito criado for no anodo, o defeito poderá ser um centro de doadores, que poderá estar carregado positivamente. Este centro, carregado positivamente, atrairá os elétrons injetados no dielétrico que

estiverem nas suas vizinhanças, os quais irão dissipar suas energias nestas vizinhanças. Isto confinará a destruição da rede às vizinhanças dos defeitos iniciais. Esta região irá evoluir em direção ao interior do dielétrico, criando um sistema de canais, a qual atrairá mais elétrons e assim por diante. Se esta região se estender por mais de 3 nm do anodo, poderão ser formadas cargas fixas positivas. As cargas armazenadas no capacitor poderão ser transportadas entre os dois eletrodos se houver sítios suficientes de armadilhamento no dielétrico.

- iv. Transporte de cargas, via canal, até locais mais profundos no dielétrico causará perdas em altas frequências. Se o canal aumenta em comprimento, a frequência de ressonância irá diminuir. Estados lentos serão criados. Os canais mais longos irão atrair mais eficientemente os elétrons devido às suas pontas positivamente carregadas e isto confinará mais ainda a dissipação de energia e a degradação do dielétrico.
- v. Quando o canal, que contém um grande número de estados, evoluir mais para dentro do dielétrico a sua quantidade de carga poderá aumentar em presença de um campo elétrico elevado. O campo elétrico é particularmente grande quando o canal estiver próximo ao eletrodo oposto. O nível de saturação das armadilhas se torna dependente do campo elétrico e da região de cargas espaciais do dielétrico, que não pode ser rapidamente mudada, causando um efeito de histerese.
- vi. Finalmente o canal atinge uma distância do catodo em que o tunelamento entre o canal e o catodo torna-se significativo e a energia armazenada, $CV^2/2$, será abruptamente descarregada. Este processo adiabático rápido irá fundir uma região do capacitor.

Esta descrição macroscópica simples poderá resultar na liberação de luz, como observado em alguns trabalhos, e que até agora não foi explicado [17, 18, 19,20].

Neste trabalho Wolters tenta uma variação do trabalho do Harari, acrescentando a criação das cargas fixas no volume do dielétrico, que irão evoluindo do anodo para a direção do catodo, até que uma passagem (ou canal) seja estabelecida e toda a carga armazenada seja descarregada através desta passagem. A outra inovação é a proposta do estabelecimento de uma carga crítica (carga de ruptura) necessária para que ocorra a ruptura. Esta idéia já estava esboçada na teoria de Harari mas não foi desenvolvida.

5. Bibliografia

- 1 FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.B.; SANDS, M. The Feynman Lectures on Physics, Vol.2, Addison-Wesley Publishing Company (1987).
- 2 VON HIPPEL, A. J. Appl. Phys., Vol.8, p.815 (1937).
- 3 FROLICH, H. Proc. Roy. Soc., Vol. A160, p.230 (1937).
- 4 DiSTEFANO, T.H; SHATZKES, M. Appl. Phys. Lett., Vol. 25, p.685 (1974).
- 5 DiSTEFANO, T.H; SHATZKES, M. J. Vac. Sci. Technol., Vol. 13, p.50-4 (1976).
- 6 KLEIN, N. J. Electrochem. Soc., Vol.116, p.963 (1969).
- 7 BUDENSTEIN, P. Proc. IEEE, Vol.15, p.225 (1980).
- 8 WOLTERS, D.R. Growth, Conduction, Trapping and Breakdown of SiO₂ layers on Silicon, (Tese de Doutorado) Eindhoven, Netherlands, 1988. (Doutorado).
- 9 FALSTER, R. J. Appl. Phys., Vol. 66(7), p.3355 (1989).
- 10 STRATTON, R. The Theory of Delectric Breakdown in Solids. Progress in Dielectrics, Vol.3, John Wiley and Sons, New York, p.233 (1961).
- 11 HARARI, E Appl. Phys. Lett., Vol.30, p.601 (1977).
- 12 HARARI, E. J. Appl. Phys., Vol.49, p.2478 (1978).

- 13 FERRY, D.K. Solid State Comm., Vol.18, p.1051 (1976).
- 14 VAPAILLE, A. e BORBOTTIN, G. in Instabilities in Silicon Devices, eds. VAPAILLE, A. and BORBOTTIN, G., North Holland, Amsterdam (1986).
- 15 WOLTERS, D.R.; VERWEY, J.F. in Instabilities in Silicon Devices, eds. VAPAILLE, A. and BORBOTTIN, G. Ed. North Holland, Amsterdam (1986).
- 16 WOLTERS, D.R.; VERWEY, J.F. in Springer Series in Electrophysics, eds. SCHULZ, M; PENSL, G. p.180 (1981).
- 17 NISSAN-COHE, Y. et al. J. Appl. Phys., Vol. 57, p.2830 (1985).
- 18 NISSAN-COHE, Y. et al. J. Appl. Phys., Vol. 58, p.2252 (1985).
- 19 FISHETTI, M.V. et al. J. Appl. Phys., Vol. 57, p.418 (1985).
- 20 FISHETTI, M.V. J. Appl. Phys., Vol. 57, p.2860 (1985).

Capítulo IV

Modelamento de Rugosidades

1. Introdução.

A demanda contínua de aumento de velocidade e de densidade de dispositivos para os circuitos integrados microeletrônicos conduz a um intenso esforço de miniaturização. A previsão da espessura dos filmes de óxido de porta, para transístores MOS de efeito de campo (MOSFETs), é para ser da ordem de 5 nm e os chips para armazenarem uma quantidade de 5 bilhões de portas [1], até o ano de 2004. Em estruturas com filmes de SiO₂ destas espessuras, rugosidades interfaciais da ordem de nanômetros passam a ser uma fração significativa da região eletricamente ativa do dispositivo. A rugosidade pode resultar em efeitos detrimenais na mobilidade dos portadores de carga e em incremento do campo elétrico local causando uma ruptura do dielétrico [2-9]. Conseqüentemente, o rendimento e o desempenho desta nova geração de dispositivos requer um rigoroso controle da qualidade das superfícies e interfaces do filme de SiO₂. Para tanto, é necessário quantificar a rugosidade, o que não é uma tarefa simples, como será visto a seguir.

A rugosidade atualmente tem sido muito citada e comentada na literatura científica. Na maior parte das vezes ela é colocada como a vilã da estória: é a responsável pelo mau rendimento dos dispositivos microeletrônicos, pelo aparecimento de turbulências em sistemas de circulação de fluídos, pelo aumento do atrito entre duas superfícies, etc.

Antes de fazer as medidas de rugosidades, por uma técnica qualquer, será feita a seguinte pergunta: o que é a rugosidade de uma superfície? Serão as alturas das pontas

presentes nesta superfície? Seria uma combinação de todos estes aspectos da superfície? Como seria possível quantificar a rugosidade de uma dada superfície de maneira unívoca, e que esta quantificação fosse como a "impressão digital" desta superfície? Na busca de respostas a estas perguntas serão descritos, nos parágrafos seguintes, diferentes modelos para quantificar a rugosidade de superfícies. Discutiremos também os aspectos das rugosidades topológicas e das rugosidades eletrônicas.

2. Modelos de quantificação da rugosidade.

Além da dificuldade de associar um parâmetro à característica de rugosidade de uma superfície, há também o fato de a rugosidade ter efeitos diferentes, para diferentes fenômenos. Na ruptura de dielétricos a altura das rugosidades é importante, mas agudeza desta rugosidade também é importante. No caso de atrito entre duas superfícies a área de contato entre as duas superfícies é mais importante do que a altura dos picos. Quanto mais rugosas forem as superfícies maior será a área de contato e portanto maior o atrito.

Para fins práticos, um dos cinco parâmetros a serem descritos nos próximos parágrafos poderão ser correlacionados com os diferentes fenômenos em que a rugosidade participa. A seguir, serão descritas as definições dos principais parâmetros associados com a rugosidade de uma superfície.

Consideremos um conjunto de N pontos igualmente espaçados, correspondentes aos valores de um parâmetro γ , que poderão ser estabelecidos por medidas experimentais ou simulação, dados por $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \dots, \gamma_i, \dots, \gamma_N$. O parâmetro γ é genérico e pode assumir valores de alturas, como é o caso da rugosidade topográfica, ou de campos elétricos, para o caso de rugosidade eletrônica, ou de correntes, de potenciais, de habitantes, etc.

2.1 Valor médio.

O valor médio ($\bar{\gamma}$) de um parâmetro γ é determinado através da relação:

$$\bar{\gamma} = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{N} \quad [\text{IV-1}]$$

$$\bar{\gamma} = \frac{\int_a^b \gamma(x) dx}{b-a} \quad [\text{IV-2}]$$

onde N é o número total de pontos. Se tivermos γ definido por uma função contínua $\gamma(x)$ o valor médio será dada pela Equação IV-2, com “a” e “b” definindo os intervalos em x que se quer determinar o valor médio de γ

O valor médio $\bar{\gamma}$ é uma medida do valor central da variável γ , em torno da qual os vários valores γ_i estarão distribuídos. Ele dá uma idéia de como a maioria dos pontos analisados se comporta, e é conhecido também como primeiro momento.

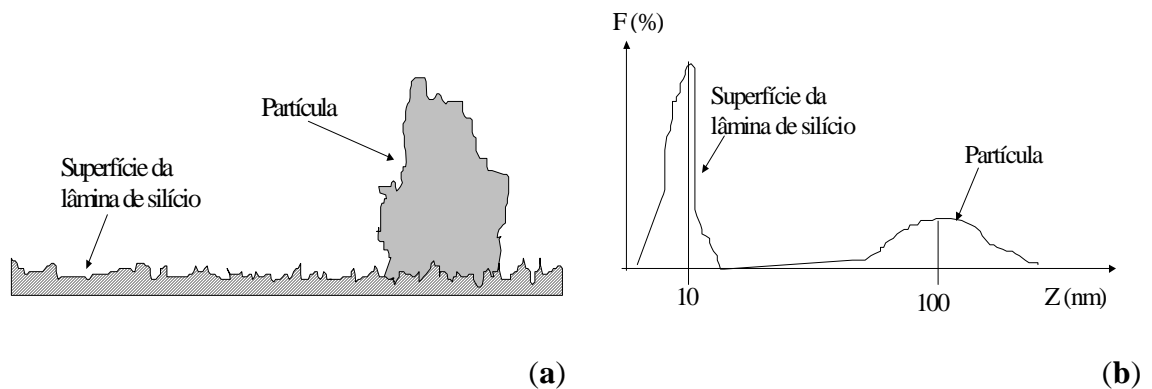


Figura IV-1: *a)* Superfície rugosa com uma partícula de dimensões muito maiores que as da rugosidade e *b)* histograma das alturas da topografia correspondente à superfície apresentada em (a).

O valor médio é um parâmetro importante, mas somente com o desvio padrão ele passa a ter maior precisão. Isto porque o desvio padrão dá a informação de quão dispersa estão os dados ao redor do valor médio.

Um problema do valor médio é que ele é muito sensível a valores extremos. Imagine, por exemplo, duas populações diferentes coexistindo em um mesmo conjunto de pontos.

Por exemplo, no histograma mostrado na Figura IV-1b, a primeira população representa 90% do total dos pontos e têm valores da ordem de 10, 9, 11, etc.; enquanto que a segunda população, com 10% do total de pontos, e com valores da ordem de 1000, 1001, 999, etc.. Suponha-se que a primeira população tenha um valor médio de 10, enquanto que a segunda tenha o valor médio de 1000. Se este conjunto de pontos for encarada como uma única população o valor médio será igual a:

$$\bar{\gamma} = 10 \times 0,9 + 1000 \times 0,1 = 9 + 100 = 109.$$

O valor médio resultante do conjunto, $\bar{\gamma} = 109$, não representa nem a primeira população nem a segunda. Experimentalmente este caso pode ser exemplificado por uma superfície de silício, com rugosidades da ordem de angstroms, com uma partícula com dimensão de um micron, cujo perfil seria similar a rugosidade apresentada na Figura IV-1b.

2.2 Desvio padrão.

O desvio padrão (σ_γ) ou “root-mean-square”, do parâmetro genérico γ quantifica a dispersão do conjunto de pontos em relação ao valor médio e é definido como:

$$\sigma_\gamma = + \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\gamma_i - \bar{\gamma})^2}{N-1}} \quad \text{[IV-3]}$$

$$\sigma_\gamma = + \sqrt{\frac{\int_a^b (\gamma(x) - \bar{\gamma}(x))^2 dx}{b-a}} \quad \text{[IV-4]}$$

sendo que a forma de somatória é aplicada para o caso de um conjunto de pontos com valores discretos, enquanto que a forma de integral é para um conjunto com valores contínuos. O valor do desvio padrão nunca poderá ser negativo, já que $(\gamma_i - \bar{\gamma})^2 \geq 0$, o que faz com que cada termo da somatória contribua com um número não negativo. Quanto mais espalhados estiverem os valores de γ_i em torno de $\bar{\gamma}$, maior será o valor de σ_γ . Portanto, σ_γ mede a dispersão dos valores γ_i em torno de $\bar{\gamma}$.

O desvio padrão é associado ao segundo momento, que é a variância. Existem outros dois momentos importantes: o terceiro e o quarto, que estão respectivamente associados à assimetria e ao achatamento do histograma de frequências, quando comparada à curva normal.

$$m_{\gamma}^n = \frac{\sum_{i=1}^N (\gamma_i - \bar{\gamma})^n}{N-1} \quad \text{[IV-5]}$$

$$m_{\gamma}^n = \frac{\int_a^b (\gamma(x) - \bar{\gamma}(x))^n dx}{b-a} \quad \text{[IV-6]}$$

O terceiro momento, dada pela Equação IV-5 com $n = 3$, dá um valor nulo quando a distribuição é simétrica em relação ao valor médio, pois os termos $(\gamma_i - \bar{\gamma})^3$ da somatória poderão assumir valores positivos ou negativos; se a distribuição for simétrica os termos negativos anularão os positivos. Se a distribuição for assimétrica, o terceiro momento será diferente de zero:

- a) maior que zero se a soma dos termos positivos forem maior que os negativos, fazendo com que a distribuição fique mais "alongada" para valores maiores que $\bar{\gamma}$.
- b) menor que zero se a soma dos termos positivos forem menores que os negativos, fazendo com que a distribuição fique mais "alongada" para valores menores que $\bar{\gamma}$.

O comentário feito a partir da Figura IV-1 para a interpretação de $\bar{\gamma}$, também é importante para o desvio padrão: se houver duas ou mais populações coexistindo em um mesmo conjunto de pontos o desvio padrão da totalidade dos pontos não corresponderá a nenhuma das populações. Se no caso ilustrado pela Figura IV-1, as populações tiverem $\sigma_1 = 1$ e $\sigma_2 = 10$ o desvio padrão será calculado a partir do valor médio de todo o conjunto de pontos, 109; isto dará como resultado a dispersão das duas populações em torno do valor médio e o valor de σ_{γ} resultante não corresponderá a nenhuma das duas populações!

O desvio padrão quantifica a dispersão dos dados. Se os dados analisados corresponderem a uma distribuição bem definida, como a Gaussiana por exemplo, pode-se afirmar que 67% dos dados analisados estarão no intervalo $[\bar{\gamma} - \sigma_{\gamma}, \bar{\gamma} + \sigma_{\gamma}]$. No caso de uma distribuição Lorentzeana, ou binomial, haveriam outras relações, também completamente definidas.

2.3 Valor de pico-a-pico.

O valor do parâmetro pico-a-pico (γ_p) é dado pela diferença do máximo valor da variável γ ($\gamma_{máx}$) pelo mínimo valor de γ ($\gamma_{mín}$), ou seja:

$$\gamma_p = \gamma_{máx} - \gamma_{mín} \cdot \quad [IV-7]$$

O valor de γ_p pode ser definido teoricamente a partir de σ_{γ} , se a forma da distribuição de frequência for conhecida. Por exemplo, se a distribuição for gaussiana o valor de γ_p será de aproximadamente $6 \times \sigma_{\gamma}$. Esta relação entre γ_p e σ_{γ} só ocorre se a distribuição é muito bem definida, o que não é comum em experimentos reais.

No caso de campos de rupturas de dielétricos, este parâmetro é bastante importante pois será ele que definirá a região fraca do material analisado. Nesta região o campo elétrico local terá a maior intensidade, devido ao afinamento local do óxido, resultando num tensionamento local maior do dielétrico e sendo, portanto, a região mais propensa à ruptura.

2.4 Síntese dos três parâmetros $\bar{\gamma}$, σ_{γ} e γ_p

Nos primeiros estudos de rugosidades [10-13] o parâmetro σ_{γ} era considerado, sozinho, o parâmetro mais importante da caracterização da rugosidade de uma superfície. Atualmente [4] concorda-se que para uma melhor caracterização da rugosidade além de σ_{γ} são necessários também os parâmetros $\bar{\gamma}$ e o γ_p [14].

Se for considerado a equação genérica, dada por:

$$\gamma = \gamma(x) = \sum_1^3 a_i \cos(k_i x), \quad \text{[IV-8]}$$

sendo que a_i assume valores $a_1 = 100$, $a_2 = 50$ e $a_3 = 25$ para as três curvas com diferentes valores k_i , a serem descritas na Figura IV-2. Apesar das três curvas terem aspectos totalmente diferentes, o valor de σ_γ será exatamente igual para as três ($\sigma_\gamma = 81,009$). As unidades consideradas são todas arbitrárias sendo σ_γ determinado pela aplicação da Equação IV-5, com o intervalo de integração de $[0, 2\pi]$.

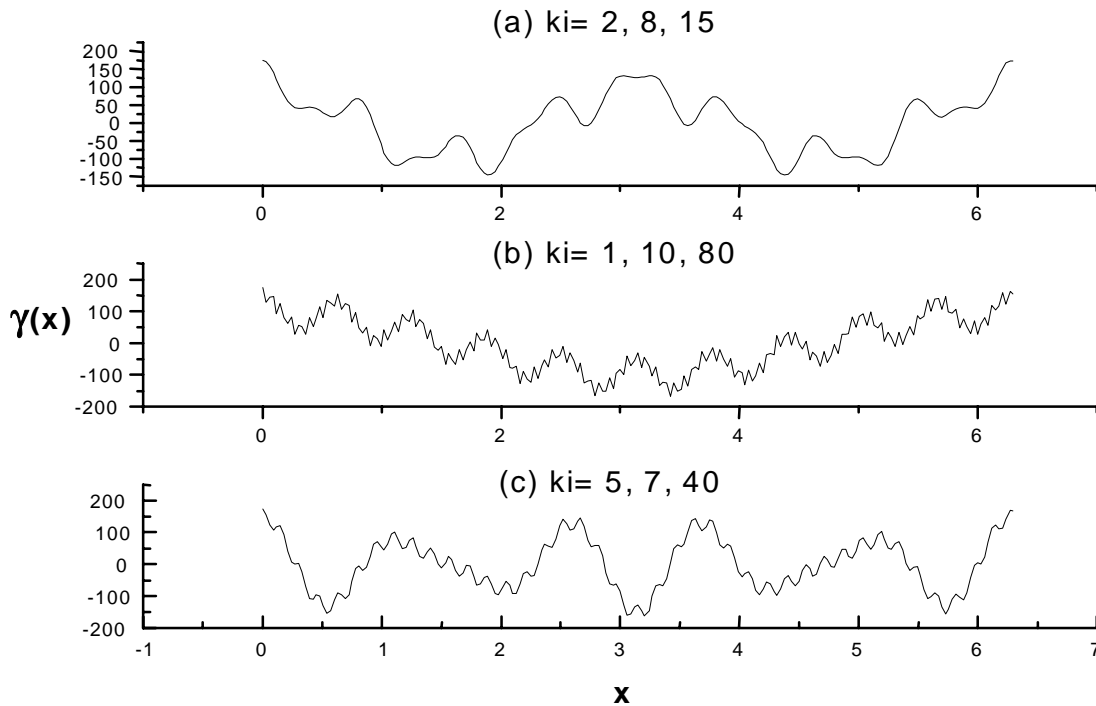


Figura IV-2: Três curvas diferentes com o mesmo valor de σ_γ (81,009 u.a.).

Os trabalhos citados nas referências [2-4] mostram a diferença dos efeitos elétricos de duas topografias diferentes mas com mesmo σ_γ .

Um outro problema com o parâmetro σ_γ , quando utilizado isoladamente para quantificar a rugosidade, é que em alguns casos ele pode assumir valores

totalmente diferentes em diferentes áreas de análises, tanto no que se refere às escalas (tamanho da área de análise) como em posição na amostra. Isto é muito comum se a amostra analisada for heterogênea. A Figura IV-3a ilustra uma situação onde o valor de σ_γ tem uma variação de quase 100% ao ser analisada diferentes regiões de uma curva gerada por simulação de um movimento Browniano.

Diferentes áreas de análises produzem diferentes valores de σ_γ . A partir de uma curva, gerada por simulação de um movimento Browniano, de 0 até L, foram obtidos diferentes valores de σ_γ quando a quantificação é feita em escalas diferentes (área de análise) e em regiões diferentes, veja Tabela IV-1.

Intervalo	σ_γ (u.a.)
0 até L/2	0,5
de 0 até L	0,3
de L/2 até L	0,2

Tabela IV-1: Valores de σ_γ para diferentes áreas de análises. As unidades são arbitrárias.

Observe também, na Tabela IV-1, que quando o tamanho da região analisada varia o valor de σ_γ também varia. Isto é devido ao fato da amostra analisada não ser homogênea e uniforme. Casos de superfícies não uniformes e heterogêneas podem ocorrer em microeletrônica nas interfaces do SiO₂ (com particulados), nos silicetos e no silício policristalino.

O fato do valor do σ_γ ser diferente para diferentes áreas não compromete o parâmetro quanto a sua significação, quando isto ocorre ele mostra exatamente o que a amostra é: heterogênea.

No caso de superfície de silício, a área de análise influencia bastante a medida de

σ_γ . Isto é um dos motivos por que uma mesma amostra analisada por diferentes técnicas resulta em diferentes valores de σ_γ . É o que ocorre com as medidas de elipsometria e de perfilometria. O elipsometro tem a área de análise dada pelo tamanho do foco do laser, enquanto que a do perfilômetro é dada pelo tamanho e forma do cabeçote, com o qual é feita a varredura da superfície na amostra. Além disso deve-se levar em consideração que o elipsometro interage eletromagneticamente enquanto que o perfilômetro interage mecanicamente com a superfície da amostra.

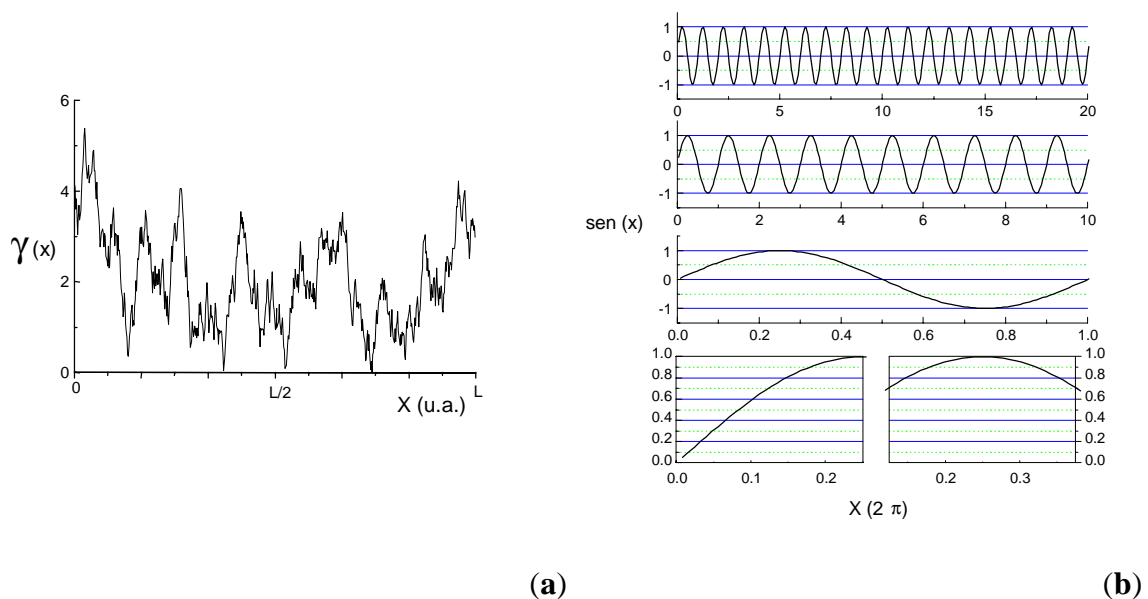
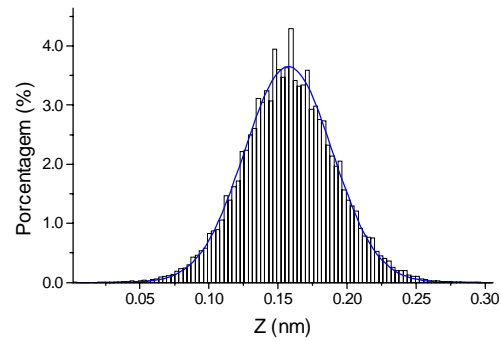


Figura IV-3: Curvas **a)** obtida por simulação de movimento Browniano e **b)** a função $\gamma = \text{sen}(x)$ "vista" em várias escalas diferentes

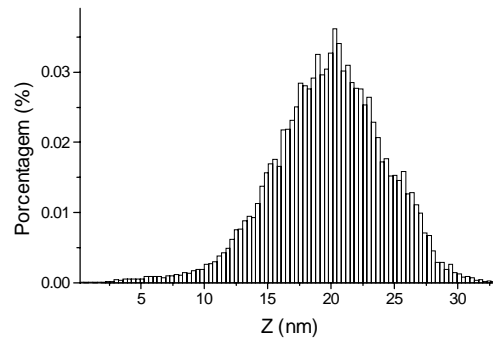
A Figura IV-3b mostra que uma curva simples, representada pela função $\gamma(x) = \text{sen}(x)$, pode apresentar diferentes aspectos ao ser visualizada através de diferentes "escalas", ou intervalos, e podendo com isso resultar em uma diferente quantificação da rugosidade.

Os três exemplos anteriores mostram que além do cuidado necessário na análise dos dados estatísticos é necessário também definir a posição na amostra em que foi feita a medida, assim como o tamanho da área de análise.

(a)



(b)



(c)

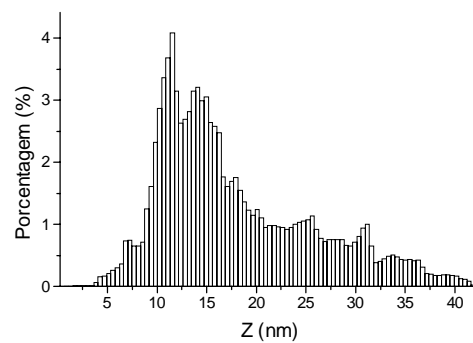


Figura IV-4: Três histogramas com características diferentes: **a)** simétrica, **b)** assimétrica e **c)** totalmente assimétrica.

Os três parâmetros $\bar{\gamma}$, σ_{γ} e γ_p têm diferentes relações quando se referem a

diferentes distribuições de frequência. A Figura IV-4 mostra três histogramas de frequência onde as relações entre os três parâmetros não são as mesmas.

O histograma (a) corresponde às medidas das alturas (Z) da topografia tri-dimensional (XYZ) da superfície de silício (100) virgem. O valor médio de Z (\bar{z}) foi de 0,156 nm, σ_z de 0,033 nm, $Z_p = 0,323$ nm, o terceiro momento (m_z^3) de 0,0079 nm e o quarto momento (m_z^4) de 0,0448 nm. O terceiro momento com valor próximo de zero sugere que a distribuição de alturas está espalhado simetricamente em torno do valor médio.

O histograma (b) corresponde à superfície de um siliceto de titânio. O valor de \bar{z} foi de 19,65 nm, $\sigma_z = 4,37$ nm, $Z_p = 40,23$ nm, $m_z^3 = -3,1$ nm e m_z^4 foi de 5,99 nm. Observe que o terceiro momento diferente de zero indica uma assimetria do histograma em relação ao valor médio; e o sinal negativo de que o histograma está deslocado para valores maiores de Z .

O histograma (c) corresponde a superfície de silício após passar por uma etapa de processo de corrosão por plasma. O \bar{z} foi de 17,67 nm, o σ_z foi de 7,83 nm, $Z_p = 38,87$ nm, o $m_z^3 = 7,47$ nm e o m_z^4 foi 10,28 nm.

Uma sugestão seria, ao invés de utilizar os três parâmetros, utilizar o histograma de frequências $F(\gamma)$. A partir do histograma os três parâmetros podem ser obtidos e, adicionalmente, os momentos da distribuição de frequência darão informações complementares das características da rugosidade da superfície. O conhecimento do histograma de frequência $F(\gamma)$ implica uma completa informação a respeito da distribuição de valores da variável γ . O conhecimento de alguns momentos, tais como $\bar{\gamma}$, e σ_γ^2 , implica somente um conhecimento parcial, embora útil, das características da distribuição $F(\gamma)$. O conhecimento de alguns momentos da distribuição não é suficiente para determinar completamente a distribuição $F(\gamma)$, a não ser que sejam conhecidos todos os n momentos, veja Equação IV-5. Portanto, o histograma de frequência das alturas pode substituir perfeitamente bem os três parâmetros $\bar{\gamma}$, σ_γ e γ_p , com a vantagem de

trazer os três parâmetros já embutidos, mais a informação dos momentos relacionados com a assimetria e o achatamento da distribuição. A informação da posição na amostra, onde foi realizada a medida, e o tamanho da área de análise também é importante.

2.5 Rugosidade fractal

As dimensões da geometria euclidiana são dadas como inteiras 0, 1, 2 e 3 correspondendo a ponto, reta, plano e volume, respectivamente. No entanto, esta classificação simples é inadequada para formas irregulares de numerosos objetos naturais e artificiais. Pode-se intuir valores de dimensões intermediárias para tais objetos. Uma reta tracejada, por exemplo, pode ter uma dimensão entre 0 e 1, enquanto que uma linha dentada uma dimensão entre 1 e 2 pois, preenche parcialmente um plano. Estas dimensões fracionadas, conhecidas como dimensões fractais (DF), foram inventadas por Mandelbrot [15] para descrever texturas de objetos com formas irregulares, referenciados como objetos fractais.

Se o perfil de uma montanha for comparada com o perfil de um edifício será fácil perceber que a montanha é a que tem o perfil mais rugoso. No entanto, se forem comparados os perfis de duas montanhas a resposta poderá não ser tão óbvia. Neste caso, a dimensão fractal (DF) poderá indicar qual das duas montanhas é a mais rugosa. A dimensão fractal dá informação do número de sucessão de máximos e mínimos relativos existentes em um certo comprimento arbitrário.

A justificativa para aplicar o conceito de dimensão fractal na determinação da rugosidade da topografia de uma montanha, assim como nas topografias das interfaces do SiO_2 , vem da propriedade de auto-afinidade que as mesmas possuem. No sentido estrito, a propriedade de auto-afinidade significa que se for tomada uma pequena parte da montanha e amplificada por algum fator vertical e horizontal, a resultante terá que ser exatamente igual a totalidade da montanha. No sentido mais amplo, a propriedade de auto-afinidade significa que a pequena parte da montanha e a totalidade da montanha terão que ter, em média,

a suas dimensões verticais e horizontais relacionadas por uma lei de potência [16].

É importante deixar claro que para que esta análise tenha validade na interface Si-SiO₂, esta não terá que ser necessariamente um fractal, assim não existe a necessidade de uma simetria em escala, ou seja, a dimensão fractal (D_F) não será constante para diferentes escalas, como ocorreria com um fractal auto-similar, que se auto-repete em todas as escalas, e a conseqüente constância da DF nestas diferentes escalas. Para a interface Si-SiO₂ a D_F pode ter diferentes valores para diferentes escalas: em uma escala arbitrária poderá ser exatamente dois, em uma outra escala, maior que dois, e assim por diante.

Um método utilizado para a determinação da dimensão fractal envolve o uso de caixas dimensionadas [15,17]. Em poucas palavras, para uma curva irregular, este método consiste em cobrir a topografia da curva com um malha quadrada (a forma dos objetos que irão cobrir a curva é arbitrária: pode ser circular, retangular, etc.) de lado L , com valor inicial b . Na seqüência é feita uma contagem de caixas não-vazias N [Figura IV-5]. A seguir o tamanho das caixas é dividido por 2, ou seja, $L = b/2$, (ou simplesmente variado arbitrariamente) e a contagem de caixas não-vazias é refeita. Depois de um número conveniente de repetições obtém-se uma tabela de $N \times L$. Finalmente, as contagens N e o tamanho das caixas L são plotados em um gráfico com escala bi-log, resultando em uma reta [veja Figura IV-6]. O coeficiente angular desta reta é a dimensão fractal (D_F) da curva irregular e, conseqüentemente, a quantificação do grau de irregularidade da mesma. Se ao invés de uma curva irregular, contida no espaço bidimensional, o objeto analisado fosse uma superfície tridimensional irregular o procedimento seria o mesmo, tomando o cuidado de substituir as caixas bidimensionais por tridimensionais (cubos).

Em uma curva perfeitamente linear, o número de caixas necessárias para cobri-la, aumenta linearmente com a diminuição do tamanho das caixas, ou seja:

$$N \propto L^{-1} \quad \text{[IV-9]}$$

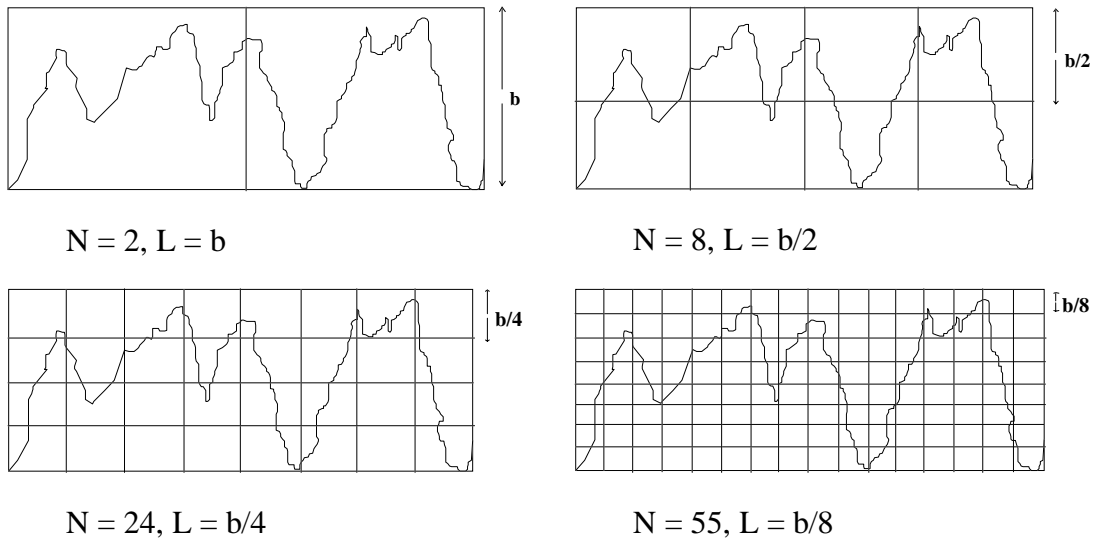


Figura IV-5: Ilustração do algoritmo da contagem de caixas para a obtenção da dimensão fractal: A taxa na qual o número de caixas não vazias (N) aumenta com a diminuição da dimensão das caixas (L) é a medida direta da dimensão fractal (D_F).

Para uma superfície rugosa, o número de caixas necessárias para cobri-la aumentará mais rapidamente com a diminuição do tamanho das caixas, sendo que a taxa deste aumento será dada por D_F :

$$N \propto L^{-D_F} \quad [IV-10]$$

onde $1 < D_F < 2$, para o caso de uma curva descrita no espaço bidimensional. Para uma curva extremamente rugosa D_F tenderá a 2.

A dimensão fractal de um objeto contido dentro de um espaço bidimensional, pode assumir também valores entre 0 e 1, que é o caso de pontos discretos contidos dentro de uma reta, mas representado no espaço tridimensional. Isto é decorrência do fato de que um objeto com dimensão k ($k \leq N$) contido em um espaço com N dimensões, poderá ter a dimensão fractal máxima de N e mínima de zero.

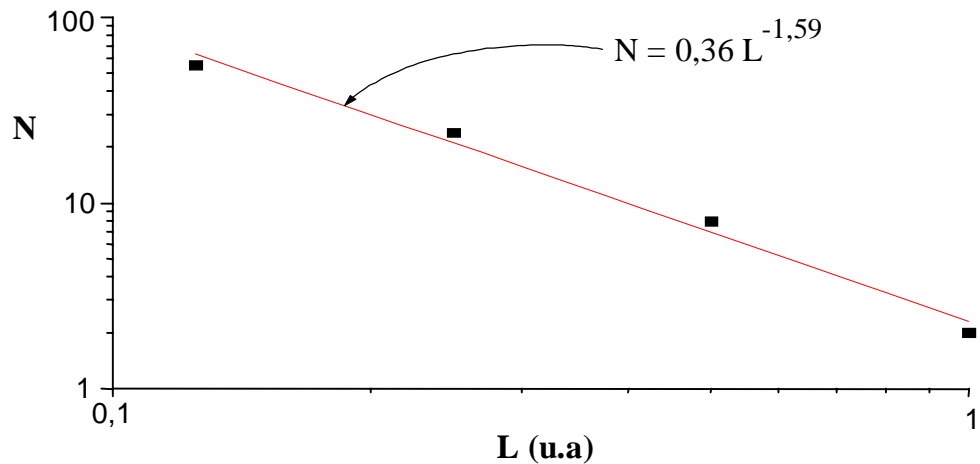


Figura IV-6: Gráfico de N versus L , criado a partir da curva arbitrária mostrada na Figura IV-2.0. O valor de D_F foi de 1,59.

A aplicação do algoritmo de contagem de caixas em um objeto não-fractal resultará em uma não constância do coeficiente angular, ou seja da dimensão fractal, para as diferentes escalas consideradas. No entanto, no que se refere a quantificação da rugosidade de uma superfície arbitrária, a tangente da curva $\ln(N)$ versus $\ln(L)$ num ponto L_i , poderá quantificar a rugosidade da topografia na escala L_i .

Existem alguns trabalhos onde o algoritmo para a determinação da dimensão fractal é tratada, tais como as referências [14 - 17]. Trabalhos sobre rugosidade fractal também foram feitos [14].

A quantificação da rugosidade pela dimensão fractal dá uma idéia da forma da rugosidade da superfície. A rugosidade existente na interface Si-SiO₂, quando observada em um intervalo de amplificação, apresentam a propriedade de auto-afinidade.

O cuidado que deve ser tomado quando a rugosidade da interface Si-SiO₂ é quantificada através da dimensão fractal é que esta superfície não tem a propriedade de auto-afinidade em todas as escalas. Pode ser facilmente mostrado observando visualmente que a superfície é planar (dimensão 2); ao ser observado por microscópio óptico a superfície

continuará planar (dimensão 2); a superfície continuará tendo um aspecto planar até que o microscópio utilizado tenha resolução suficiente para detectar estruturas da ordem de dezenas de Ångstrons; a escala de amplificação em que a rugosidade começar a se manifestar, fará com que a dimensão fractal assumira valores maiores que dois, mas menores que três, pois por mais rugoso que esta superfície venha a ser nunca poderá ter dimensão maior que o volume, que corresponde a dimensão 3; se a estrutura for amplificada muito mais a estrutura discreta dos arranjos atômicos da interface começarão a serem observados, resultando em uma dimensão fractal entre 0 e 3. Portanto, a faixa das escalas de amplificações da superfície em que a rugosidade interessará para este trabalho serão aquelas em que as dimensões fractais forem maiores que 2 e menores que 3.

Uma limitação da quantificação da rugosidade por dimensão fractal é que a dimensão fractal é um número adimensional, não dando nenhuma informação do tamanho das rugosidades. Assim, junto ao valor da dimensão fractal é importante associar sempre a escala em que foram feitas as medidas.

2.6 Razão das áreas.

A razão das áreas (R_a) é a medida de rugosidade dada pela razão da área total de uma superfície pela área projetada, ou seja:

$$R_a = \frac{a_{total}}{a_{proj}} . \quad [IV-11]$$

R_a assume valores positivos maiores ou iguais a 1 ($R_a \geq 1$), pois a área projetada é sempre menor ou igual à área total. Quanto mais próximo for de 1 mais plana, ou menos rugosa, será a superfície. Por outro lado, quanto maior for o valor de R_a , mais rugosa será a superfície. A Figura IV-7 ilustra esta idéia, onde em um intervalo de $[0, 2\pi]$ de x (área de análise), são plotados senos com diferentes períodos, produzindo com isso curvas com

diferentes rugosidades.

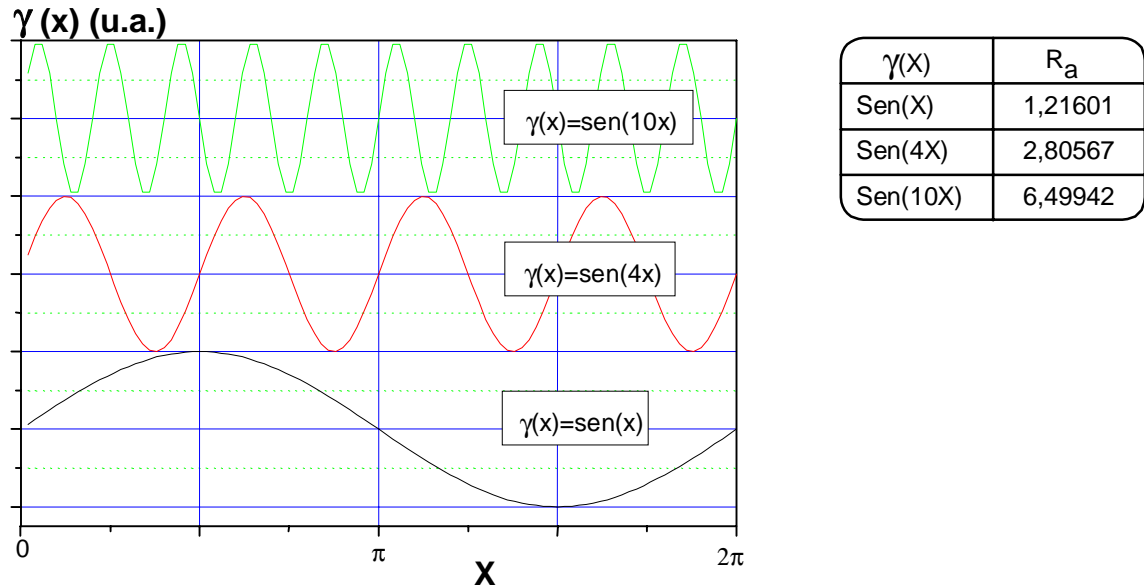


Figura IV-7: Ilustração da rugosidade dada pela razão das "áreas". Acima está a tabela com os valores de R_a para as diferentes funções.

O conceito de R_a pode ser generalizado para superfícies multidimensionais:

- a) Curva bidimensional: Comprimento total da curva sobre a projeção da curva no eixo x .

Para este caso, em particular, pode-se utilizar a relação:

$$R_a = \frac{\int_a^b |\gamma'(x)| dx}{b-a} \quad [\text{IV-12}]$$

onde $\gamma'(x)$ é a derivada da função que descreve a superfície rugosa e a e b são os intervalos da função considerada.

- b) Superfície tridimensional: A área total da superfície sobre a área projetada no plano arbitrário XY .

- c) Objeto multidimensional: O hipervolume sobre a projeção deste hipervolume sobre um hiperplano qualquer.

Uma limitação da quantificação da rugosidades através da razão das áreas é que ela, assim como a DF, é adimensional, não dando idéia do tamanho das rugosidades; assim a informação da área de análise é importante.

3. Conclusões

Após a descrição de cinco maneiras diferentes de quantificar a rugosidade de uma superfície pode-se voltar à pergunta original: o que é a rugosidade de uma superfície? Esta pergunta não tem resposta, da maneira como está formulada!

Quantificar a rugosidade de uma superfície irregular com apenas um número é impossível. Para caracterizar completamente um superfície, de forma mais precisa, é necessário fazer uma combinação dos cinco parâmetros, os quais são complementares e não competitivos, e associar à escala em que foi feita esta quantificação. Portanto, para termos a assinatura da superfície, é necessário fazer uma combinação destes cinco parâmetros mais a informação da escala.

A quantificação da rugosidade pode ser feita a partir de vários parâmetros, tais como, valor médio, desvio padrão (σ_γ), pico-a-pico, dimensão fractal e razão das áreas. O valor de cada um deles, em si, não tem um significado absoluto, ou seja, dependerá do efeito elétrico a ser considerado: um elevado valor do σ_γ tem menos importância do que o pico-a-pico se for considerado o processo de ruptura de dielétricos; por outro lado, se for considerado a quantidade de cargas fixas na interface, a ordem das importâncias são invertidas. Portanto, o significado do valor de um destes parâmetros dependerá do fenômeno estudado.

É interessante observar também que a quantificação através da dimensão fractal e da razão das áreas, que dão como resultados números adimensionais, dão informação apenas

da forma da rugosidade, não de seu tamanho. Por outro lado, os parâmetros σ_y , valor médio e pico-a-pico dão informação do tamanho das rugosidades e informações incompletas da forma da rugosidade.

Existem alguns casos em que superfícies geradas matematicamente, ou obtidas experimentalmente, apresentam rugosidades diferentes em diferentes escalas em que são medidas. Neste caso, uma curva contendo as quantificações em função da escala em que foram obtidas poderá caracterizar melhor esta superfície.

4. Bibliografia

- 1 BARRET, C.R. Mater. Res. Soc. Bull. Vol.XVIII, p.3 (1993).
- 2 VALENTE LOPES, M.C.; HASENACK, C.M. The Impact of Si-SiO₂ Interface Asperities on Breakdown Characteristics of Thin Gate Oxides. J. Electrochem. Soc., Vol.139 (10), p.2909,1992.
- 3 VALENTE LOPES, M. C.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. Numerical Calculations of the Electrical Effects Induced by Structural Imperfections on MOS Capacitors. J. Electrochem. Soc., Vol.141 (6), p.1621 (1994).
- 4 VALENTE LOPES, M.C.; SANTOS, S.G.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. The Influence of Si-SiO₂ Interface Roughness on Electronic Roughness. J. Electrochem. Soc., Vol. 143 (3), p.1021 (1996).
- 5 MARCUS, C.R. et al. J. Electrochem. Soc., Vol.129, p.1282 (1982).
- 6 GOODNICK, S.M. et al. J. Vac. Sci. technol. B, Vol.1, p.803 (1982).
- 7 DiMARIA, D.J. et al. Appl. Phys. Lett. Vol.27, p.505 (1975).
- 8 RIDLEY, B.K. et al. J. Appl. Phys., Vol.46, p.998 (1975).
- 9 HEIMANN, P.A. et al. J. Appl. Phys., Vol.53, p.6240 (1982).
- 10 KRIVALEK, O.L et al. Appl. phys. lett., Vol.32, p.437 (1978).

- 11 KRIVALEK, O.L et al. Appl. phys. lett., Vol.37 (4), p.392 (1980).
- 12 HONDA, K.; Takizawa, R.; OHSAWA, A. J. Appl. Phys., Vol.63 (8), p.2637 (1988).
- 13 KAISER, W.J; ET AL J. Vac. Sci. Technol. A, Vol.6 (2), p.519 (1988).
- 14 SPANOS, L.; IRENE, E.A. J. Vac. Sci. Technol. A, Vol.12 (5) (1994).
- 15 MANDELBROT, B.B. The fractal geometry of nature, Freeman, New York, (1982).
- 16 FUTER, D Fractals in Science, Chap. 4, book in press
- 17 CHESTERS, S.; WANG, H.; KASPER, G. A Fractal-Based Method for Describing Surface Texture. Sol. State Technol., january (1991).

Capítulo V

Técnicas de Medição de Rugosidades

1. Introdução.

As técnicas de medida da rugosidade são bastante diversificadas, sendo que cada uma delas permitirá o acesso a informações diferentes, todas com a sua devida importância. Algumas técnicas de determinação da topografia das interfaces do SiO₂ são descritas a seguir.

2. Perfilometria mecânica

A perfilometria utiliza o contato mecânico de uma ponta, geralmente com formato semi-esférico, com a superfície do material para a medida da altura.

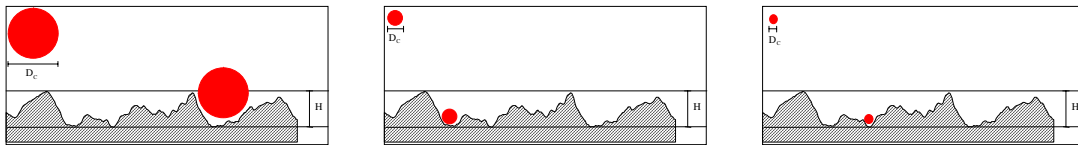


Figura V-1: Ilustração da limitação imposta a resolução das topografias medidas devido ao diâmetro do cabeçote D_c .

A Figura V-1 ilustra a limitação imposta à resolução das medidas obtidas por perfilometria. Conforme o diâmetro do cabeçote diminui, a resolução das medidas aumenta (são inversamente proporcionais). A limitação desta técnica de medida está na "eletrônica", que a partir de uma certa escala de variação na altura o equipamento não tem sensibilidade para detectar, mesmo que o diâmetro do cabeçote seja reduzido.

3. Microscopia de tunelamento.

A microscopia de tunelamento tem como idéia fundamental o efeito túnel. O efeito túnel ocorre entre o cabeçote do microscópio e a superfície da amostra. Não existe contato entre o cabeçote e a superfície medida, como é o caso do perfilômetro; a detecção será feita pela corrente de tunelamento entre o cabeçote, polarizado com um potencial elétrico, e a superfície. Como existe uma relação funcional entre a intensidade da corrente de tunelamento e a distância entre o cabeçote e a superfície, a distância entre os dois é determinada.

Existem basicamente dois modos de operação do AFM (Atomic Force Microscope): com altura constante e com corrente constante. No primeiro caso, uma altura arbitrária é fixada e nesta posição o cabeçote faz a varredura de toda a superfície, variando X e Y; neste caso toda a variação da corrente de tunelamento é devido a estrutura da superfície medida. No segundo caso, a corrente de tunelamento é fixada, o que levará a uma constância da distância entre a superfície medida e o cabeçote do microscópio

4. Microscopia de força atômica.

A microscopia de força atômica é uma associação do perfilômetro com o microscópio de tunelamento [1], porém o cabeçote do microscópio interage por repulsão nuclear com a superfície do material medido.

Neste caso existem três modos de operação: longa, média e curta distância. Na longa distância, a distribuição eletrônica do cabeçote "verá" a distribuição eletrônica da superfície medida, o que resultará em uma interação repulsiva. A média distância, o cabeçote penetrará na "coroa eletrônica" da superfície e a distribuição eletrônica do cabeçote "verá" o núcleo positivo do átomo, o que resultará em uma interação atrativa. No terceiro caso, o cabeçote

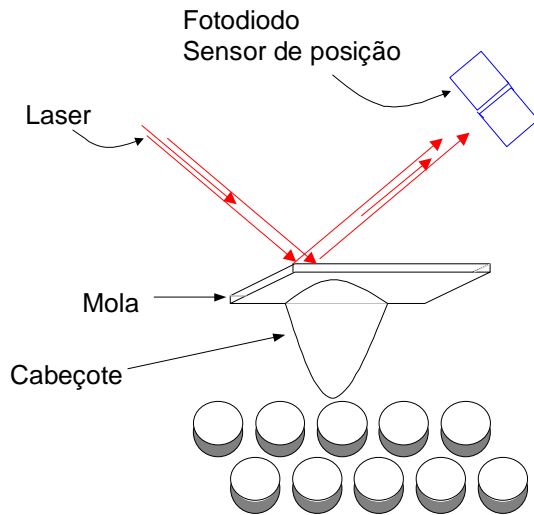


Figura V-2: *Microscópio de força atômica.*

se aproximará ainda mais do núcleo dos átomos da superfície, neste caso haverá uma interação repulsiva, pois a interação nuclear é sempre repulsiva.

5. Elipsometria.

A elipsometria [2-3] mede a diferença de caminho (fase) entre dois raios de luz polarizados, um que reflete na superfície do filme e um outro que reflete na interface filme-substrato. A interferência entre estes dois raios dará a diferença de caminho que está associado à espessura do dielétrico.

Portanto a técnica de elipsometria mede a espessura média do dielétrico na região em que incide o foco do laser, tipicamente com área de 1 mm². A topografia é obtida fazendo-se medidas de espessura ao longo de toda a superfície da amostra.

6. Espalhamento de luz.

A medida de espalhamento analisa a variação da intensidade da luz espalhada em torno do feixe refletido [4]. Quanto mais rugoso for a superfície refletora, mais a luz sofrerá espalhamento.

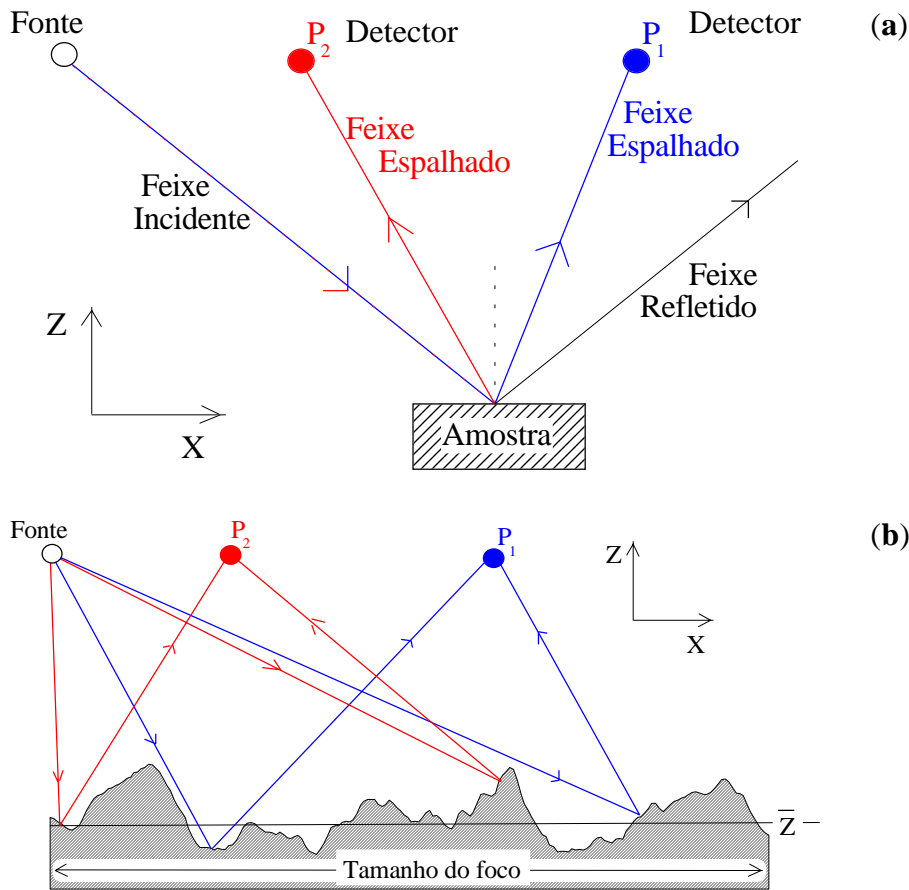


Figura V-3: Esquema do arranjo experimental do rugosímetro a) macroscopicamente e b) localmente

A quantificação da rugosidade é feita através da comparação da intensidade da luz, em um certo ângulo em relação ao feixe refletido, com a intensidade do feixe incidente.

7. Conclusões

A análise da quantificação de rugosidades, foi feita pensando principalmente nas superfícies existentes entre as interfaces do SiO₂-Si e SiO₂-Al, sendo estas superfícies representadas no espaço tridimensional, pelas variáveis X, Y e Z. A rugosidade topográfica a ser considerada neste trabalho, será aquela em que as variáveis estão associados ao espaço. A rugosidade topográfica é aquela puramente geométrica. Seria o relevo da

superfície de silício considerando as formas e as amplitudes presentes na superfície analisada.

A rugosidade geométrica, por si só, é capaz de produzir efeitos de perturbação do campo elétrico local e, daí, resultar na ruptura do dielétrico [5-7].

8. Bibliografia

- 1 BINNING, G. AND ROHRER, H. IBM J. Res. Dev., Vol.30, p.355 (1986).
- 2 HUNTER, W.R.; EATON, D.H. and SAH, C.T. Surface Sci., Vol.20, p.355 (1970).
- 3 MCCRACKIN, F.L. NBS Technical note 479 (Apr. 1969) U.S. Printing Office, Washington D.C.
- 4 HAHN, P.O.; LAMPERT, I. AND SCHNEGG, A. SiO₂ and its interfaces, Mater. Res. Soc. Proc. (1987).
- 5 VALENTE LOPES, M.C.; HASENACK, C.M. The Impact of Si-SiO₂ Interface Asperities on Breakdown Characteristics of Thin Gate Oxides. J. Electrochem. Soc., Vol.139 (10), p.2909 (1992).
- 6 VALENTE LOPES, M. C.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. Numerical Calculations of the Electrical Effects Induced by Structural Imperfections on MOS Capacitors. J. Electrochem. Soc., Vol.141 (6), p.1621 (1994).
- 7 VALENTE LOPES, M.C.; SANTOS, S.G.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. The Influence of Si-SiO₂ Interface Roughness on Electronic Roughness. J. Electrochem. Soc., Vol. 143 (3), p.1021 (1996).

Capítulo VI

A Rugosidade Eletrônica

1. Introdução.

Assim como a rugosidade topográfica está associada ao grau de "desordem" que uma superfície apresenta, podemos definir a rugosidade eletrônica como um parâmetro associado também à "desordem", mas do campo elétrico. Pode-se dizer que uma superfície é totalmente plana quando não tem rugosidade. O equivalente para a rugosidade eletrônica nula seria quando uma distribuição espacial de vetor campo elétrico é uniforme e paralela.

Na rugosidade eletrônica o parâmetro genérico γ , descrito no item quantificação de rugosidades, ao invés de estar associado ao espaço (ou alturas), esta associado ao valor do campo elétrico local.

A rugosidade eletrônica é a medida da perturbação do vetor campo elétrico. Esta perturbação é definida a partir da distribuição do vetor campo elétrico do capacitor MOS real em relação à do Capacitor Ideal.

Capacitor MOS ideal é um capacitor com as interfaces Si-SiO₂ e SiO₂-Al planas (sem rugosidades) e paralelas, sendo que a espessura do dielétrico d_{ox} é muito menor que as dimensões do eletrodo de porta W , veja Figura VI-1; enquanto que o capacitor real é aquele com interfaces rugosas, com cargas fixas, com precipitados, impurezas, etc..

Em um capacitor ideal os vetores campos elétricos são todos paralelos entre si e

perpendiculares às superfícies das interfaces, havendo, nas bordas, uma ligeira perturbação que é considerada desprezível, veja Figura VI-1 e VI-2. Já, num capacitor real a distribuição espacial do vetor campo elétrico pode ser totalmente diversa daquela do capacitor ideal e esta diferença pode ser atribuída a vários fatores, tais como: precipitados no interior do dielétrico ou nas vizinhanças, cargas fixas, rugosidade topográfica das interfaces.

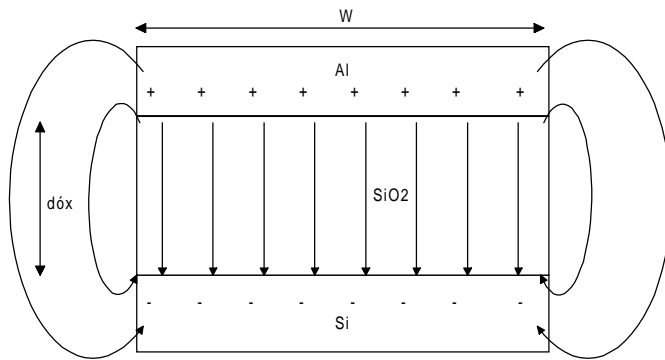


Figura VI-1: Capacitor com placas planas e paralelas e a distribuição do campo elétrico.

A Figura VI-2 mostra um histograma de frequência de intensidades dos campos elétricos locais no interior e nas vizinhanças do dielétrico em um capacitor ideal com $d_{ox} = 20$ nm, no qual foi aplicado um potencial de porta de 24 V. Neste histograma podemos constatar duas "populações" distintas: uma com campos de baixas intensidades, que vai de zero a 2 MV/cm, e uma outra com altas intensidades, próxima à 12 MV/cm.

Neste histograma podemos observar que a população referente a campos com baixas intensidades é relativamente grande, aproximadamente 30%, está associada ao campo elétrico local dentro do silício já que os campos elétricos nas vizinhanças do dielétrico também foram considerados na construção do histograma. A porcentagem referente a esta população está relacionada ao número de pontos na região do silício em relação ao número total de pontos.

A população referente aos campos elevados é atribuída aos campos elétricos locais no meio dielétrico. Neste caso, em que o capacitor é ideal, a dispersão dos elementos desta população é praticamente nula, pois os valores estão concentrados no valor 11,7 MV/cm,

resultando em uma distribuição delta de Dirac, com desvio padrão zero.

O desvio padrão, da população referente ao campo elétrico local no dielétrico, é uma quantificação da rugosidade eletrônica. Na população referente aos campos elétricos no silício poderá ser definida também uma rugosidade eletrônica análoga.

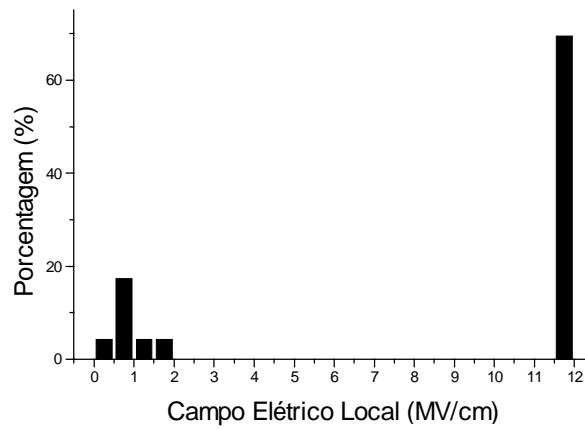


Figura VI-2: Distribuição das intensidades dos campos elétricos no dielétrico e nas vizinhanças em um capacitor MOS ideal.

Na Figura VI-2 o valor do campo elétrico dentro do dielétrico foi de 11,7 MV/cm, ao invés de 12 MV/cm, que seria de se esperar devido à relação $|\vec{\mathcal{E}}| = \mathcal{E} = V_p/d_{\text{óx}}$. Esta diferença é explicada pela diferença da função trabalho do alumínio e do silício, fazendo com que haja um campo elétrico adicional, mesmo quando o V_p for nulo!

Na Figura VI-3 é mostrado um histograma de frequência dos campos elétricos locais de um capacitor simulado com precipitado, cargas fixas e rugosidades nas interfaces. O valor médio para a população referente aos campos no dielétrico foi de 13,0 MV/cm, o desvio padrão foi de 1,9 MV/cm e o máximo valor do campo elétrico encontrado no capacitor foi de 23,4 MV/cm.

A rugosidade eletrônica, como foi definida acima, poderá ser determinada através de simulação do capacitor MOS, como foi feito acima, ou através de um arranjo experimental em que é utilizado o microscópio de tunelamento ou de força atômica. Neste caso teremos um eletrodo com dimensões atômicas, podendo assim determinar o campo elétrico local com resolução de Ångströms.

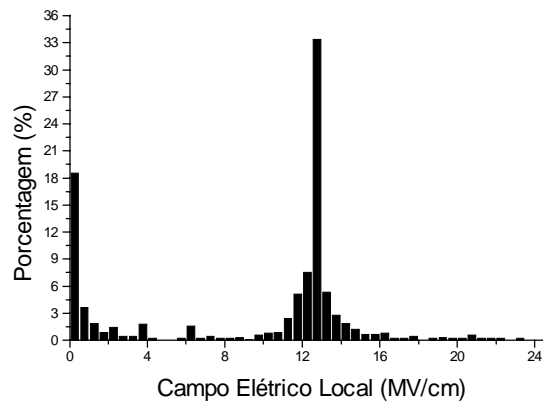


Figura VI-3: Distribuição das intensidades dos campos elétricos no dielétrico e nas vizinhanças em um capacitor MOS simulado: com precipitados, cargas de interface e rugosidades.

Este novo parâmetro, a rugosidade eletrônica, pode vir a ser bastante importante na determinação do rendimento de dispositivos microeletrônicos, assim como na análise de testes de rupturas de dielétricos através da correlação dos defeitos estruturais, químicos e elétricos presentes no dielétrico com as características elétricas do dispositivos construídos a partir da mesma.

2. Uma definição matemática

O campo elétrico local é dado pela seguinte relação:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla}\phi \quad [\text{VI-1}]$$

Considerando um sistema bi-dimensional teremos:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\hat{j}\right) \quad [\text{VI-2}]$$

que podemos escrever como:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\hat{j}\right) \quad [\text{VI-3}]$$

colocando em evidência o fator $\partial\phi/\partial x$ teremos:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial\phi}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\hat{i} + \hat{j}\right) \quad [\text{VI-4}]$$

Para o caso de um capacitor MOS com potencial de porta $-V_p$ e considerando que as duas interfaces $\text{SiO}_2\text{-Al}$ e $\text{SiO}_2\text{-Si}$ são equipotenciais, poderemos fazer as seguintes aproximações:

$$\partial\phi \cong \Delta\phi = -V_p$$

e

$$\partial y \cong \Delta y = d_{\text{loc.}}$$

onde $d_{\text{loc.}}$ é a espessura local do óxido. Teremos, a partir da Equação VI-4, a seguinte relação:

$$\vec{\mathcal{E}} \cong -\frac{\Delta\phi}{\Delta y}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\hat{i} + \hat{j}\right) \quad [\text{VI-5}]$$

ou seja,

$$\vec{\mathcal{E}} \cong \frac{V_P}{d_{loc}} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \hat{i} + \hat{j} \right) \quad [\text{VI-6}]$$

A equação anterior é referente a um capacitor metal-isolante-metal ideal. Veja no capítulo II seção 2.8 a discussão abordando a definição da espessura local do óxido.

A distância d_{loc} que separa as duas interfaces $\text{SiO}_2\text{-Al}$ e $\text{SiO}_2\text{-Si}$ é a espessura local do óxido. A diferença de potencial entre as duas interfaces, que são equipotenciais, é fixa e é igual a $-V_P$. O fator $\partial y/\partial x$ dá a derivada local da curva que descreve a interface $\text{SiO}_2\text{-Si}$, considerado, neste caso, a outra interface, $\text{SiO}_2\text{-Al}$, plana.

A Equação VI-6 pode ser analisada como sendo influenciada por dois fatores:

- a) Afinamento local do óxido dado pelo fator V_P/d_{loc} .
- b) Efeito ponta que é dada pela derivada, ponto a ponto, $\partial y/\partial x$.

3. Ruptura intrínseca e a rugosidade eletrônica.

O valor do campo de ruptura intrínseca do SiO_2 tem aumentado com o avanço tecnológico. Os principais motivos foram:

- a) melhores salas limpas: classe 1000, 100, 10 e 1 (Japão).
- b) maior controle dos processos, obtendo estruturas sem defeitos como "stacking fault", precipitados...
- c) maior pureza da matéria prima empregada na produção dos dispositivos, tais como: gases e produtos químicos de elevadíssimas pureza, lâminas de alta qualidade,
- d) desenvolvimento de métodos de eliminação, ou neutralização, de defeitos e impurezas presentes no dispositivo, tais como: recozimento, sinterização e

limpezas.

- e) o afinamento das espessuras dos filmes de óxido de silício resultou também numa melhora das qualidades de ruptura do dielétrico. Em parte, isto pode ser um resultado da eliminação dos defeitos de volume pelo afinamento do óxido.

Todos os fatores citados anteriormente tem contribuído para a diminuição da rugosidade eletrônica. Poderíamos até dizer que este campo de ruptura intrínseca do SiO₂, que na literatura varia a cada aperfeiçoamento tecnológico, e que "teoricamente" deveria depender apenas das características intrínsecas do material SiO₂, pode ser microscopicamente redefinido. O campo de ruptura microscópico seria fixo e dependeria apenas das características intrínsecas do material SiO₂ (das ligações Si-O).

4. Rugosidade eletrônica versus rugosidade topográfica

A partir da Equação VI-6 podemos obter o módulo do vetor campo elétrico, que será dado por:

$$\mathcal{E} = |\vec{\mathcal{E}}| = \frac{V_p}{d_{loc}} \sqrt{\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + 1} \quad [\text{VI-7}]$$

usando esta equação e considerando a curva mostrada na figura seguinte, de d_{loc} vs. X , obtemos as derivadas $dy/dx = dd_{loc}/dx$, substituindo, ponto a ponto, na Equação VI-7 e com $V_p = 24 \text{ V}$, teremos os campos elétricos, como mostram os gráficos da Figura-4. Nesta simulação estamos supondo que a uma certa distância d_{ox} da interface rugosa existe uma linha de equipotencial perfeitamente horizontal.

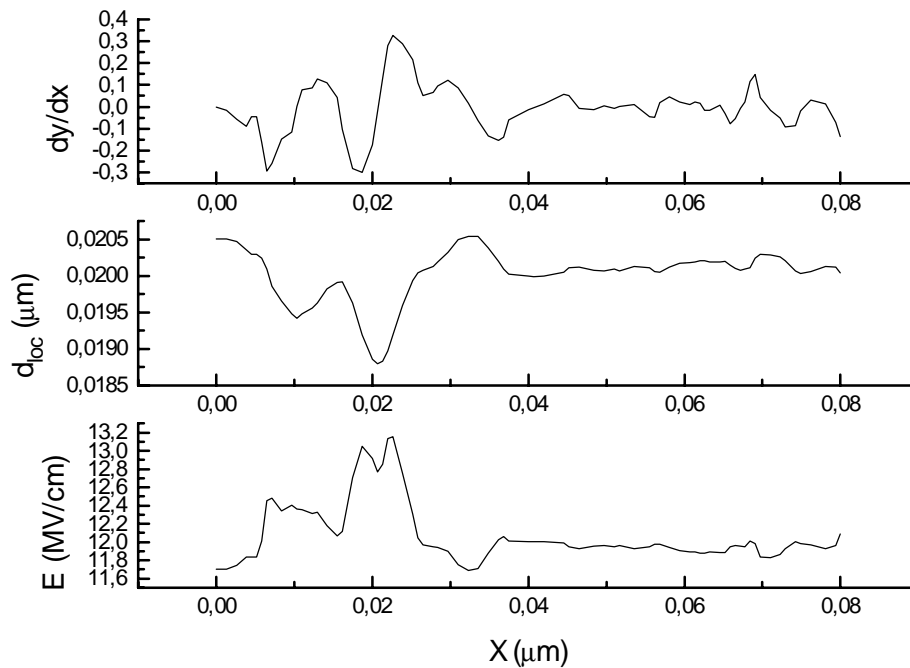
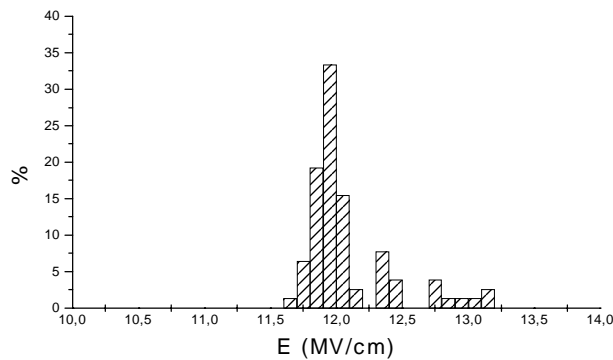


Figura VI-4: Campo elétrico (\mathcal{E}), espessura local do óxido (d_{loc}) e dy/dx em função de X . d_{loc} foi obtido por AFM, dy/dx é a derivada da curva d_{loc} versus X e \mathcal{E} foram obtidos a partir da Equação VI-7.

4.1 Estatística e distribuição de frequência do campo elétrico local.



Estatística

$$\mathcal{E} = 12,08145$$

$$\sigma_E = 0,33438$$

$$\mathcal{E}_{max} = 13,15323$$

$$\mathcal{E}_{min} = 11,68592$$

$$N_{pontos} = 78$$

Figura VI-5: Distribuição de frequência das intensidades dos campos elétricos ao longo da interface Si-SiO₂

O gráfico da Figura VI-5 mostra um histograma de valores de campos elétricos locais obtidos a partir da interface mostrada na Figura 4 e assumido que:

$$\partial\phi/\partial y \cong -V_p/d_{loc}. \quad [VI-8]$$

ou seja, que o gradiente de potencial é constante em todos os pontos da interface. Na verdade o gradiente do potencial não é constante, sendo maior perto das pontas, incrementando ainda mais o efeito das pontas, que já foi verificado considerando apenas o gradiente do d_{loc} .

5. Possíveis efeitos elétricos resultantes de defeitos estruturais.

Os principais defeitos estruturais do óxido de silício (SiO_2) capazes de induzir perturbações na distribuição do campo elétrico, numa estrutura MOS, podem ser classificados em duas categorias:

- a) Rugosidades topográficas nas interfaces SiO_2 -Si e SiO_2 -Al.
- b) Falha de estequiometria (SiO_x) e impurezas (metálicas).

5.1 Rugosidades topográficas.

As rugosidades topográficas causam:

- a) Estreitamento local da espessura do óxido de silício, aqui chamado de rugosidade positiva: aumento do campo elétrico nas vizinhanças.
- b) Alargamento local da espessura do óxido, aqui chamado de rugosidade negativa: perturbação do campo elétrico nas vizinhanças.
- c) Provável concentração local de cargas positivas: incremento da intensidade do campo elétrico nas vizinhanças.

5.2 Falha de estequiometria e impurezas.

A existência de falhas de estequiometria e de impurezas no óxido de silício acaba induzindo a formação de:

- a) Regiões com rigidez dielétrica inferior à do SiO_2 .
- b) Regiões com diferentes permissividades dielétricas (ϵ), criando perturbações na distribuição do campo elétrico local, com possibilidade de originar um campo elétrico superior à rigidez dielétrica de um dos materiais que constituem o dielétrico e, assim, gerar a ruptura do dielétrico [1-3].
- c) Regiões com diferentes larguras da banda de energia proibida - "band gap" (E_G) - gerando elevado gradiente de potencial o que resultará num campo elétrico que poderá, novamente, exceder à rigidez dielétrica de um dos materiais, provocando a ruptura do dielétrico [1-3].

6. Validade das equações de Maxwell na escala microscópica.

Reitz [4] mostra a aplicação das equações de Maxwell para meios microscópicos. A aplicação é referente à polarizabilidade de átomos, aplicável também às moléculas e ligações em uma rede amorfa, como é o nosso caso. Lembremos que a polarização em excesso é que causa a ruptura do dielétrico. O campo elétrico aplicado sobre a ligação é tão intenso que "arranca" o elétron do átomo, quebrando, assim, a ligação e iniciando, desta forma, o processo de destruição do dielétrico a nível macroscópico, com alta injeção de corrente e aumento de temperatura (efeito Joule).

Jackson [5] aborda o problema da polarização em escala microscópica de uma forma bem mais rigorosa. O autor discute a necessidade de considerações de natureza quântica para um tratamento completo e rigoroso mas afirma que, em casos simples como um material isotrópico e sem polarização intrínseca, como é o caso do óxido de silício, a

abordagem a partir de um modelo clássico é suficiente.

Quanto à continuidade do vetor campo elétrico na escala subatômica, esta é uma decorrência da aplicação das equações de Maxwell:

- a) O campo elétrico resultante em cada ponto, que irá polarizar o átomo (ou a ligação Si-O, como o nosso caso), é resultante de duas componentes: i) campo elétrico aplicado externamente; ii) campo elétrico resultante da polarização de todos os átomos (ou ligações Si-O) *exceto* a do átomo no ponto considerado. Isto resultará em um campo elétrico contínuo em todos os pontos do meio dielétrico.
- b) O óxido de silício pode ser considerado um meio homogêneo e isotrópico, exceto quando próximo às interfaces e defeitos. Neste caso, a aplicação da continuidade do vetor deslocamento dielétrico \vec{D} , dada pela Equação VI-9, resolve o problema:

$$\vec{D} = \epsilon \cdot \vec{E} \quad \text{[VI-9]}$$

Não foi mencionado explicitamente, nas análises e nos gráficos, a presença de campos extremamente elevados no interior da camada eletrônica, próximo ao núcleo do átomo, porque esta componente do campo elétrico não acrescenta nada à descrição. Ele foi introduzido na análise implicitamente, através do valor do campo elétrico de ruptura que está relacionado com a coesão do átomo, ou das ligações, sendo que esta está associada às intensidades e distribuições espaciais destes campos elétricos no interior do átomo.

7. Bibliografia

- 1 VALENTE LOPES, M.C.; HASENACK, C.M. The Impact of Si-SiO₂ Interface Asperities on Breakdown Characteristics of Thin Gate Oxides. J. Electrochem. Soc., Vol.139 (10), p.2909 (1992)
- 2 VALENTE LOPES, M. C.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. Numerical Calculations of the Electrical Effects Induced by Structural Imperfections on MOS Capacitors. J. Electrochem. Soc., Vol.141 (6), p.1621 (1994).

- 3 VALENTE LOPES, M.C.; SANTOS, S.G.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. The Influence of Si-SiO₂ Interface Roughness on Electronic Roughness. J. Electrochem. Soc., Vol. 143 (3) p.1021 (1996).
- 4 REITZ, J. R; MILFORD, F.J.; CHRISTY, R.W Foundations of Electromagnetic Theory, Chap. 5, Addison-Wesley Publishing Co., New York (1982)
- 5 JACKSON, J.D. Classical Electrodynamics; Chap.4, John Wiley & Sons, New York (1983).

Capítulo VII

Procedimentos para a Medida da Rugosidade da Superfície de Si/SiO₂

1. Introdução.

Objetivo deste capítulo foi de:

- a) Analisar a rugosidade da interface Si/SiO₂ em diferentes escalas, ou seja, com diferentes áreas de análise.
- b) Observar como se correlacionam os diferentes parâmetros utilizados para quantificar a rugosidade nas diferentes áreas de análise.
- c) Analisar a evolução da rugosidade com o aumento da espessura do filme do óxido de silício.
- d) Comparar a diferença de rugosidade, para um mesmo tempo de oxidação, em lâminas com orientações cristalinas diferentes ((100) e (111)).

2. Método de análise

Foram utilizadas seis lâminas tipo p com dopagem de 10^{15} cm^{-3} . Quatro lâminas tinham orientação (100) e duas orientação (111). Destas seis lâminas, uma (100) foi mantida

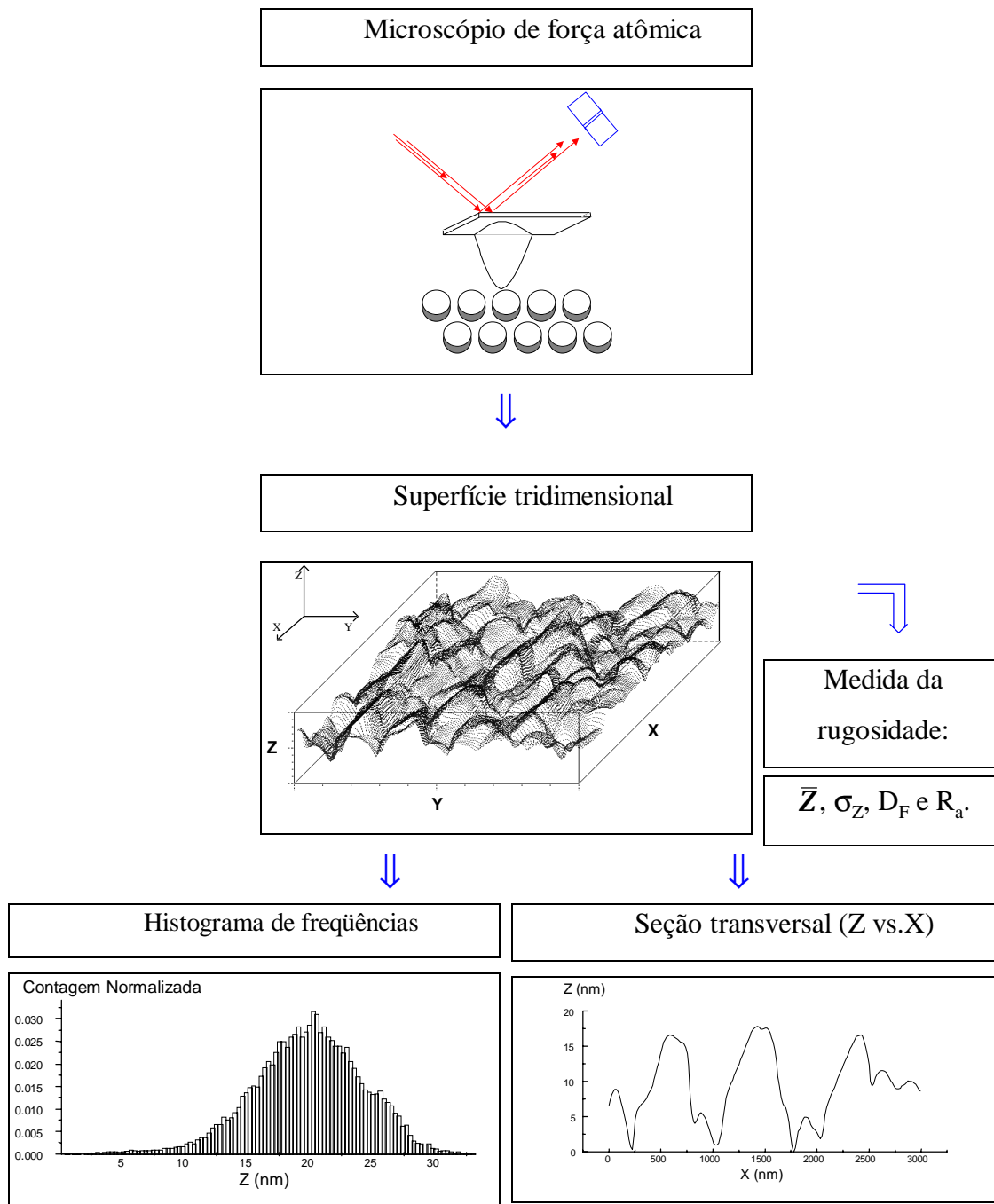


Figura VII-1: Procedimento utilizado nas medidas e análises das rugosidades das interfaces Si/SiO₂.

virgem, duas ((100) e (111)) foram oxidadas durante 20 minutos, duas ((100) e (111)) foram oxidadas durante 40 minutos e uma (100) foi oxidada durante 70 minutos.

Após a etapa de oxidação, cada uma das seis lâminas foi analisada pela microscopia de força atômica (Figura VII-1). Suas topografias foram determinadas a partir de diferentes áreas de análise: $5 \times 5 \text{ nm}^2$, $50 \times 50 \text{ nm}^2$, $100 \times 100 \text{ nm}^2$ e $500 \times 500 \text{ nm}^2$.

A partir da superfície tridimensional (X,Y,Z) foram obtidos os seguintes parâmetros:

- a) Parâmetros da rugosidade: \bar{Z} (altura média), σ_Z (desvio padrão da altura), D_F (dimensão fractal) e R_a (razão das áreas).
- b) Histograma de freqüência da altura Z.

Seção transversal ao longo da direção X. A Figura VII-1 apresenta o esquema deste procedimento.

Com este procedimento são obtidos as medidas de rugosidades, histograma de freqüência de Z, e a seção transversal de cada uma das seis amostras estudadas, em quatro áreas de análises diferentes.

3. Oxidação das lâminas

Inicialmente as lâminas foram submetidas ao seguinte processo de limpeza:

- a) limpeza Piranha
- b) banho por 100 segundos em HF (2,3% Vol.),
- c) RCA e
- d) banho por 100 segundos em HF.

A limpeza Piranha consiste em: fervura durante 15 minutos em uma solução de 4 H_2SO_4 : 1 H_2O .

A limpeza RCA desenvolvida Kern [1] e consiste de duas etapas:

- I) Banho durante 10 a 15 minutos na solução $\text{NH}_4\text{OH}/\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ com proporção volumétrica de 1:1:5 na temperatura de 70°C a 90°C.
- II) Banho durante 10 a 15 minutos na solução $\text{HCl}/\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ com proporção volumétrica de 1:1:5 a uma temperatura de 70°C a 90°C.

Após a limpeza, as lâminas foram submetidas a oxidação térmica seca em um forno convencional, na temperatura 900°C. O tempo de oxidação foi diferente para que existisse uma diferença de espessura entre as diferentes amostras. Os tempos adotados foram 0 min. (virgem), 20 min., 40 min. e 70 min.

A oxidação é dita seca quando a concentração de H_2O no ambiente for menor que 1 ppm, e é *úmida* quando for maior que 25 ppm [2].

4. Medidas de microscopia de força atômica

As lâminas foram clivadas em quadrados de 1×1 cm², pois este é o tamanho máximo do porta-amostra do microscópio de força atômica utilizado. A amostra teve o filme de SiO_2 decapado, utilizando HF (ácido fluorídrico - 1.25 M), para expor a superfície do silício. Na decapagem do SiO_2 a topografia da interface Si/ SiO_2 não é alterada [3-6] porque o HF ataca apenas o SiO_2 , deixando a superfície do silício intacta e permitindo assim medir a topografia da interface Si/ SiO_2 .

O tempo de imersão da lâmina com SiO_2 na solução de HF depende da concentração da solução. Na prática a decapagem completa do filme de SiO_2 é verificada mergulhando a lâmina em recipiente com água. Se a secagem for completa (sem nenhuma gotícula de água) significa que a decapagem foi feita. A fundamentação deste teste é que a superfície do silício é hidrofóbica, enquanto que a do SiO_2 é hidrofílica: enquanto houver SiO_2 na lâmina haverá algumas gotículas de água molhando a lâmina, após a imersão da lâmina na água [7, 8].

Posteriormente foi feita uma limpeza tipo RCA, com a finalidade de eliminar agregado de partícula de fragmentos nanoscópicos de silício, resultantes da clivagem, assim como das partículas resultantes do processo da decapagem do SiO_2 por HF. Toda esta etapa foi feita dentro de uma capela química classe 100 (100 partículas por m^3) e ao término a amostra, decapada e limpa, foi acondicionada em um dissecador à vácuo. O acondicionamento em um recipiente a vácuo é importante para que durante o transporte da lâmina, da capela (onde foi feita a limpeza) até o local onde é feita a medida por AFM, o silício não volte a oxidar ao entrar em contato com o oxigênio da atmosfera. Este óxido, formado espontaneamente devido à reação entre a superfície altamente reativa do silício e o oxigênio da atmosfera, é dada a denominação de óxido nativo. Esta reação espontânea cessa após o óxido atingir a espessura de aproximadamente 2 nm [9], pois o próprio óxido passiva as ligações expostas da superfície do silício, não permitindo o acesso de outras moléculas de oxigênio à superfície do silício e interrompendo o processo de oxidação.

Durante as medidas das topografias das interfaces do Si/ SiO_2 por AFM a superfície do silício teria que ficar exposta ao ambiente atmosférico (com oxigênio), propiciando com isso o reaparecimento do óxido nativo. Em testes com lâminas virgens, realizados antes do início das medidas de topografia da interface Si/ SiO_2 , foi observado que depois de aproximadamente cinco minutos de exposição da superfície do silício ao ambiente

atmosférico começa a aparecer ilhas de óxido nativo, que vão evoluindo até formar uma monocamada.

Para que o processo de crescimento de óxido nativo não atrapalhasse a determinação da topografia da interface Si/SiO₂ foi feito o seguinte teste: foi aplicado um jato de nitrogênio na superfície da lâmina desde o momento em que esta foi retirada do dissecador até o final das medidas (intervalo de tempo em que a lâmina fica exposta ao oxigênio da atmosfera). A idéia da aplicação do jato de nitrogênio (N₂) é diminuir a pressão parcial do oxigênio na superfície reativa do silício, diminuindo assim a taxa de oxidação [9-14]. O resultado deste teste foi uma diminuição sensível na taxa de formação do óxido nativo. O procedimento de aplicar um jato de N₂ na superfície do silício, enquanto estivesse exposto ao ambiente atmosférico, foi mantido em todas as medidas posteriores. Além do jato de nitrogênio, as medidas eram realizadas com a máxima rapidez, diminuindo a probabilidade do óxido nativo vir a influenciar as medidas de topografia.

Um outro teste realizado foi a decapagem do SiO₂ por HF imediatamente antes de fazer as medidas de topografia por AFM (ou seja, não passou pela etapa de limpeza RCA). O resultado não foi satisfatório porque havia uma grande quantidade de particulados resultantes da clivagem e dos resíduos da solução de HF. Isto comprovou a necessidade da etapa de limpeza RCA, que é a etapa que elimina os agregados de partículas.

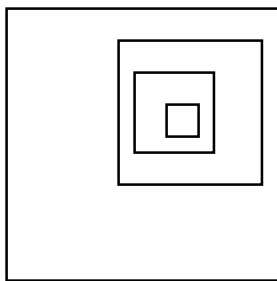


Figura VII-2: Ilustração das posições relativas das diferentes áreas de análise, utilizadas neste estudo.

As áreas de análise, em que foram medidas as topografias, foram padronizadas para possibilitar *comparações quantitativas* entre os diferentes conjuntos de amostras analisados. As áreas padronizadas utilizadas na varredura das amostras foram: 500x500 nm², 100x100 nm², 50x50 nm² e 5x5 nm². Durante a análise da amostra, foi possível escolher um grande número de regiões para realizar a captura da imagem representativa da amostra. As áreas de análises eram sempre escolhidas dentro das medidas tomadas anteriormente, ou seja, as topografias com áreas de análises menores estão contidas dentro das maiores, veja a Figura VII-2 a ilustração das posições relativas das áreas de análises.

5. Análise matemática

O armazenamento da imagem tridimensional (topografia) capturada pelo microscópio foi feito na forma de arquivos que podem ter duas resoluções diferentes: 160.000 ou 40.000 pontos. O arquivo é constituído de duas partes: o cabeçalho e o corpo. O cabeçalho contém informações de como os dados do corpo do arquivo devem ser interpretados; e o corpo é constituído de uma seqüência de números em binário¹, que são os valores codificados (X, Y, Z) da topografia.

Os dados obtidos por este microscópio consistem em uma matriz quadrada M_{NN} , com $N = 200$ ou 400 . A superfície 3D, com seus pontos (X, Y, Z), é obtida através da matriz M_{NN} através das seguintes regras de conversão:

$$Z_{ij} = M_{ij} * z_factor \quad X = i \delta_{xy} \quad Y = j \delta_{xy} \quad [\text{VII-1}]$$

sendo M_{ij} o elemento de matriz da linha i e coluna j . Observe que da matriz de números binários M_{NN} resultará, após a aplicação da regra de conversão, a matriz da números

¹ havia uma opção de armazenamento em ASCII, que foi utilizada apenas para testes.

racionais Z_{NN} . O valor de z_factor , assim como de δxy vêm no cabeçalho do arquivo de dados.

Foi desenvolvido um *software* para interpretar as informações contidas nos arquivos, obter a medida da rugosidade, determinar o histograma de frequência das alturas (Z) e obter cortes transversais da topografia. Este programa foi adaptado para máquinas de grande porte, como estações SUN e SILICON GRAPHICS, para facilitar a obtenção de imagens e de alguns parâmetros que exigiam maior capacidade de CPU ou de recursos gráficos.

Através deste software foram obtidas as topografias da interface Si/SiO₂ e Al/SiO₂ em forma de uma superfície tridimensional (X, Y, Z). A partir destes pontos (X, Y, Z) foram obtidos histogramas de frequência das alturas Z, cortes transversais (X, Z) e a quantificação das rugosidades (\bar{Z} , σ_z , DF, R_a). Veja na Figura VII-1 um diagrama esquemático dos procedimentos utilizados nesta etapa.

5.1 Medida da rugosidade

O valor médio (\bar{Z}) e o desvio padrão σ_z das alturas são obtidos através das seguintes relações:

$$\bar{Z} = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N Z_{ij} \quad [\text{VII-2}]$$

onde N^2 é o número de pontos na matriz (a matriz é N x N) e Z_{ij} são os valores das alturas dadas pela relação [VII-1].

O desvio padrão σ_z é obtido por:

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{1}{N^2 - 1} \sum_{i,j=1}^N (Z_{ij} - \bar{Z})^2} \quad [\text{VII-3}]$$

A obtenção dos parâmetros D_F e R_a estão descritas na seção 2.5 e 2.6, do capítulo IV.

As espessuras dos óxidos ($d_{\text{óx}}$) foram medidas pela técnica de elipsometria.

5.2 Histograma de frequência

Foram construídos também os histogramas de frequência a partir das matrizes de dados digitalizados Z_{NN} , sendo N igual a 200 ou 400, resultando em 40.000 ou 160.000 pontos, respectivamente. Os histogramas construídos a partir de amostras com diferentes áreas de análise e/ou diferentes números de pontos apresentaram dificuldades de comparação direta pois:

- a) os intervalos de contagem (larguras das barras do histograma) para L igual a 500 nm são muito diferentes dos referentes ao L igual a 5 nm; e
- b) os histogramas construídos a partir de amostras com diferentes números de pontos resultarão em contagens diversas para um determinado intervalo de contagem (larguras das barras do histograma).

Para que os histogramas com números de pontos e intervalos de contagem diferentes pudessem ser comparados, foram feitas normalizações nas frequências de contagem. A normalização consistiu em multiplicar os valores de frequência por um fator ($1/A_H$), de forma tal que a área sob o histograma fosse igual a unidade. A Figura VII-3 mostra o perfil típico de um histograma construído a partir da topografia de uma superfície de Si/SiO₂.

Histograma de Freqüência

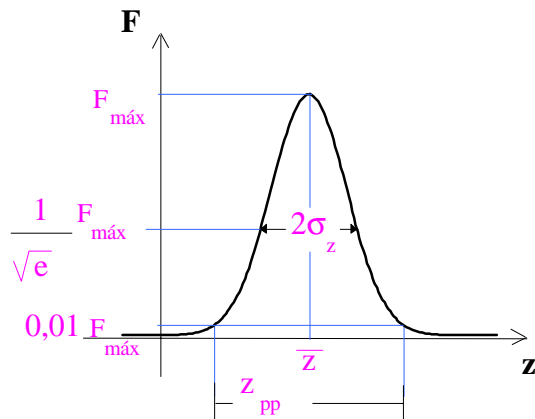


Figura VII-3: Perfil típico dos histogramas de freqüência das alturas Z da interface Si/SiO_2 . A interpretação geométrica dos parâmetros estatísticos σ_z , \bar{Z} e Z_{pp} são ilustrados no histograma, que foi ajustada para uma distribuição normal.

A grande maioria dos histogramas obtidos, a partir da superfície da interface Si/SiO_2 , podiam ser ajustados por uma função distribuição normal. O ajuste dos pontos do histograma por uma função distribuição normal permite a eliminação da influência de valores extremos (ruídos) na obtenção dos parâmetros estatísticos. A função distribuição normal é definida como:

$$F(z) = F_{Máx} e^{-\left(\frac{(z-\bar{z})^2}{2\sigma^2}\right)} \quad \text{[VII-4]}$$

sendo que $F_{Máx}$ é dado por:

$$F_{Máx} = \frac{1}{\sigma_z \sqrt{2\pi}} \quad \text{[VII-5]}$$

Na Figura VII-3 é mostrada a interpretação geométrica para cada um dos parâmetros estatísticos associados ao histograma de uma distribuição normal. O valor de Z correspondente a freqüência máxima do histograma ($F_{Máx}$) é igual ao valor médio de Z (\bar{Z}).

Na distribuição gaussiana a moda é igual ao valor médio. O desvio padrão é dado pela metade da largura do histograma quando o valor da frequência for igual a frequência máxima multiplicada pelo fator $1/\sqrt{e}$ - sendo "e" o número neperiano que é igual a 2,7183 - ($F \cong 0,6065 F_{Máx}$). Com o objetivo de eliminar valores extremos (ruídos), foi definido que o valor de pico a pico de Z é igual a largura do histograma quando a frequência for 1% da frequência máxima ($F \cong 0,01 F_{Máx}$), veja a ilustração da idéia na Figura VII-3. A maioria dos histogramas foram satisfatoriamente ajustados por uma distribuição normal.

5.3 Seções transversais

Os cortes transversais foram obtidos a partir da matriz Z_{NN} . Estes cortes poderão tanto corresponder a uma linha como a uma coluna da matriz. Outra possibilidade seria obter cortes ao longo das diagonais da matriz, ou até mesmo numa direção arbitrária. Neste trabalho, os cortes utilizados foram ao longo das colunas da matriz Z_{ij} , e geralmente a linha foi tomada exatamente no meio da matriz, ou seja, na coluna $N/2$.

A utilidade da representação bidimensional da topografia da superfície é que com esta representação há um maior contraste entre as diferentes topografias obtidas, permitindo uma melhor visualização das diferenças nas rugosidades.

Este cortes foram colocados na forma tabular permitindo a exportação desta tabela para outros aplicativos.

6. Bibliografia

- 1 KERN, W. The Evolution of Silicon Wafer Cleaning Technology. J. Electrochem. Soc., Vol. 137 (6) (1990).
- 2 IRENE, E.A. J. Electrochem. Soc., Vol.121, p.1613 (1974).

- 3 HAHN, P.O.; HENZLER, M. IBM Research Report RC10355, Solid State Physics, IBM Research Division, Editor, San Jose, (1983).
- 4 HAHN, P.O.; LAMPERT, I.; SCHNEGG, A. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Boston, 1987.
- 5 NIWA, M; et al. Appl. Surf. Sci., Vol.60/61, p.39 (1992).
- 6 KHAIKIN, M.S.; et al. JETP Lett., Vol.40, p.245 (1986).
- 7 ARCHER, R.J. J. Electrochem. Soc., Vol.104, p.619 (1957).
- 8 WILLIAMS, R.; GOODMAN, A.M. Appl. Phy. Lett., Vol.25, p.531 (1974).
- 9 NICOLIAN, E.H.; BREWS, J.R. MOS Physics and Technology, John Wiley & Sons, New York (1982).
- 10 DEAL, B.E.; GROVE, A.S. J. Appl. Phys., Vol.36, p.3770 (1965).
- 11 BURKHARDT, P.J.; GREGOR, L.V. Trans. Met. Soc. - AIME, Vol.236, p.299 (1966).
- 12 KAMIGAKI, Y.; ITOH, Y. J. Appl. Phys., Vol.48, p.2891 (1977).
- 14 DEAL, B.E; HELMS, C.R. The Physics and Chemistry of SiO₂ and Si/SiO₂ Interface, Plenum Press, New York (1993).

Capítulo VIII

Procedimentos para a simulação de capacitores MOS com defeitos idealizados

1. Introdução

Para a realização das simulações do funcionamento dos capacitores MOS foi utilizado o simulador de dispositivos MEDICI [1]. Foi adotado um capacitor-matriz, que será denominado neste trabalho de capacitor ideal. Este capacitor-matriz foi modificado através de inserção de diferentes defeitos estruturais, elétricos e de material, visando obter capacitores virtuais com características muito próximas aos capacitores reais. A fim de compreender melhor o efeito elétrico individual de cada um dos diferentes defeitos estruturais que coexistem em um capacitor real, estes defeitos estruturais foram inseridos isoladamente nos capacitores-matriz. O efeito elétrico de dois ou mais defeitos estruturais coexistentes em um mesmo capacitor poderá ser estimado utilizando o princípio de superposição [2].

2. Estrutura do capacitor ideal

O capacitor ideal, ou capacitor-matriz, tem o substrato de silício do tipo p com concentração de dopagem de 10^{15} cm^{-3} e o óxido de porta com largura (W) de 50 nm e espessura (d_{ox}) de 20 nm. As interfaces Si/SiO₂ e SiO₂/Al são planas (sem rugosidades) e paralelas. Os dois eletrodos, o de porta e o de aterramento da lâmina, são de alumínio, veja

Figura VIII-1. Para maiores detalhes, veja discussão do capacitor ideal na parte teórica (seção 1 do capítulo VI).

Como o MEDICI simula dispositivos com no máximo duas dimensões, os capacitores simulados neste trabalho são bidimensionais. O sistema de referência tem a sua origem no canto superior esquerdo do capacitor (veja Figura VIII-1), sendo que o eixo y' é normal à superfície dos dois eletrodos e tem o sentido crescente em direção ao substrato de silício. Com isso, o eixo x' fica sendo paralelo à superfície dos eletrodos, crescendo da esquerda para a direita. Pode-se observar na Figura VIII-1 o sistema de eixos e a posição da origem dos eixos de coordenadas (0,0).

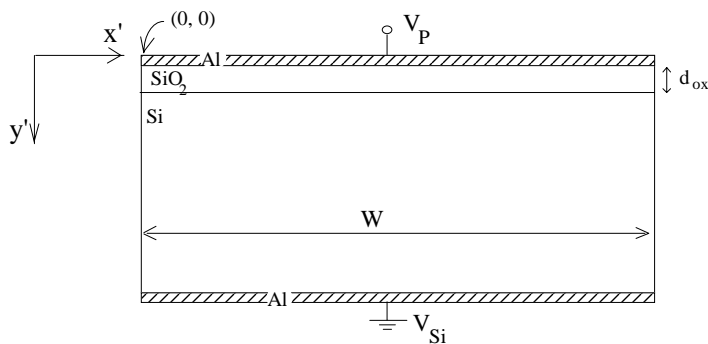


Figura VIII-1: estrutura esquemática do capacitor MOS ideal, ou capacitor-matriz.

Na maioria das simulações realizadas, o potencial aplicado no eletrodo de porta V_P foi fixado em -24 V, de modo que o capacitor sempre operasse em regime de acumulação. As simulações foram feitas em regime de acumulação porque, neste caso, todo o campo elétrico recai quase que exclusivamente sobre o dielétrico, enquanto que nos regimes de depleção e inversão o campo elétrico recairá também na região depletada do silício, o que pode criar incertezas na determinação do valor do campo elétrico no interior dielétrico (tanto nos testes experimentais como nos simulados o objetivo principal é determinar o campo elétrico). O módulo de V_P foi escolhido igual a 24 V porque essa diferença de potencial, aplicado num capacitor com dielétrico de espessura 20 nm, provoca um campo elétrico médio ($|\vec{\mathcal{E}}_m| = \mathcal{E}_M$) de 12,0 MV/cm, sendo este campo inferior ao campo elétrico de ruptura

intrínseca do SiO_2 determinado experimentalmente [3,4], que é de 13,25 MV/cm, porém suficientemente próximo ao campo de ruptura do dielétrico para possibilitar uma análise do funcionamento do capacitor durante o prenuncio do colapso final do dielétrico.

Na Figura VIII-2 é mostrada a estrutura das bandas de energia [5,6] do capacitor ideal construído virtualmente através de uma parametrização conveniente do simulador MEDICI. Os valores adotados para a permissividade dielétrica ϵ e para o E_G foram de 11,7 eV e 1,1 eV para o silício e 3,9 eV e 9 eV para o SiO_2 [7]. A altura da barreira de potencial do Al/ SiO_2 foi de 3,10 eV, enquanto que da interface Si/SiO_2 foi de 3,20 eV. Veja no apêndice A os valores utilizados na parametrização do capacitor ideal, assim como notas explicativas de como foram parametrizados os capacitores virtuais com defeito.

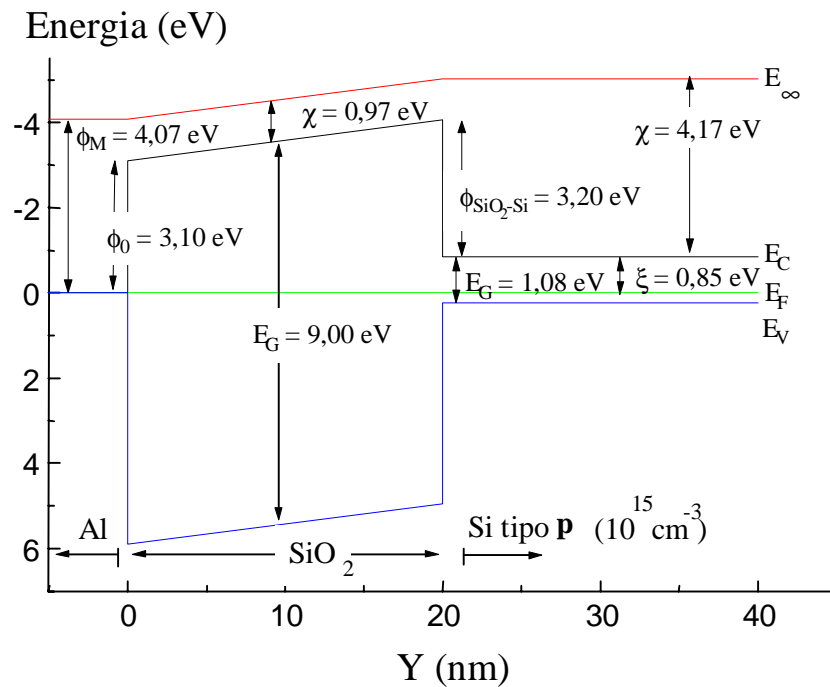


Figura VIII-2: Esquema da estrutura das bandas de energia do capacitor MOS ideal.

Um elemento bastante importante na parametrização é a definição de uma malha de nodos que se adeque a estrutura espacial do dispositivo simulado. Para isso,

foram definidos ao longo da estrutura simulada malhas com no mínimo 1700 nodos, distribuídos preferencialmente ao longo de regiões com maiores gradientes de potencial, ou seja, próximos às interfaces e aos defeitos. Veja na Figura VIII-3 a distribuição dos nodos próximo a um defeito na interface Si/SiO₂.

O número de nodos foi escolhido de modo tal que o aumento do mesmo não acarretasse numa mudança nas soluções obtidas, sendo este um critério de confiabilidade das soluções obtidas por simulação. A invariância da solução com o aumento do número de nodos é uma condição necessária, mas não suficiente, para que a solução obtida por simulação seja a solução verdadeira.

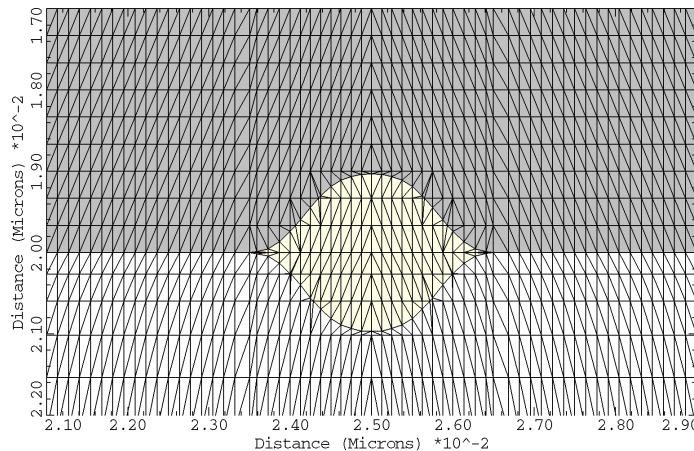


Figura VIII-3: Distribuição de nodos nas vizinhanças de um precipitado localizado na interface Si/SiO₂.

São nos nodos que são calculados os potenciais, campos elétricos, correntes, densidade de corrente, etc. Portanto, o que o simulador "verá" durante a simulação serão os nodos; se o simulador tiver que obter o valor de algum parâmetro fora destes nodos ele utilizará a interpolação ou extrapolação.

3. Simulação de capacitores com rugosidades positiva e negativa

A presença de rugosidades nas interfaces do SiO₂ está largamente documentada na literatura, como as obtidas pela técnica de microscopia eletrônica de alta resolução HRTEM

[8,9], microscopia de força atômica AFM [10-12] e microscopia de tunelamento STM [13].

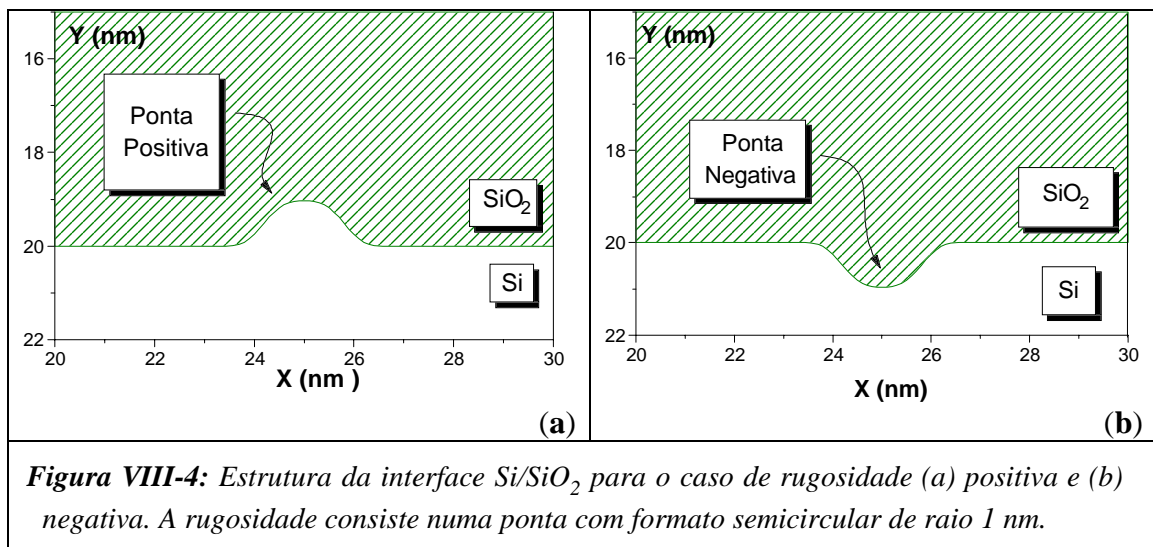
A influência da variação da espessura local do óxido, resultantes das rugosidades das interfaces do dielétrico, na perturbação do campo elétrico local (que chamamos nesta tese de rugosidade eletrônica), foi analisada partindo-se de duas rugosidades básicas, que será chamada nesta tese de rugosidade positiva e negativa. A classificação da rugosidade em positiva e negativa foi feita a partir da relação existente entre a espessura local do óxido (d_{loc}) com a espessura média do óxido (d_{ox}). A rugosidade é considerada positiva quando a espessura local do dielétrico for menor que a espessura do óxido; por outro lado, se a espessura local for maior que a espessura média, a rugosidade será considerada negativa.

$$d_{loc} < d_{ox} \quad (\text{rugosidade positiva})$$

$$d_{loc} > d_{ox} \quad (\text{rugosidade negativa}) \quad [\text{VIII-1}]$$

A Figura VIII-4a mostra a estrutura da interface Si/SiO₂ com uma rugosidade positiva, representada por uma protuberância convexa do Si em direção ao SiO₂. Esta rugosidade foi idealizada, e tem o formato semicircular de raio 1 nm.

Na Figura VIII-4b está representada a rugosidade negativa, na forma de uma deformidade côncava do substrato de Si em relação ao filme de SiO₂. A forma também é semicircular de raio 1 nm.



Os centros destes dois semicírculos são iguais. No sistema de referência do simulador

MEDICI, mostrado na Figura VIII-1, é $x' = 25$ nm e $y' = 20$ nm. Este ponto está exatamente sobre a interface Si/SiO₂ e na metade da largura do óxido de porta (W/2).

Com exceção da rugosidade, os dois capacitores (com rugosidade positiva e negativa) têm exatamente as mesmas características do capacitor ideal, mostrado na Figura VIII-1.

4. Efeito da curvatura de uma rugosidade topográfica na rugosidade eletrônica

A fim de determinar o efeito da curvatura de uma rugosidade topográfica na rugosidade eletrônica, foram feitas simulações de capacitores MOS com uma rugosidade positiva na interface Si/SiO₂ com formato semicircular, de raio R variável. Como o objetivo é apenas observar o efeito da curvatura da rugosidade, a espessura local d_{loc} mínima foi mantida fixa em todas as estruturas.

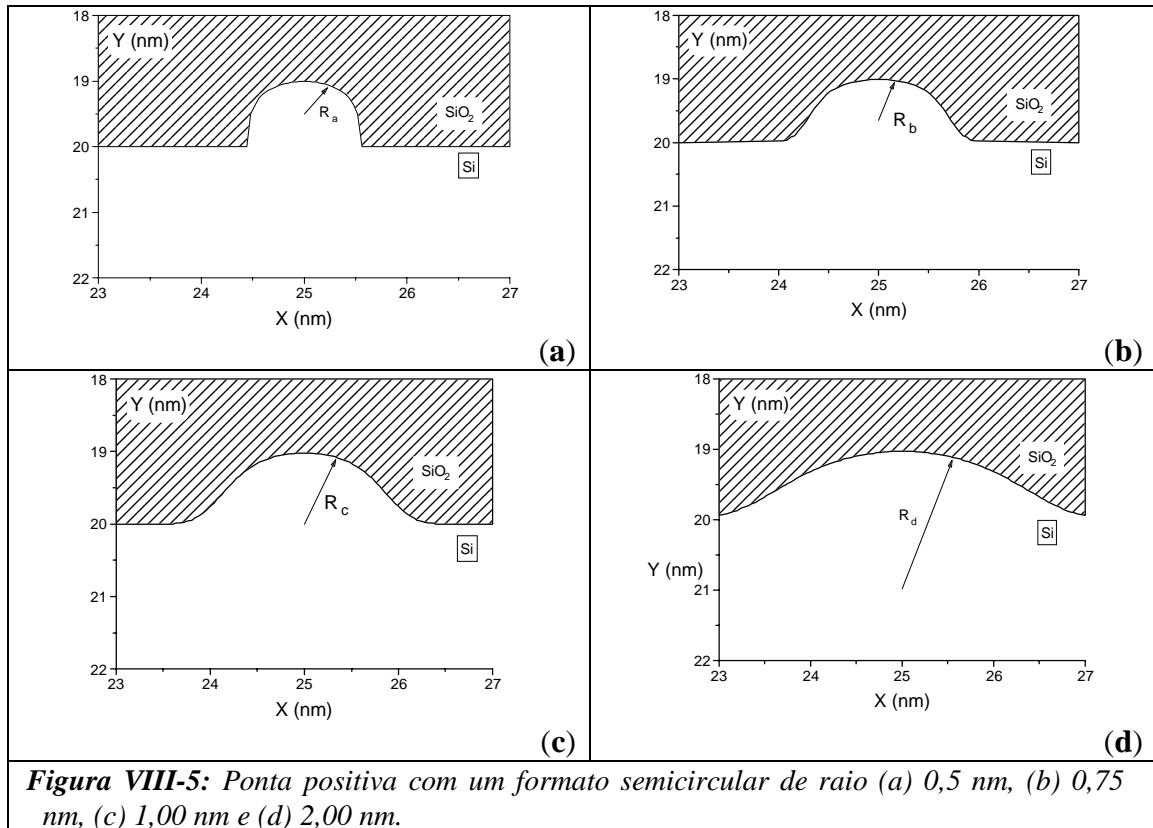
O valor de R foi variado conforme mostra a Tabela VIII-1 e as Figuras VIII-5a, VIII-5b, VIII-5c e VIII-5d mostram as interfaces com os diferentes raios de curvatura.

Tabela VIII-1: Tabela com os diferentes valores assumidos pelo raio de curvatura R, da rugosidade positiva, e da espessura local mínima do dielétrico d_{loc} .

Capacitor	R (nm)	d_{loc} mínimo (nm)
a	0,50	19,00
b	0,75	19,00
c	1,00	19,00
d	2,00	19,00

A ponta (uma semicircunferência de raio R) foi centralizada na posição $X = 25$ nm (veja Figura VIII-5). Já no eixo Y, o centro da semicircunferência foi posicionado de forma tal que, mesmo variando-se o raio R, a espessura mínima do óxido é mantida fixa em 19,00 nm. A manutenção do valor mínimo de d_{loc} em 19,0 nm, em todas as estruturas

simuladas, tem como objetivo minimizar a participação da variação da espessura local do óxido na variação do campo elétrico local.



Nesta série de simulações, onde foi estudada a influência da curvatura da rugosidade na perturbação do campo elétrico local (rugosidade eletrônica), não foi modificada nenhuma característica elétrica ou de material do capacitor-matriz, apenas a estrutura da interface Si/SiO₂.

5. Influência do potencial de porta na rugosidade eletrônica

Com o objetivo de analisar o efeito do potencial de porta na rugosidade eletrônica foram feitas simulações a partir de um capacitor com uma rugosidade positiva, igual ao descrito no item 2 deste capítulo (veja Figura VIII-6), no qual foram aplicados seis potenciais de porta diferentes: 0V, -5V, -10V, -15V, -20V e -25V.

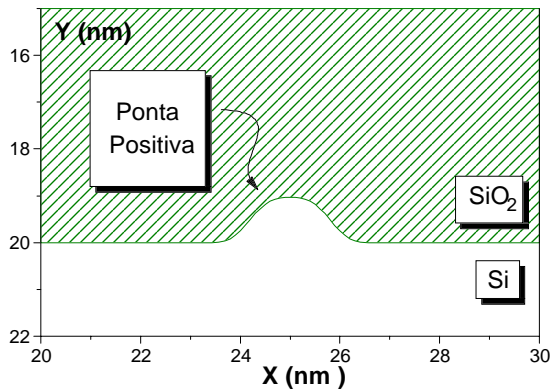


Figura VIII-6: Interface Si/SiO₂ com rugosidade positiva de um capacitor MOS que foi simulado aplicando diferentes potenciais de porta.

A idéia é observar se nas "pontas" o incremento do campo elétrico local se dará da mesma maneira que nas regiões planas, que é dada por:

$$\mathcal{E}_M = V_P/d_{\text{óx}}, \quad [\text{VIII-2}]$$

ou seja, na região plana o campo elétrico local em função do potencial de porta tem um comportamento linear, que para um óxido de 20 nm de espessura resultará em:

$$\mathcal{E}_M = 0,5 V_P \text{ (MV/cm)}. \quad [\text{VIII-3}]$$

6. Precipitados

A influência dos nano-precipitados na perturbação do campo elétrico local foi analisada inserindo na estrutura do capacitor-matriz um precipitado. O precipitado foi posicionado em diferentes locais dentro do capacitor-matriz:

- a) Na interface Si/SiO₂.
- b) Exatamente no meio do filme de SiO₂.
- c) Na interface SiO₂/Al.

d) No volume do silício.

A forma do precipitado inserido no capacitor-matriz foi inicialmente semicircular nas interfaces e circular no interior do SiO₂ e do Si. O raio foi sempre igual a 1 nm.

O material do qual era constituído o defeito foi definido a partir da permissividade dielétrica relativa (ϵ) e do valor da banda de energia proibida E_G , e foram fixados em função dos valores estabelecidos na literatura para o Al₂O₃, SiO_x e os materiais metálicos. Os valores dos parâmetros E_G e ϵ , utilizados na caracterização dos precipitados estão resumidos na Tabela VIII-2.

Tabela VIII-2: Valores assumidos pelos parâmetros ϵ e E_g para os diferentes materiais associados aos defeitos considerados na simulação.

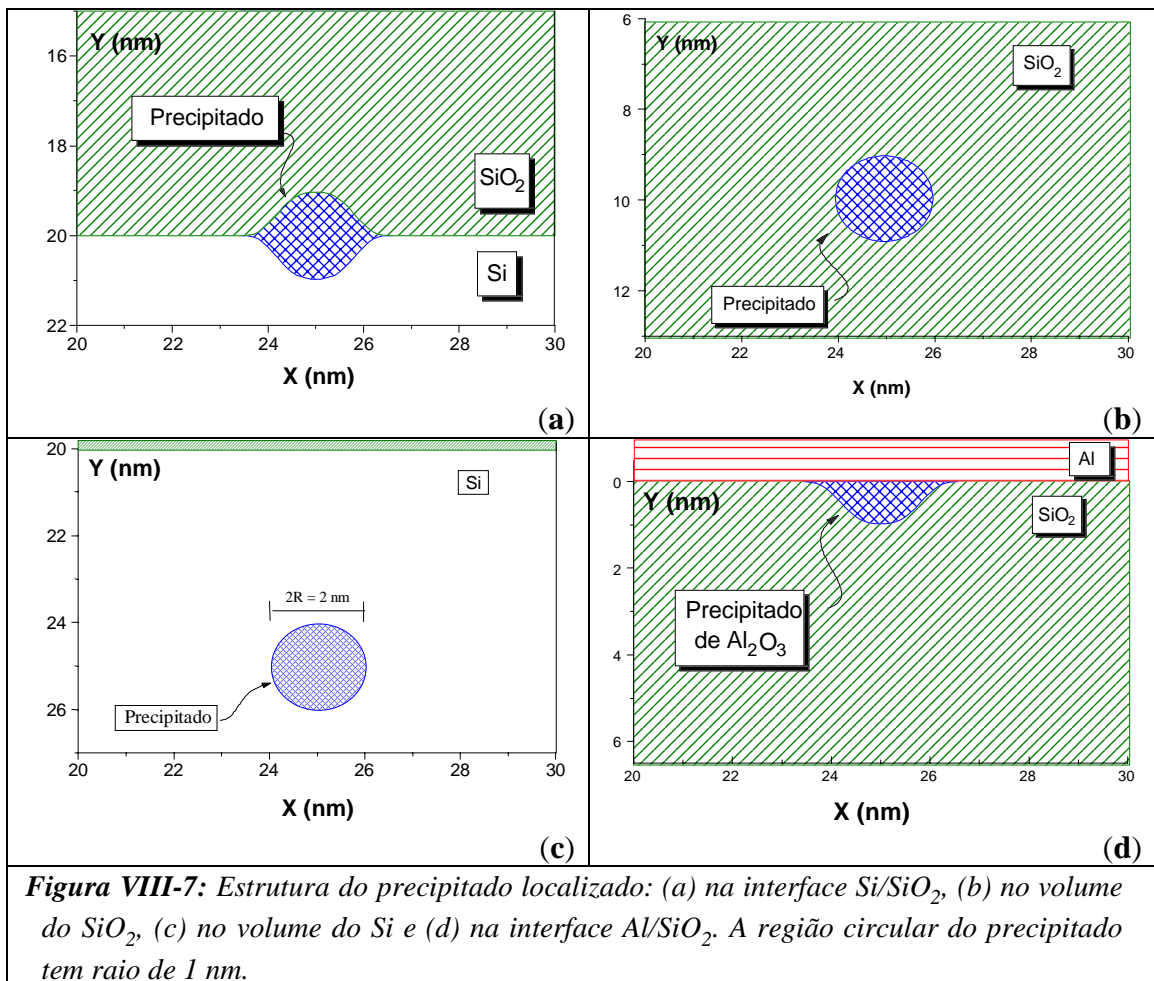
MATERIAL	PERMISSIVIDADE DIELÉTRICA RELATIVA ($\times \epsilon_0$)	GAP DE ENERGIA (eV)
Al ₂ O ₃	9	9
SiO _x	3,2 a 4,5	8,5 a 9,5
“Metal”	900	0,05
Si	11,7	1,1
SiO ₂	3,9	9

A Tabela VIII-2 mostra um resumo dos valores de permissividade dielétrica relativa ϵ e da banda de energia proibida E_G , utilizados para caracterizar os precipitados nos capacitores MOS simulados nesta seção. Os valores não mencionados de ϵ e E_G fora do precipitado são idênticos aos do capacitor-matriz, já descritos na seção 1 deste capítulo.

O material “Metal” foi considerado para observarmos a influência de um defeito constituído de um material com uma permissividade dielétrica muito grande e um “gap” de energia próximo de zero. Se inserirmos as características de um metal o

simulador não consegue convergir.

Os capacitores-virtuais simulados foram construídos a partir do capacitor-matriz, que foi modificado através da inserção de apenas um dos possíveis precipitados mostrados na Figura VIII-7. Portanto, a única diferença entre o capacitor ideal (capacitor referência) e o capacitor-com-precipitado é a presença do precipitado. A Figura VIII-7 mostra as geometrias dos precipitados inseridos em diferentes locais do capacitor-matriz.



A Figura VIII-7 mostra as geometrias dos precipitados simulados. O restante da estrutura do capacitor permanece idêntico ao do capacitor-matriz (capacitor ideal). A Figura VIII-7a mostra o precipitado na interface Si/SiO₂, a Figura VIII-7b mostra o

precipitado no meio do filme de SiO_2 , a Figura VIII-7c mostra o precipitado dentro do silício, à 5 nm da interface Si/SiO_2 e a Figura VIII-7d um precipitado semicircular agregado à interface Al/SiO_2 .

A forma dos precipitados inseridos nas interfaces Si/SiO_2 e Al/SiO_2 inicialmente foram circulares, mas na região onde os três materiais se encontram é criado um problema de singularidade, o que impossibilitou a obtenção de convergência da simulação. Assim, foi feita uma suavização da geometria circular do precipitado, de forma tal que a espessura local do óxido variasse mais suavemente nesta região. A estrutura geométrica dos precipitados no meio do dielétrico e do silício têm o formato circular.

Na simulação dos capacitores com precipitados metálicos foram utilizadas as três geometrias de precipitados mostradas nas Figuras VIII-7a, VIII-7b e VIII-7c. Os valores da permissividade dielétrica relativa ϵ e o da banda de energia proibida E_G estabelecidos para os precipitados metálicos foram 900 e 0,05 eV, respectivamente. Com exceção das regiões mostradas nas figuras, todo o resto do capacitor simulado foi mantido igual ao do capacitor-matriz.

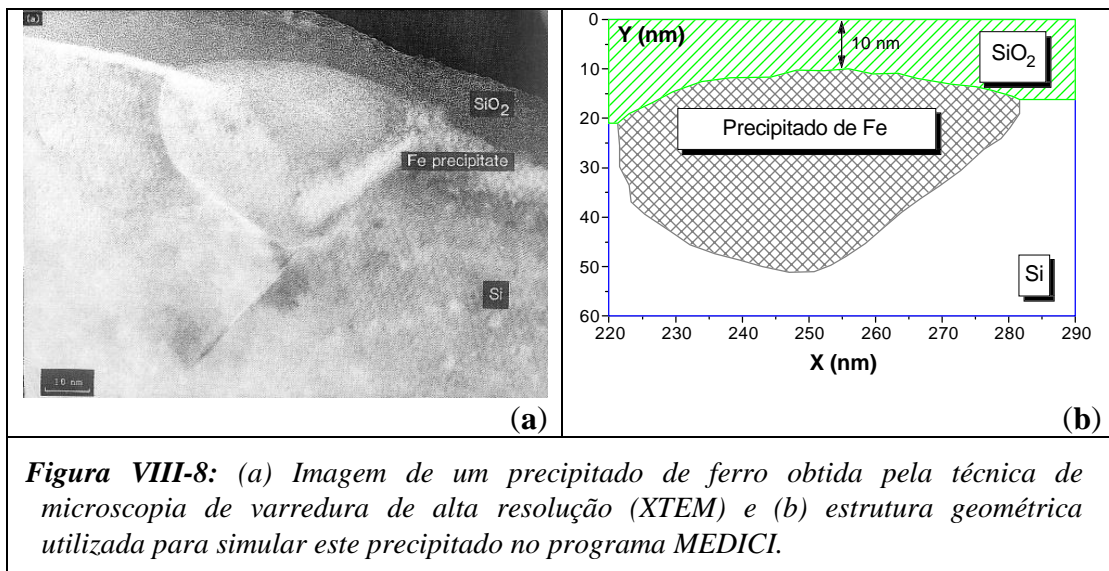
Os capacitores-virtuais construídos com o precipitado de SiO_x foram simulados utilizando a estrutura geométrica mostrada na Figura VIII-7b. Conforme ilustrado, a forma do precipitado é circular, com o centro posicionado em $x' = 25$ nm e $y' = 10$ nm, que é exatamente no meio do filme de SiO_2 e também no meio da largura do eletrodo de porta ($W/2$). Foram simulados diferentes capacitores fazendo uma combinação dos valores 3,2 e 4,5 para ϵ_{SiO_x} e 8,5 e 9,5 eV para E_G , para a região delimitada pelo precipitado.

O capacitor com precipitado de Al_2O_3 foi simulado utilizando a estrutura geométrica mostrada na Figura VIII-7d. O precipitado tem o formato semicircular de raio 1 nm e está anexo a interface Al/SiO_2 . Os precipitados de Al_2O_3 são resultantes do processo de

sinterização da interface Al/SiO₂ e estão localizados nas vizinhanças da interface Al/SiO₂ na forma de agregados [14].

7. Estrutura com precipitado real

Além das estruturas mencionadas anteriormente, foram analisadas outras, menos idealizadas, que foram obtidas por Honda [15] em um estudo da influência de contaminação por ferro no campo de ruptura do dielétrico. Honda mostrou algumas microfotografias, obtidas por microscopia eletrônica de alta resolução (XTEM), em que precipitados de ferro se localizavam no interior do dielétrico, na interface Si/SiO₂ e dentro do silício. A partir da digitalização da microfotografia mostrada na Figura VIII-8a, que mostra um precipitado de ferro localizado na interface Si/SiO₂, foi construído um capacitor-virtual contendo este precipitado. A Figura VIII-8b mostra a interface Si/SiO₂ do capacitor-matriz após a inserção do precipitado.



A Figura VIII-8a mostra a microfotografia, obtida por Honda [15], de um precipitado de ferro com dimensões aproximadas de 60×40 nm² em uma estrutura Si/SiO₂, contaminada propositalmente com Fe (dose de 10¹⁴-10¹⁵ cm⁻²), por implantação iônica. O óxido tinha a

espessura média de 30 nm.

8. Bibliografia

- 1 TMA MEDICI: Programa de Análise Bi-dimensional de Dispositivos. Versão 2.0, Technology Modeling Associates, Inc. (1994).
- 2 FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.B.; SANDS, M. The Feynman Lectures on Physics, Vol.2, Addison-Wesley Publishing Co., New York (1987).
- 3 FALSTER, R. J. Appl. Phys., Vol. 66 (7), p.3355 (1989).
- 4 LANGE, P et al. J. Electrochem. Soc., Vol.139 (5), p.1420 (1992).
- 5 NICOLIAN, E.H.; BREWS, J.R. MOS Physics and Technology, John Wiley & Sons, New York (1982).
- 6 VAPAILLE, A. and BORBOTTIN, G. Instabilities in Silicon Devices, North Holland, Amsterdam (1986)
- 7 SZE, S.M. Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, New York (1981).
- 8 RAVINDRA, N.M.; et.al Pre-print.
- 9 ONDREJ, L; et al. Appl. Phys. Lett., Vol.37 (4) (1980).
- 10 LIU, Q.; et al. J. Vac. Sci. Technol. A, Vol 13 (4) (1995).
- 11 VALENTE LOPES, M. C.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. Numerical Calculations of the Electrical Effects Induced by Structural Imperfections on MOS Capacitors. J. Electrochem. Soc., Vol.141 (6), p.1621 (1994).
- 12 VALENTE LOPES, M.C.; SANTOS, S.G.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. The Influence of Si-SiO₂ Interface Roughness on Electronic Roughness. J. Electrochem. Soc., Vol. 143 (3), p.1021 (1996).
- 13 PIETSCH, G.M; et al. Appl. Phys. Lett., Vol.60 (11), p.1321 (1992).
- 14 MIURA, Y; HIROSE, K. J. Appl. Phys., Vol. 77 (7), p.3554 (1995).
- 15 HONDA, K.; OHSAWA, A.; NAKANISHI, T. J. Electrochem. Soc., Vol.142 (10) (1995).

Capítulo IX

Procedimentos para a comparação de capacitores reais com capacitores virtuais

1. Introdução

Como objetivo de estabelecer o impacto da rugosidade na interface Si/SiO₂ nas características elétricas dos capacitores MOS foi feito um estudo comparativo entre a distribuição dos campos elétricos locais e as características elétricas dos capacitores com diferentes rugosidades na interface Si/SiO₂.

No capacitor MOS a correlação entre suas características elétricas (\mathcal{E}_R , Q_R , ϕ_0 e D_{it}) com a distribuição espacial do campo elétrico local dentro do capacitor ainda não foi definitivamente estabelecida devido a uma limitação técnica: o campo elétrico local ainda não pode ser acessada pelas atuais técnicas de medidas experimentais. No entanto, se a estrutura do capacitor, assim como de seus defeitos, forem conhecidos a distribuição espacial do campo elétrico poderá ser determinada através de simulações.

Para que esta correlação seja estabelecida foram construídos dois conjuntos de capacitores com rugosidades das interfaces de SiO₂ qualitativamente diferentes, veja o resumo explicativo na Figura IX-1. Foram determinadas as características elétricas (\mathcal{E}_R , Q_R , ϕ_0 e D_{it}) destes dois conjuntos de capacitores. As topografias das interfaces Si/SiO₂, dos

dois conjuntos de capacitores, foram obtidas por microscopia de força atômica. A partir das topografias dos dois conjuntos de capacitores foram construídos dois capacitores virtuais, que têm características de rugosidades de interfaces semelhantes aos do capacitor real. As distribuições espaciais do campo elétrico, dos dois capacitores, foram determinados por simulações. Finalmente, foi feita a correlação das características elétricas do capacitor real com a distribuição espacial do campo elétrico local dentro do capacitor virtual. O diagrama de blocos do procedimento utilizado neste experimento é mostrado na Figura IX-1.

Um ponto importante a ser enfatizado neste experimento é que a rugosidade eletrônica, a ser determinada pelas simulações, será resultante apenas da rugosidade da interfaces do Si/SiO₂. Portanto, na parte experimental é fundamental garantir uma "receita" de processo em que a única diferença entre os dois conjuntos de capacitores fabricados seja apenas a rugosidade da interface Si/SiO₂. Esta condição foi obtida através da utilização do mesmo processo de fabricação, com uma única exceção na etapa de resfriamento, para os dois conjuntos de capacitores.

A taxa de resfriamento é que será a responsável pela diferença de rugosidade nos dois conjuntos de capacitores fabricados [1]. A obtenção de óxidos tendo apenas a rugosidade na interface Si/SiO₂ como diferença foi conseguida a partir de três ingredientes:

- a) Duas lâminas com características idênticas.
- b) Oxidação térmica rápida para obter um filme de espessura 20 nm.
- c) Diferentes taxas de resfriamento para as duas lâminas para que tenham diferentes rugosidades na interface Si/SiO₂.

Sendo que apenas na etapa c os históricos das duas amostras foram diferentes.

A Figura IX-1 mostra o diagrama esquemático onde está resumido este experimento. Inicialmente temos as duas lâminas de silício que serão submetidas ao processamento térmico quase idêntico.

As duas lâminas são oxidadas nas mesmas condições de tempo, temperatura e ambiente. Veja a descrição detalhada na seção 2.

A etapa seguinte é o processo de resfriamento. É nessa etapa que as rugosidades nas interfaces Si/SiO₂ das duas lâminas se diferenciam. A primeira lâmina é resfriada por um processo de resfriamento lento e resultará na amostra RRL. A Segunda lâmina foi resfriada utilizando o processamento térmico pulsado, daí chamarmos esta amostra de PTP. Veja a descrição do processo de resfriamento na seção 2.1.

A seguir, cada uma das duas lâminas oxidadas foi clivada em duas partes: uma maior para construir os capacitores MOS (veja seção 3) e uma outra menor, utilizada para a determinação das topografias das interfaces do SiO₂, veja descrição na seção 5.

Nos capacitores MOS foram realizadas medidas elétricas I-V (curvas de corrente em função da tensão de porta) e I-t (curvas de corrente em função do tempo) para a determinação das seguintes características elétricas dos capacitores: campo elétrico de ruptura (\mathcal{E}_R), carga de ruptura (Q_R), altura da barreira de potencial (ϕ_o) e a densidade de estados de interface (D_{it}). Veja a descrição das medidas de características elétricas na seção 4.

Das topografias da interface Si/SiO₂, medidas a partir das amostras PTP e RRL, foram construídos capacitores virtuais. Estes capacitores foram simulados através do programa simulador de dispositivos MEDICI, para a determinação da distribuição espacial dos campos elétricos locais, veja o procedimento utilizado na seção 6.

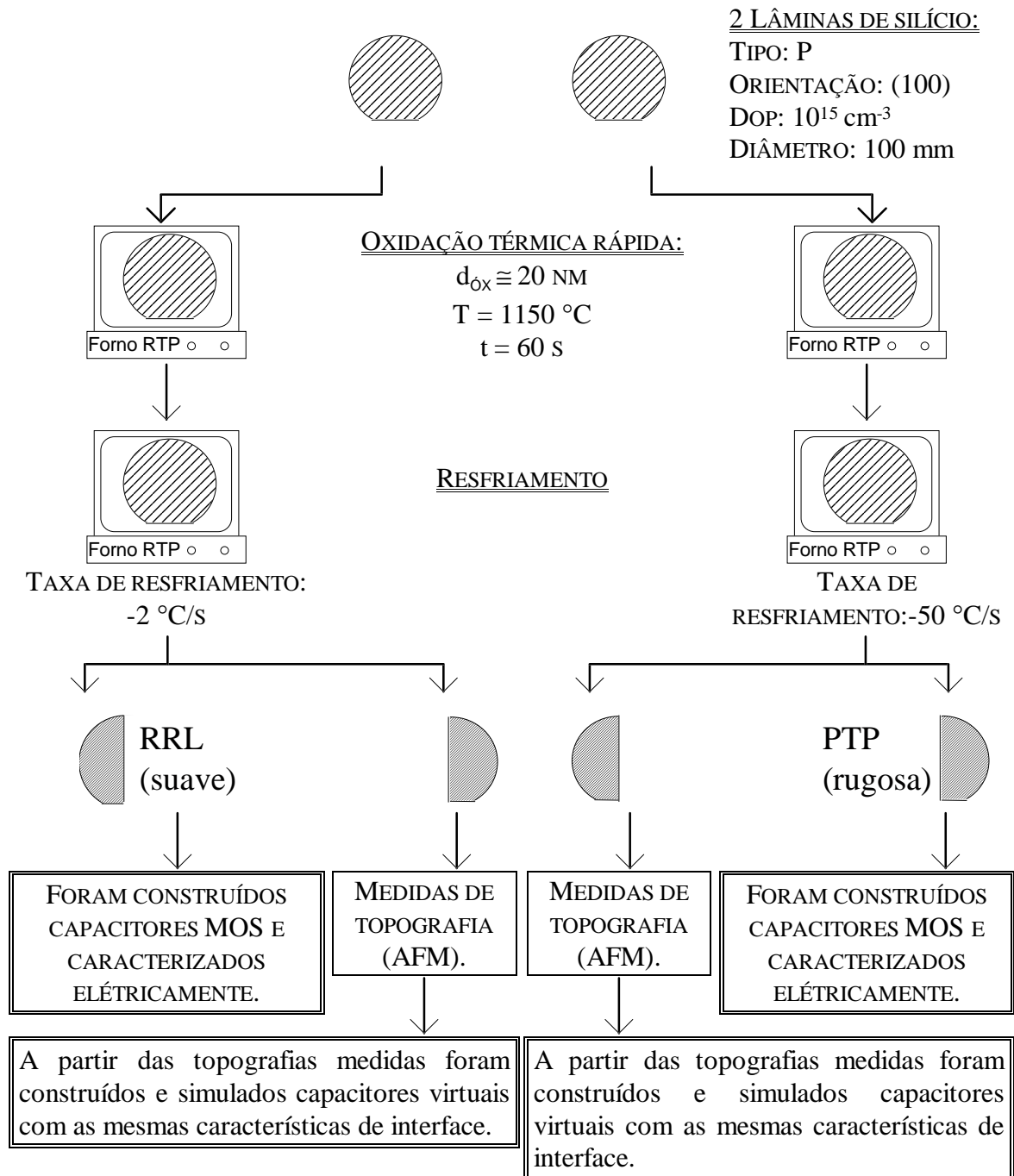


Figura IX-1: Diagrama esquemático do procedimento utilizado na comparação das características elétricas com distribuição dos campos elétricos locais para capacitores com diferentes rugosidades.

2. Oxidação das duas lâminas

Lâminas de silício CZ (Czochralski) tipo p com diâmetro de 100 mm, resistividade entre 10 a 20 Ωcm (10^{15} cm^{-3}) e orientação (100), que foram limpas de acordo com o seguinte procedimento:

- limpeza Piranha: fervura durante 15 minutos em uma solução de 4 H_2SO_4 : 1 H_2O ,
- banho por 100 segundos em DHF (1 HF (49%)+ 20 H_2O),
- RCA e
- banho por 100 segundos em DHF.

2.1 Processo de oxidação

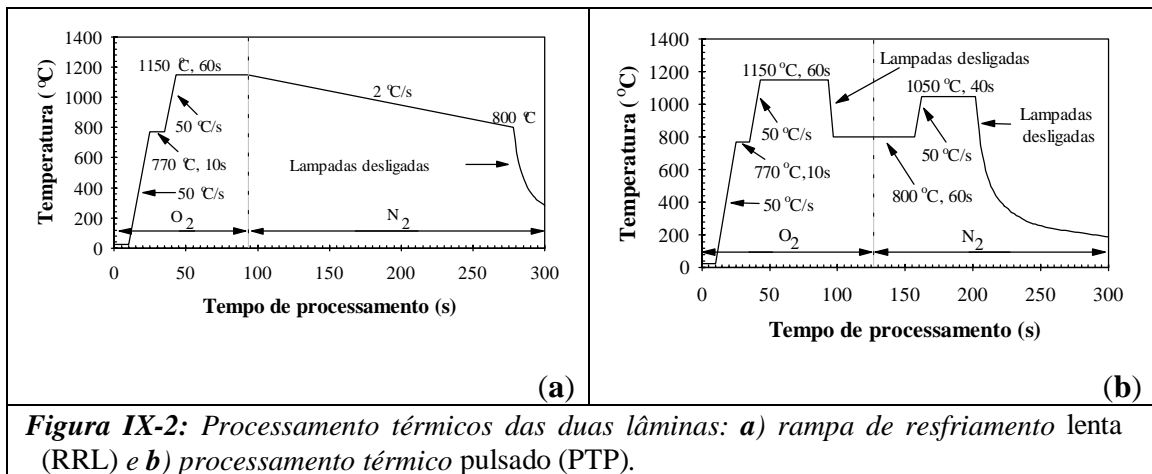


Figura IX-2: Processamento térmicos das duas lâminas: **a)** rampa de resfriamento lenta (RRL) e **b)** processamento térmico pulsado (PTP).

Depois da limpeza, as lâminas foram introduzidas em um forno de lâmpadas Heatpulse 410T (Rapid Thermal Processor - A.G. Associates) e oxidada em O_2 seco (menos que 5 ppm de H_2O) a uma temperatura de 1150°C durante 60 segundos, o que resultou em um óxido de espessura aproximada de 20 nm. Veja na Figura IX-2 o processo térmico de oxidação para as duas amostras.

Comparando os históricos térmicos das amostras PTP e RRL, na Figura IX-2, até o tempo de 90 segundos os processos térmicos das duas amostras são rigorosamente iguais. Durante este intervalo de tempo as amostras saíram da temperatura ambiente, que era de aproximadamente 20°C, e foram aquecidas até a temperatura de 770°C, numa taxa de 50 °C s⁻¹. As amostras permaneceram 10 segundos na temperatura 770°C. Isto é feito para garantir uma uniformidade da temperatura em toda a lâmina. A seguir as amostras foram aquecidas até a temperatura de 1150°C, numa taxa de 50 °C s⁻¹ e permaneceram nesta temperatura por 60 segundos, quando ocorre efetivamente o processo de oxidação.

2.2 Processo de resfriamento

Ao final do processo de oxidação a câmara se encontra à temperatura de 1150 °C e então começa a etapa de resfriamento da câmara do forno. Nesta etapa é que o processamento térmico das duas lâminas se diferenciam:

- Rampa de Resfriamento Lento (RRL): para a primeira lâmina, o fluxo de oxigênio é substituído pelo de nitrogênio, e começa o processo de resfriamento, a uma taxa de -2 °C s⁻¹ até a temperatura de 800°C, onde as lâmpadas do forno são desligadas. Com o desligamento das lâmpadas, a taxa de resfriamento passa a ser de -50 °C s⁻¹. Veja a Figuras IX-2a.
- Processamento Térmico Pulsado (PTP): para a Segunda lâmina, as lâmpadas do forno são desligadas e o resfriamento começa, a uma taxa aproximada de -50 °Cs⁻¹, até atingir a temperatura de 800°C. A amostra permaneceu nesta temperatura por 60 segundos, sendo que após transcorridos 30 dos 60 segundos, o fluxo de oxigênio foi substituído por nitrogênio. A seguir, a amostra foi aquecida novamente até a temperatura de 1050°C, a uma taxa de 50 °Cs⁻¹, onde permaneceu por 40

segundos. Neste ponto, as lâmpadas são desligadas, e a amostra é resfriada até a temperatura ambiente, a uma taxa de $-50\text{ }^{\circ}\text{Cs}^{-1}$. Veja a Figuras IX-2b.

A lâmina que sofreu o Processamento Térmico Pulsado será chamado, de agora em diante, amostra PTP. A outra lâmina, que foi submetido à Rampa de Resfriamento Lento será chamado de RRL. A diferença nas interfaces Si/SiO₂ têm origem neste processo de resfriamento diferenciado.

O resfriamento rápido de 800°C até a temperatura ambiente, impede a formação de doadores térmicos no volume do silício e nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ [2,3].

Veja nas Figuras IX-2a e IX-2b os gráficos da temperatura em função do tempo para o processo térmico de oxidação e resfriamento das amostras RRL e PTP, respectivamente.

Em experiências realizadas por oxidação térmica convencional [2,4] foi observado que o resfriamento lento, entre as temperaturas 1150°C e 800°C, pode melhorar a planicidade da interface Si/SiO₂ em escala nanométrica. No caso do resfriamento rápido, é importante notar que o pulso térmico a 1050 °C em nitrogênio (N₂) permite obter uma melhora substancial das características do óxido, no que diz respeito as cargas fixas e de interface, armadilhas de elétrons associados a moléculas de água e armadilhamento de lacunas [5,6].

A determinação da espessura do óxido foi feita através da técnica de elipsometria (Auto EL II, Rudolph Research) utilizando um comprimento de onda de 405 nm e índice de refração fixo de 1,47.

As duas amostras foram clivadas em duas partes, sendo uma das partes (3/4 da lâmina) foi utilizada para construir capacitores MOS (veja seção 3), e uma outra parte (1/4 da lâmina) para medidas de topografia das interfaces do SiO₂ (veja seção 5).

3. Preparação dos dois conjuntos de capacitores.

A preparação dos capacitores MOS consistiu na deposição de alumínio, nas amostras RRL e PTP, para a definição dos eletrodos de porta e do substrato.

A forma e o tamanho do eletrodo de porta foram definidos utilizando uma máscara mecânica. Esta máscara tinha um formato circular e área de $6 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$, através da qual foi evaporado o alumínio, dando a mesma forma e tamanho ao eletrodo de porta.

O eletrodo do substrato foi implementado depositando alumínio nas costas da lâmina por evaporação, após a remoção do óxido nativo ali presente.

A máscara utilizada permitia a produção de 100 capacitores para cada evaporação. Foram fabricados 100 capacitores a partir da amostra PTP e 100 a partir da amostra RRL. Foram fabricados mais 20 capacitores para a realização das medidas de carga de ruptura e densidade de estados de interface.

A sinterização dos contatos foi realizada na temperatura de $420 \text{ }^\circ\text{C}$, por 30 minutos, em ambiente de N_2 .

4. Caracterização elétrica dos capacitores MOS

As características elétricas dos capacitores MOS foram obtidas através das técnicas I-V e I-t, sendo que os parâmetros determinados foram o campo de ruptura do dielétrico (\mathcal{E}_R), a carga de ruptura (Q_R), a altura da barreira de potencial (ϕ_o) e a densidade de estados de interface (D_{it}). Os procedimentos, assim como uma rápida explanação da fundamentação teórica das medidas, serão descritas a seguir.

4.1 Medidas de campos de ruptura.

A determinação do campo de ruptura do dielétrico (\mathcal{E}_R) em cada um dos capacitores MOS é feita através da aplicação de uma rampa de potencial constante de -1 Vs^{-1} no eletrodo de porta. Simultaneamente à aplicação da rampa de potencial, monitora-se a corrente que flui pelo capacitor, criando-se assim um gráfico de corrente em função do potencial, conhecida por curva I-V, veja a Figura IX-3.

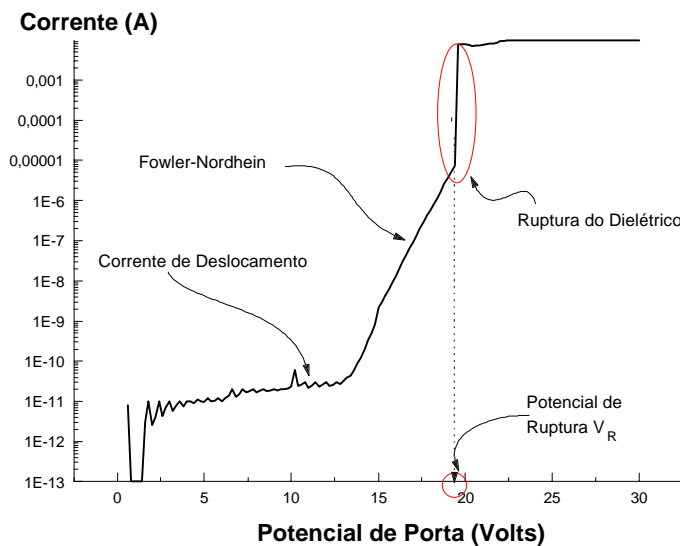


Figura IX-3: Curva I-V de um capacitor MOS submetido a uma rampa de potencial constante. A ruptura ocorre quando a corrente apresenta uma descontinuidade.

Da curva I-V são extraídos alguns parâmetros importantes, tais como o potencial de ruptura V_R que, dividido pela espessura do óxido $d_{\text{óx}}$, dará o campo médio de ruptura do dielétrico. Este método de determinação do campo de ruptura do dielétrico é destrutivo, ou seja, quando ocorre o evento de ruptura o SiO_2 perde as suas propriedades dielétricas.

A curva I-V acusa o evento da ruptura do dielétrico com um aumento abrupto de corrente. No exemplo mostrado na Figura IX-3 houve um salto de mais de duas ordens de grandeza. O potencial correspondente ao ponto onde houve a descontinuidade na corrente,

é denominado potencial de ruptura V_R . No exemplo dado pela Figura IX-3 o valor de V_R foi de 19,5 V.

É interessante observar também, na Figura IX-3, que há dois regimes de condução neste gráfico, a corrente de deslocamento e a corrente de Fowler-Nordheim (F-N), para baixos e elevados campos elétricos, respectivamente. Neste exemplo, a ruptura ocorreu nos domínios da corrente de F-N (altos campos). Quando a qualidade do óxido é ruim, a ruptura pode ocorrer nos domínios da corrente de deslocamento.

A determinação da curva I-V e do campo de ruptura são feitos para todos os capacitores dos conjuntos da amostra RRL e PTP. Com isso são obtidos dois conjuntos de valores de campos elétricos de ruptura $\{\mathcal{E}_R\}$: um associado a amostra RRL e outro a amostra PTP.

A partir dos conjuntos de valores de campo de ruptura são construídos dois histogramas de frequência, associados às amostras RRL e PTP.

4.2 Determinação da barreira de potencial (ϕ_0)

Na parte teórica desta tese (seção 3.4 do capítulo II) foi mostrado que a corrente de Fowler-Nordheim tem o seguinte comportamento:

$$J = A \mathcal{E}^2 e^{-\left(\frac{B}{\mathcal{E}}\right)} \quad [\text{IX-1}]$$

Experimentalmente é mais fácil analisar uma reta do que uma curva composta de uma parte exponencial e de uma parte parabólica, como é o caso da equação IX-1. Por isso esta equação será linearizada, a partir de algumas manipulações algébricas, que resultará em:

$$\ln\left(\frac{J}{\mathcal{E}^2}\right) = \ln A - \frac{B}{\mathcal{E}} \quad [\text{IX-2}]$$

sendo \ln o logaritmo natural. Portanto, se for feita uma redefinição $Y = \ln(J/\mathcal{E}^2)$ e $X = \mathcal{E}^{-1}$, a equação resultará numa reta:

$$Y = \ln A - B X \quad [\text{IX-3}]$$

com coeficiente linear igual a $\ln A$ e coeficiente angular de $-B$.

O gráfico mostrado na Figura IX-4 é o resultado final da conversão da curva I-V, mostrada na Figura IX-3, considerando apenas a região onde há o predomínio da corrente de Fowler-Nordheim ($V_R > V_P > 14\text{V}$). Conforme a linearização mostrada na Equação IX-3, o coeficiente linear desta curva é $\ln A$ e o coeficiente angular é $-B$, sendo A e B relacionados com a barreira de potencial e com a massa efetiva do elétron.

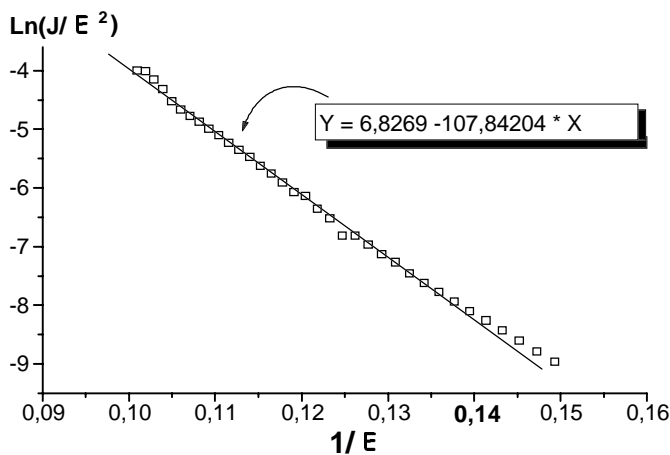


Figura IX-4: Curva $\ln(J/\mathcal{E}^2)$ versus \mathcal{E}^{-1} de um capacitor com óxido de porta de espessura 20 nm e com interface Si/SiO₂ rugosa.

Observe na Figura IX-4 que para valores de \mathcal{E}^{-1} maiores que 0,14 cmV^{-1} os pontos deixam de seguir o comportamento linear. Veja mais detalhes no capítulo II, seção 3.4.

4.3 Determinação da carga de ruptura.

A determinação da carga de ruptura (Q_R) é feita através da aplicação de um campo elétrico constante em um capacitor MOS. Monitora-se a corrente em função do tempo (Figura IX-5) até que haja o evento da ruptura, que é verificada quando a corrente apresenta uma descontinuidade. A carga de ruptura é igual a área sob a curva I-t.

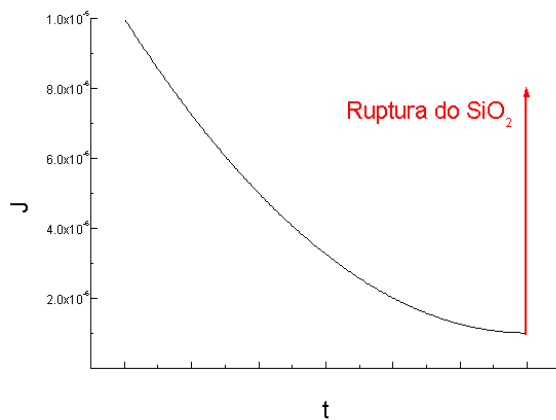


Figura IX-5: Curva da corrente em função do tempo de um capacitor com óxido de porta de espessura 20 nm e com interface Si/SiO₂ rugosa.

A corrente não é constante no tempo porque há o armadilhamento de elétrons dentro do dielétrico, que criará um campo repulsivo para as cargas negativas subsequentes, diminuindo assim a intensidade da corrente que flui pelo capacitor.

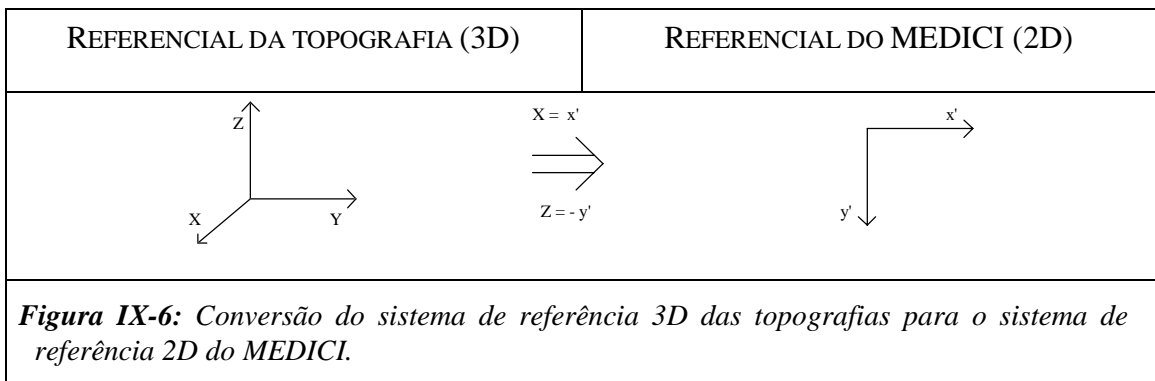
5. Medidas das topografias das interfaces Si/SiO₂ por AFM.

As medidas das topografias das interfaces do Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP foram feitas através da técnica de microscopia de força atômica (AFM), conforme o procedimento descrito no Capítulo VII.

As áreas de análise, em que foram medidas as topografias, foram padronizadas para possibilitar sempre comparações quantitativas entre os diferentes conjuntos de amostras

analisados. As áreas padronizadas, utilizadas na varredura das amostras foram: 500x500 nm², 100x100 nm² e 50x50 nm². Durante a análise da amostra, foi possível escolher um grande número de regiões para realizar a captura da imagem representativa da amostra.

Foram obtidas as topografias das interfaces Si/SiO₂ em forma de uma superfície tridimensional (X, Y, Z). A partir destes pontos (X, Y, Z) foram obtidos cortes transversais (X, Z) (veja Figura IX-6) que foram utilizados como entrada (INPUT), no simulador de dispositivos MEDICI, para simular o efeito de diferentes rugosidades da interface Si/SiO₂ na rugosidade eletrônica [7] de um capacitor MOS.



A Figura IX-6 mostra a transformação utilizada para passar do sistema de referência tridimensional (X, Y, Z), da topografia das interfaces medidas por AFM, para o sistema bidimensional (x', y') do simulador de dispositivo MEDICI. A passagem do sistema 3D para 2D foi feito adotando um corte bidimensional, ao longo do plano ZX, da superfície tridimensional e fazendo com que $x' = X$ e $y' = -Z$.

6. Capacitores virtuais

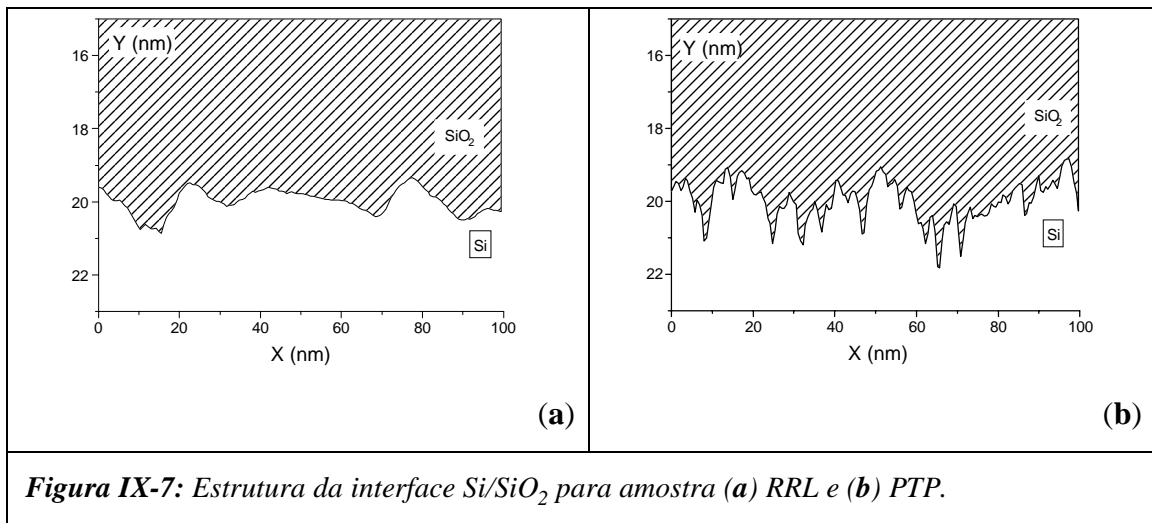
Para a simulação dos capacitores virtuais as propriedades elétricas dos material não foram alteradas mas apenas as características estruturais da interface Si/SiO₂ foram

modificadas. Veja no Capítulo 8 a descrição mais detalhada das simulações utilizando o MEDICI.

Foram construídos dois capacitores virtuais, conforme está mostrado na Figura IX-7, a partir das topografias medidas das interfaces Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP.

Para os dois capacitores virtuais, a interface Si/SiO₂ rugosa inserida era posicionada de forma tal que as espessuras médias dos óxidos ($d_{\text{óx}}$) eram sempre iguais a 20 nm.

Os capacitores mostrados nas Figuras IX-7a e IX-7b correspondem aos obtidos a partir das amostras RRL e PTP, respectivamente.



O capacitor-matriz, na qual foram inseridos as interfaces rugosas e que resultaram nos dois capacitores virtuais mostrados nas Figuras IX-7, tem as mesmas características do capacitor-matriz descrito na seção 2 do capítulo VIII, a única diferença é a largura do eletrodo de porta (W) que neste caso é de 100 nm.

O simulador de dispositivos MEDICI determinava as intensidades dos campos elétricos locais. A partir desses dados as análises foram feitas de três maneiras:

- a) distribuição das intensidades dos campos elétricos,
- b) distribuição espacial dos vetores campos elétricos e
- c) histograma de frequência das intensidades dos campos elétricos locais.

As regiões analisadas foram principalmente nas vizinhanças da interface rugosa.

7. Bibliografia

- 1 VALENTE LOPES, M.C.; SANTOS, S.G.; HASENACK, C.M.; BARANAUSKAS, V. The Influence of Si-SiO₂ Interface Roughness on Electronic Roughness. J. Electrochem. Soc., Vol. 143 (3), p.1021 (1996).
- 2 FALSTER, R. J. Appl. Phys., Vol. 66 (7) p.3355 (1989).
- 3 BROWN, T.M Semiconductor International, Vol. 10 (5) p.223 (1987).
- 4 WU, S.L. et. al. J. Appl. Phys., Vol. 72 p. 1378 (1992).
- 5 NULMAN, J. et al. J. Vac. Sci. Technol., Vol. A4 (3) p.1005 (1986).
- 6 NULMAN, J; et al. Solid State Technology, Vol. 29 (4) p. 189 (1986).

Capítulo X

Resultados e discussões: rugosidades da interface Si/SiO₂

1. Introdução

A morfologia atômica de uma interface é uma propriedade importante, pois é a interface que determina as propriedades elétricas do dispositivo. A grande maioria das interfaces existentes nos dispositivos microeletrônicos possuem estruturas meta-estáveis, e portanto suas estruturas finais são determinadas pelo histórico do processamento. A presença destas estruturas acarreta alteração nas propriedades elétricas da interface, em virtude das suas propriedades eletrônicas, por isso são considerados defeitos. Estes defeitos estruturais podem ser de natureza geométrica (rugosidades) ou de material (compostos químicos diferentes do Si e do SiO₂).

Este capítulo analisa o problema da medida da rugosidade da interface Si/SiO₂, de várias amostras com diferentes processamentos. O procedimento utilizado para a confecção das amostras está descrito em detalhes no Capítulo VII.

2. Resultados das oxidações

A Tabela X-1 mostra os valores das espessuras dos óxidos estimados [1] a partir dos tempos de oxidação (t_{ox}).

Tabela X-1: Tempos de oxidação e estimativas dos valores das espessuras dos óxidos correspondentes.

AMOSTRA	ORIENTAÇÃO	TEMPO (MIN)	ESPESSURA (NM)
A-02	(100)	20	5,7
A-04	(100)	40	8,1
A-07	(100)	70	11,7
A-12	(111)	20	8,1
A-14	(111)	40	13,1

A Tabela X-1 também relaciona o nome das amostras com a orientação do substrato de silício e o tempo de oxidação utilizado para crescer o SiO₂.

3. Medidas das rugosidades

Foram estudadas seis amostras com históricos diferentes, sendo que cada uma delas foi analisada a partir de quatro áreas de análises diferentes. As áreas de análises têm o formato quadrado, como decorrência direta da forma da área de análise do AFM. Neste trabalho foram utilizados quatro tamanhos diferentes de áreas de análise, ou seja, quatro quadrados com lados (L) de: 5, 50, 100 e 500 nm, que são denominadas V-5, V-50, V-100 e V-500, respectivamente.

Tabela X-2: Densidade superficial de pontos em função da área de análise (L×L) e do número de pontos das topografias obtidas por microscopia de força atômica.

VARREDURA (V-L)	ÁREA DE ANÁLISE L×L (nm ²)	DENSIDADE DE PONTOS	
		200×200 (PONTOS)	400×400 (PONTOS)
V-5	5×5	1.600 pontos/nm ²	6.400 pontos/nm ²
V-50	50×50	16 pontos/nm ²	64 pontos/nm ²
V-100	100×100	4 pontos/nm ²	16 pontos/nm ²
V-500	500×500	0,16 pontos/nm ²	0,64 pontos/nm ²

Na etapa de digitalização da topografia tridimensional, para posterior análise numérica, poder-se-ia escolher uma matriz quadrada de 200×200 pontos (baixa resolução) ou 400×400 pontos (alta resolução), resultando num número total de 40.000 pontos e de 160.000 pontos, respectivamente. A₁₄₂Tabela X-2 relaciona a área de análise com a

densidade de pontos por unidade de área (pontos \times nm⁻²), utilizando baixa e alta resolução.

As topografias digitalizadas tinham dois parâmetros: área de análise e número de pontos. O lado L do quadrado da área de análise será chamado de “comprimento de análise”.

A maioria dos histogramas foram satisfatoriamente ajustados por uma distribuição normal. A Figura X-1 mostra a interpretação geométrica para cada um dos parâmetros estatísticos σ_z , \bar{Z} e Z_{pp} associados ao histograma de uma distribuição normal. Veja mais detalhes no Capítulo VII, seção 5.2.

Histograma de Freqüência

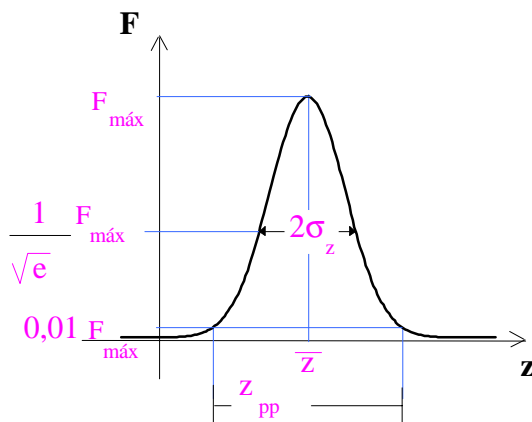


Figura X-1: Perfil típico dos histogramas de freqüência das alturas Z da interface Si/SiO₂. A interpretação geométrica dos parâmetros estatísticos σ_z , \bar{Z} e Z_{pp} são ilustrados no histograma.

Eixos tridimensionais

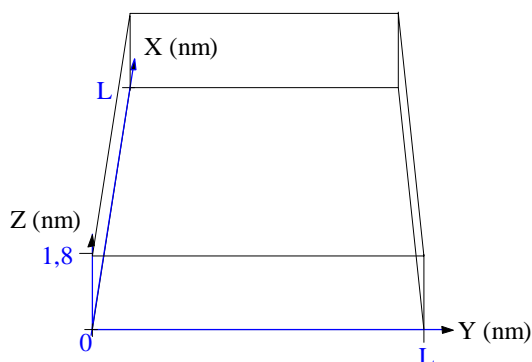


Figura X-2: Eixos X , Y e Z dos gráficos tridimensionais e os intervalos de valores adotados para cada eixo. O intervalo em Z foi mantido fixo entre 0 nm a 1,8 nm para todas as topografias.

Os histogramas foram construídos fixando-se o intervalo dos valores do eixo Z entre [0; 1,5]. O motivo deste procedimento é viabilizar a comparação dos histogramas de

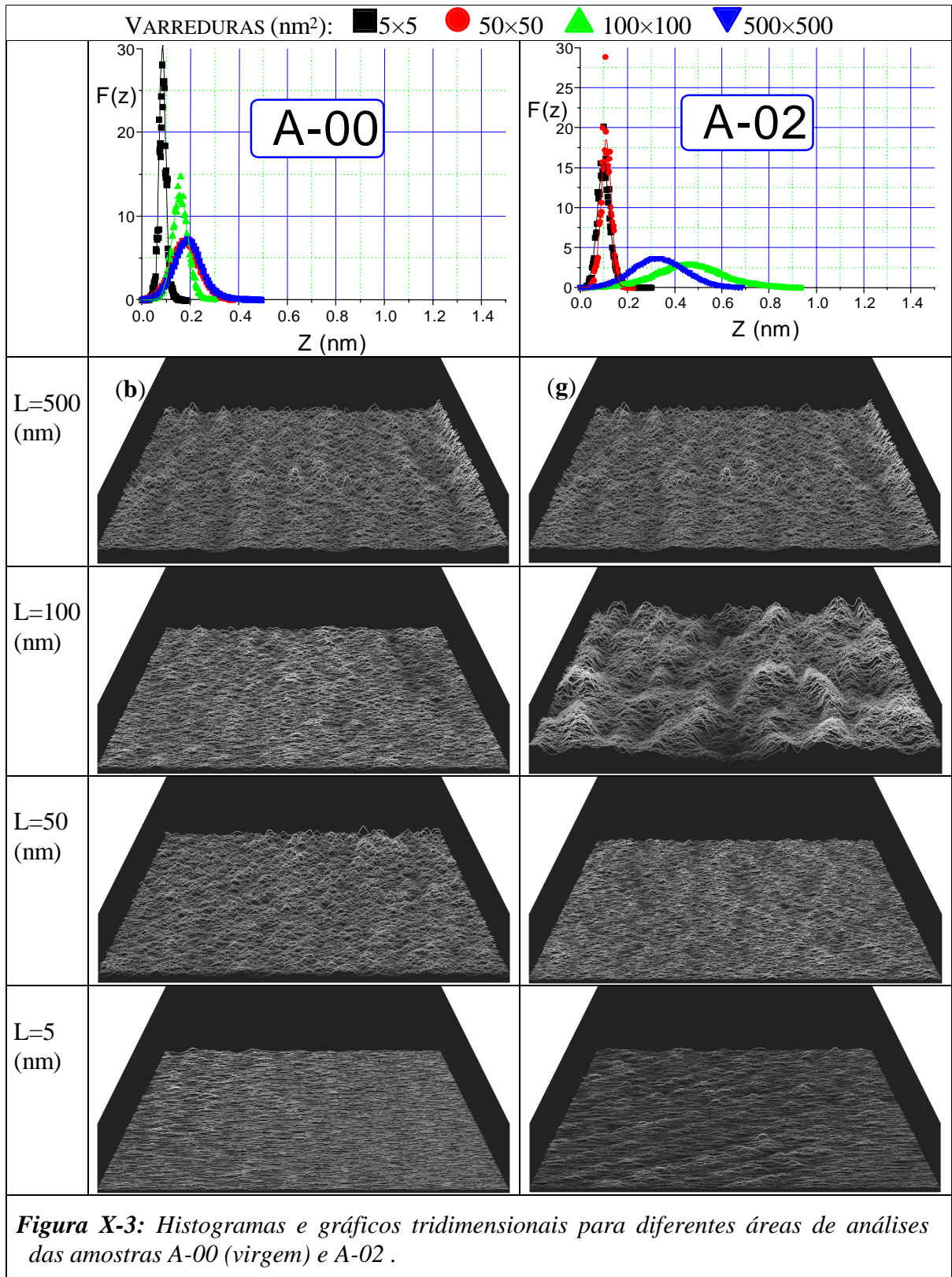
topografias com diferentes áreas de análises e diferentes números de pontos.

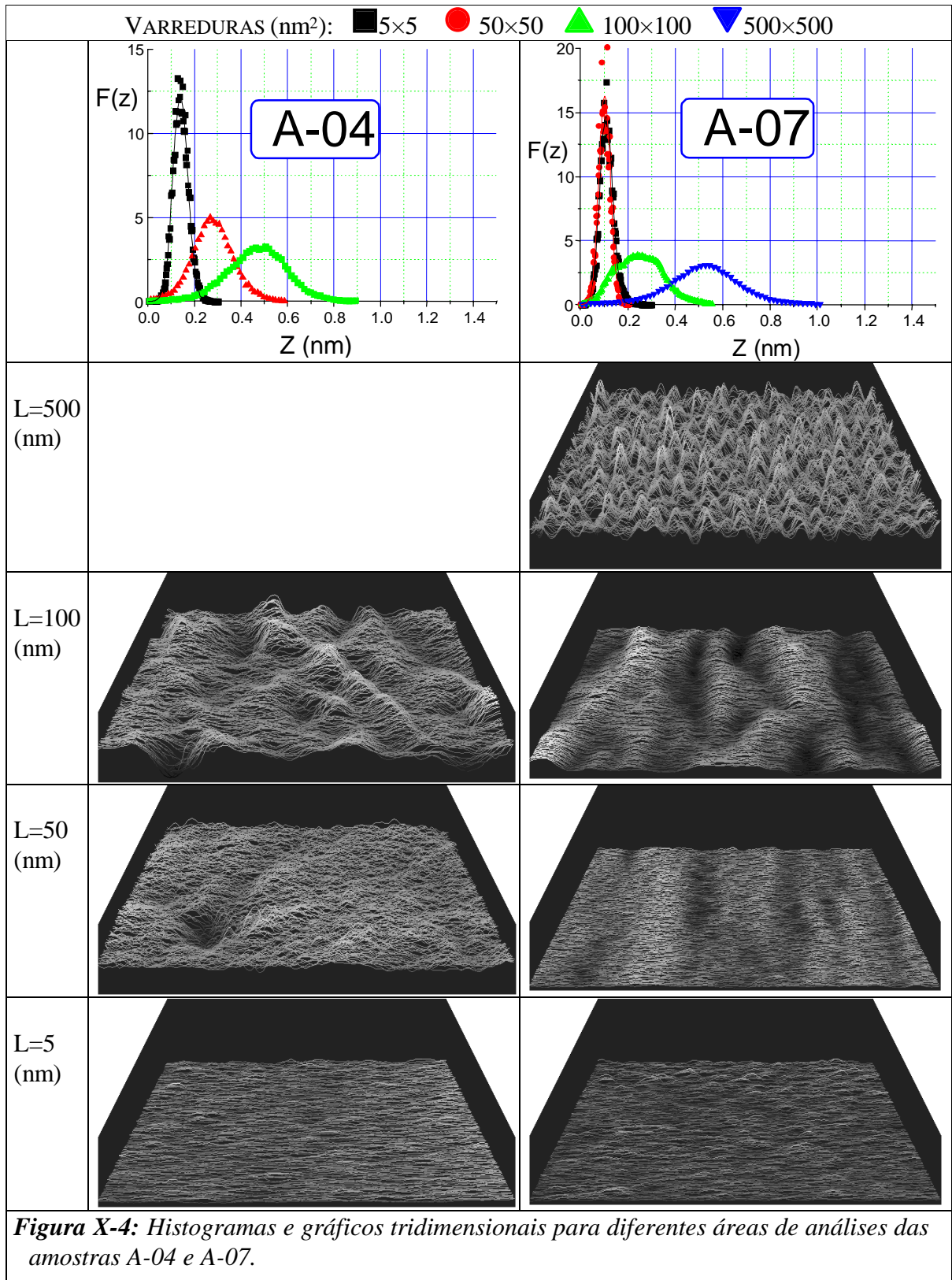
Os gráficos tridimensionais de todas as amostras foram representados fixando-se o valor do intervalo do eixo Z entre [0; 1,8] (nm), para que os diferentes gráficos pudessem ser comparados entre si. Os intervalos nos eixos X e Y variaram de zero até o comprimento de análise (L) da topografia analisada. A Figura X-2 mostra os eixos X, Y e Z, dos gráficos tridimensionais, com seus intervalos de valores. Para evitar redundância de informação nos gráficos tridimensionais, os eixos são omitidos e são mostrados apenas os valores de L.

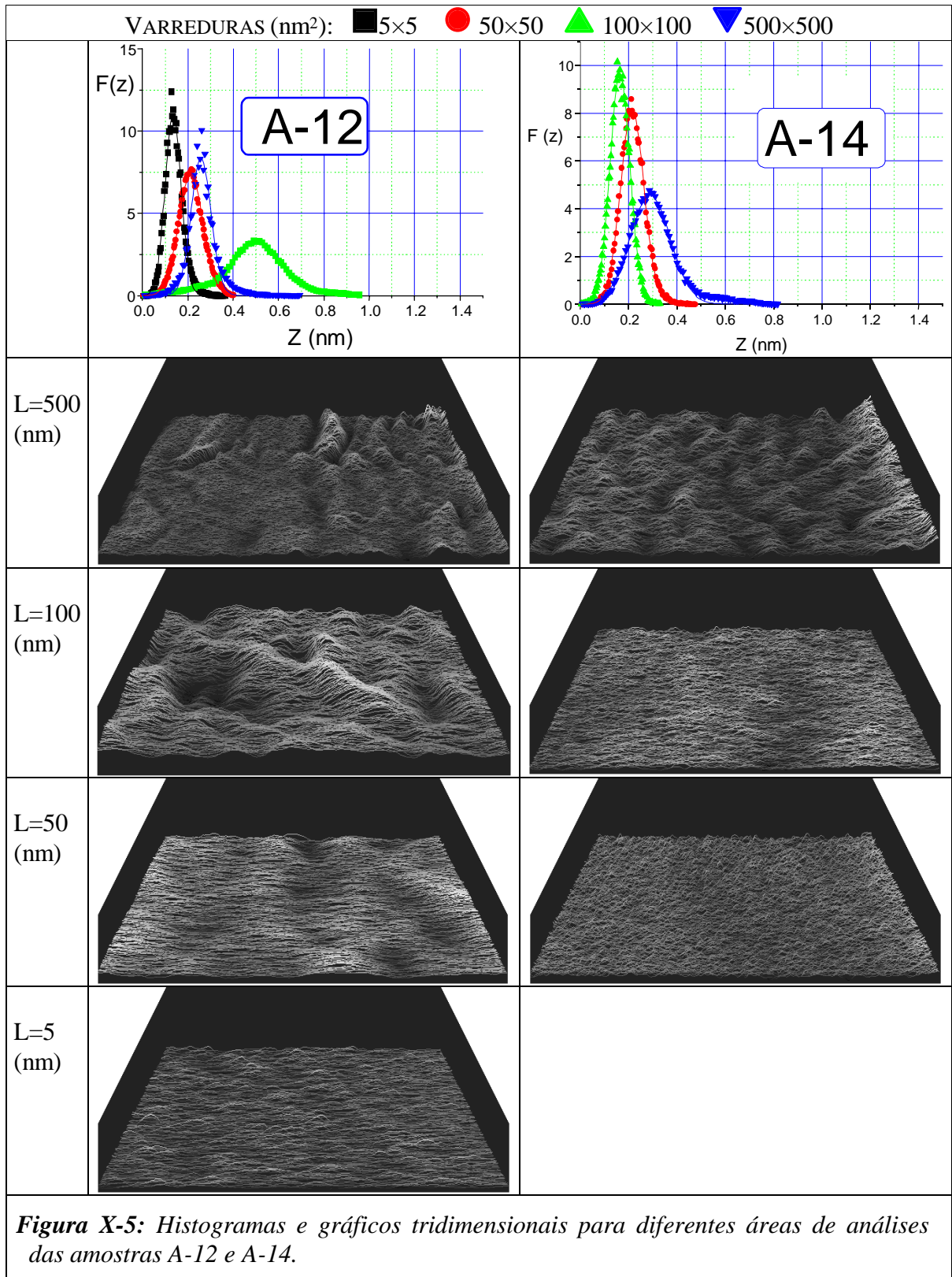
As topografias V-500 da amostra A-07 e V-5 da amostra A-14 foram perdidas, restando 22 topografias. A perda destas duas topografias não acarretou nenhum prejuízo para a conclusão do trabalho.

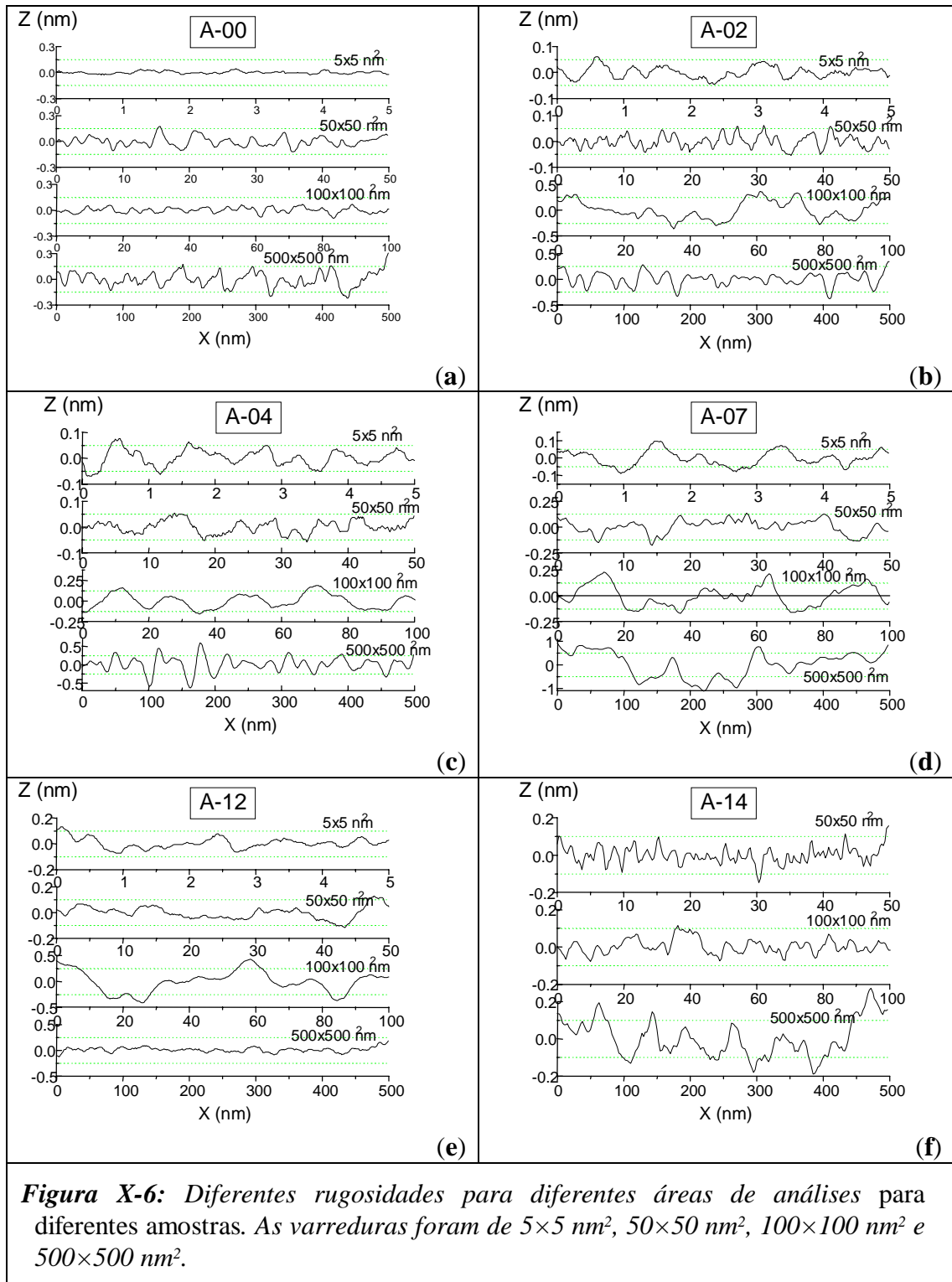
As Figuras X-3, X-4 e X-5 mostram os histogramas e os gráficos tridimensionais das superfícies das seis amostras estudadas, obtidas a partir das quatro áreas de análises consideradas.

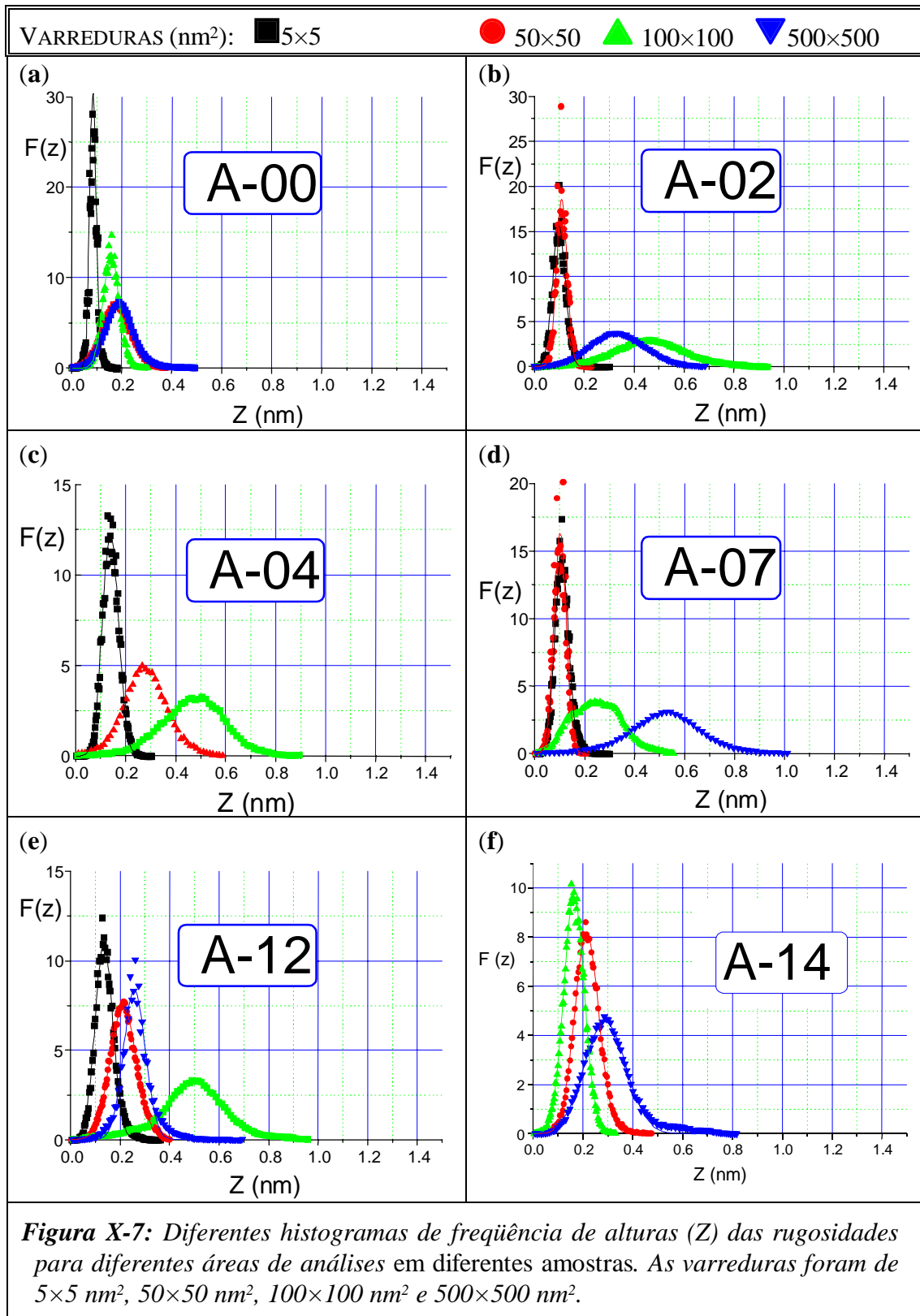
Os gráficos mostrados na Figuras X-6 representam os cortes transversais das topografias das seis amostras analisadas. Os cortes foram obtidos ao longo de uma linha que passa pelo meio da topografia tridimensional. A Figura X-7 mostra todos os histogramas de frequências normalizadas das seis amostras analisadas.











A idéia deste trabalho é analisar₁₄₉ como os parâmetros que medem a rugosidade se

comportam com a variação áreas de análises e com diferentes superfícies. A utilização de diferentes tempos no processo de oxidação teve a função de obter amostras com superfícies de diferentes rugosidades.

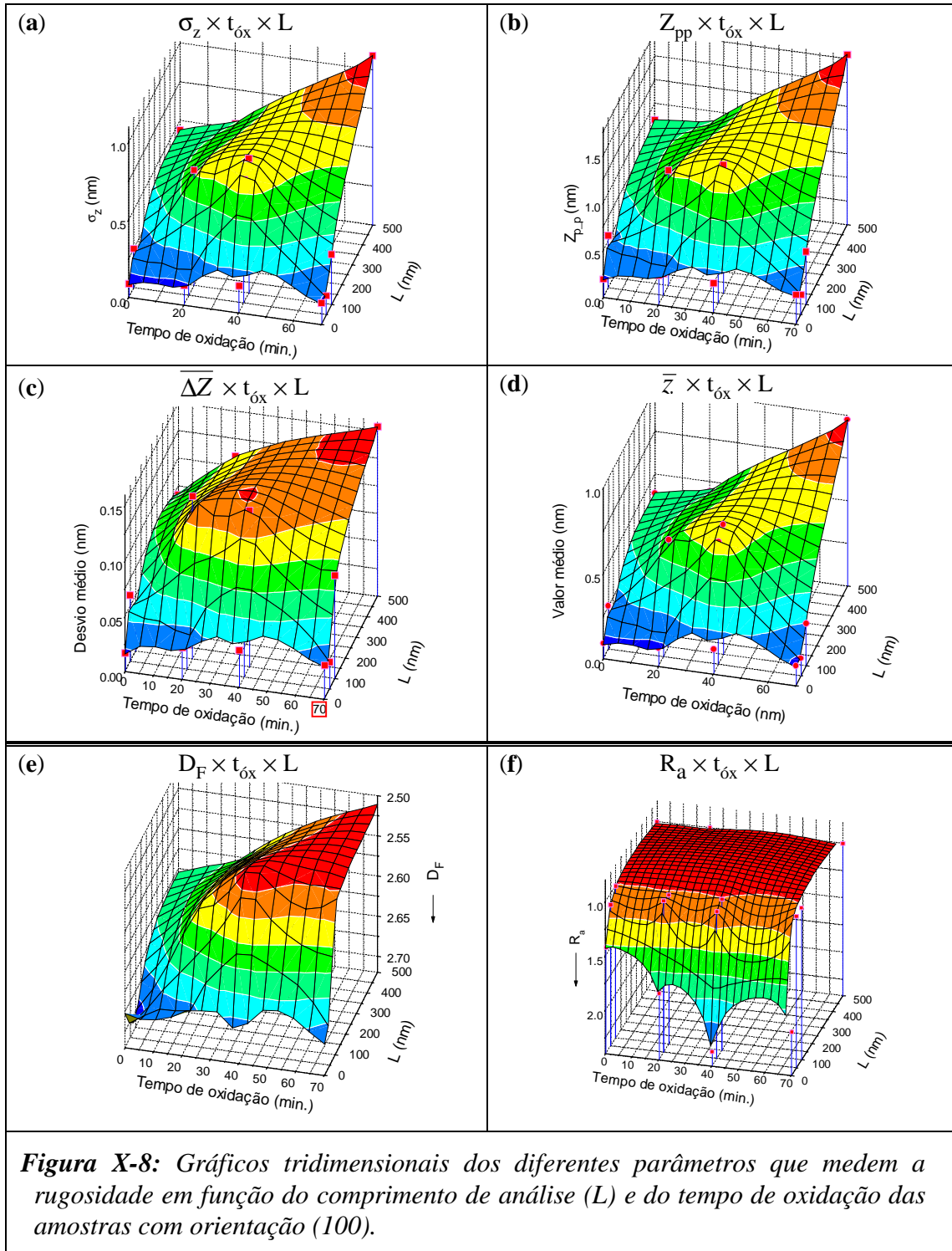
Os valores dos diferentes parâmetros de rugosidades, obtidos a partir das topografias tridimensionais digitalizadas das seis amostras, mostradas nas Figuras X-3, X-4 e X-5, estão listados na Tabela X-3. Os parâmetros obtidos foram: valor médio das alturas Z (\bar{Z}), valor de pico-a-pico de Z (Z_{pp}), desvio padrão de Z (σ_z), desvio médio de Z ($\overline{\Delta Z}$), dimensão fractal (D_F) e razão das áreas (R_a).

Na Figura X-8 são plotados, em função do tempo de oxidação e do comprimento da área de análise (L), os diferentes parâmetros associados à rugosidade das amostras com orientação (100), listados na Tabela X-3. Todos os gráficos têm a orientação dos eixos X e Y semelhantes. O eixo Z do gráfico da dimensão fractal e da razão das áreas foram invertidos, com o objetivo de evidenciar as semelhanças entre os gráficos de medida de rugosidade.

Tabela X-3: Resumo dos parâmetros associados à rugosidade, obtidos para cada uma das amostras em diferentes áreas de análises.

AMOSTRA	L (nm)	\bar{Z} (nm)	Z_{pp} (nm)	σ_z (nm)	$\overline{\Delta Z}$ (nm)	D_F *	R_a
A-00	5	0,08386	0,18189	0,01569	0,08387	2,67	1,430536
A-00	50	0,25159	0,54795	0,05975	0,2516	2,71	1,102491
A-00	100	0,15634	0,30756	0,03318	0,15635	2,71	1,006174
A-00	500	0,38848	0,82624	0,06693	0,43849	2,63	1,001040
A-02	5	0,09985	0,30307	0,02797	0,12151	2,66	1,793621
A-02	50	0,10895	0,2292	0,02195	0,12622	2,70	1,009601
A-02	100	0,62688	1,21265	0,1473	0,7424	2,56	1,027664
A-02	500	0,44041	0,85616	0,10894	0,52701	2,48	1,000665
A-04	5	0,14002	0,30304	0,03257	0,166	2,69	2,274597
A-04	50	0,71653	1,22978	0,10455	0,79215	2,55	1,049870
A-04	100	0,75975	1,35047	0,14139	0,86732	2,50	1,011904
A-04	500	—	—	—	—	—	—
A-07	5	0,10918	0,3015	0,02968	0,13219	2,68	2,006096
A-07	50	0,10008	0,20684	0,0244	0,11952	2,67	1,008047
A-07	100	0,24707	0,55686	0,09312	0,32327	2,52	1,004391
A-07	500	0,97279	1,79477	0,15365	1,09002	2,43	1,001170
A-12	5	0,1367	0,36369	0,0389	0,16686		2,618797
A-12	50	0,21267	0,40266	0,05458	0,25607		1,026903
A-12	100	0,60238	1,18256	0,14684	0,7132		1,014260
A-12	500	0,26051	0,72008	0,06103	0,30467	2,45	1,000200
A-14	5	—	—	—	—	—	—
A-14	50	0,21528	0,49858	0,05037	0,25489		1,033844
A-14	100	0,16235	0,33656	0,04155	0,19534		1,004159
A-14	500	0,30297	0,81988	0,10488	0,38134	2,53	1,000322

* O erro típico na quantificação de D_F foi de $\pm 0,04$, e é dado pela dispersão no ajuste da reta por mínimos-quadrados.



O que pode ser notado, de imediato, quando os gráficos da Figura X-8 são observados é que, dada uma amostra não existe um valor único para qualquer um dos

seis parâmetros de medida de rugosidade: o parâmetro dependerá da área de análise considerada. Para exemplificar a idéia consideremos a amostra A-02 e o parâmetro desvio padrão (σ_z): os valores são 0,028 nm, 0,022 nm, 0,15 nm e 0,11 nm para as áreas de análises V-5, V-50, V-100 e V-500, respectivamente. Se considerarmos como o “valor verdadeiro” o desvio padrão 0,028 nm, da varredura V-5, teremos uma variação percentual de -21%, 425% e 289% para os desvios padrões 0,022 nm, 0,15 nm e 0,11 nm, respectivamente. Por outro lado, se considerarmos a média dos quatro desvios padrões (0,077 nm) como o “valor verdadeiro” teríamos uma variação percentual de -63%, -71%, 92% e 42% para os desvios padrões 0,028 nm, 0,022 nm, 0,15 nm e 0,11 nm, respectivamente. Neste último caso temos uma dispersão menor nos valores de rugosidade quando comparado com o primeiro caso, porém continuou bastante grande. Se repetirmos esta comparação para as outras amostras e/ou outros parâmetros da Tabela X-3, constataremos o mesmo resultado.

A pergunta que se impõe a partir desta primeira observação é: qual dos quatro números medidos deve ser considerado o valor do desvio padrão da amostra?

A segunda observação importante é que os parâmetros de medida de rugosidade também não têm relação de proporção com as áreas de análises, ou seja, conforme a área de análise aumenta o parâmetro de rugosidade não aumentará necessariamente. Tomemos como exemplo a amostra A-12 e o parâmetro desvio padrão: as medidas são 0,04 nm, 0,05 nm, 0,15 nm e 0,06 nm para as áreas de análises V-5, V-50, V-100 e V-500, respectivamente. O σ_z da varredura V-100 (0,15 nm) foi a que apresentou o maior valor, enquanto que σ_z da maior varredura (V-500) apresentou o segundo maior valor (0,06 nm). Por outro lado, podemos observar pelos gráficos da Figura X-8 que, em média, os parâmetros que medem a rugosidade tendem a aumentar com o aumento da área de análise (L).

A esta segunda observação surgem as perguntas: existe mesmo esta tendência? Se a resposta for afirmativa, qual é o tipo de relação que existe entre as medidas de rugosidade e as áreas de análises.

As respostas para estas perguntas serão desenvolvidas na seção seguinte. O desvio padrão foi escolhido como o parâmetro de medida de rugosidade, mas os outros parâmetros estatísticos (\bar{Z} , Z_{pp} e $\overline{\Delta Z}$) apresentarão comportamentos análogos, já que os histogramas podem ser ajustados pela distribuição normal.

4. Medida do desvio padrão em diferentes posições e tamanhos de áreas de análises

Retomemos o exemplo da amostra A-02, para ilustrar a dispersão do valor do desvio padrão para diferentes áreas de análise em uma mesma amostra. A Figura X-9a mostra o gráfico do valor do desvio padrão das altura em função do comprimento de análise (L), obtida para a amostra A-02. A Figura X-9b mostra os tamanhos relativos, em escala, das quatro áreas de análises quadradas com lados (L) de: 5, 50, 100 e 500 nm.

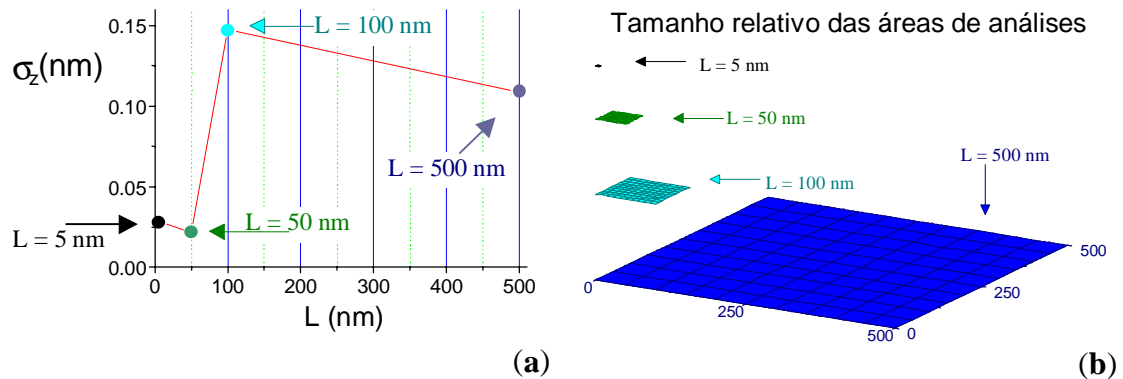


Figura X-9: (a) Desvio padrão da amostra A-02 em função do comprimento de análise. (b) Tamanho relativo das diferentes áreas de análises, comparadas a partir de uma mesma escala.

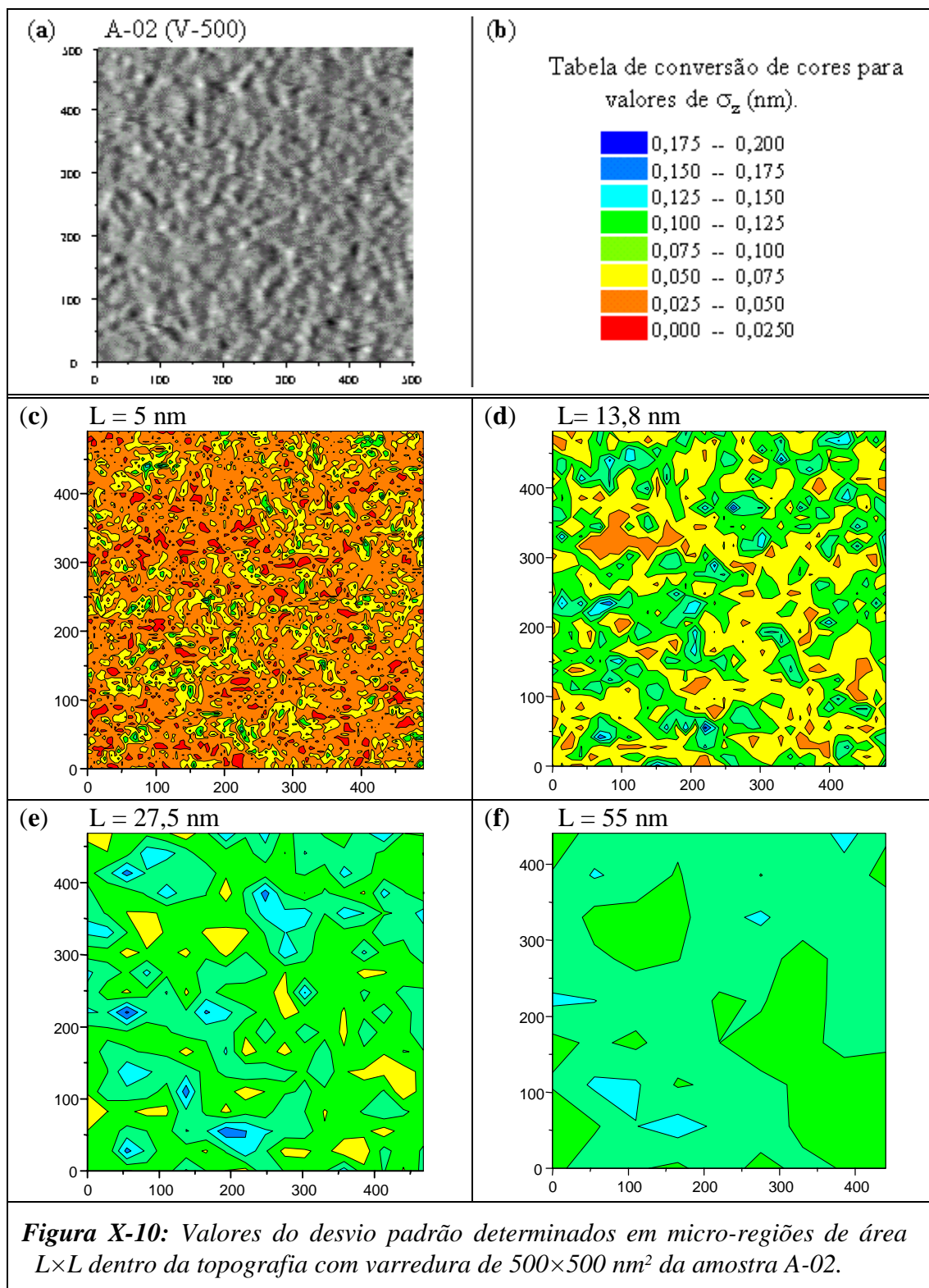
Ao compararmos as Figuras X-9a e X-9b tentaríamos imaginar como uma área de análise menor, como a V-100, poderia conter uma rugosidade maior que a da V-500. Ou seja, a varredura V-500 contém a estrutura obtida pela V-100 e no entanto a sua rugosidade é menor.

Com a idéia de observar o comportamento do desvio padrão, quando medido em diferentes áreas de análises^{154e} diferentes posições na amostra, foram

construídos gráficos bidimensionais mapeando os valores dos desvios padrões locais. O procedimento consistiu em esquadrihar a topografia da amostra A-02 em pequenas micro-regiões quadradas, de lado L, dentro das quais o valor de σ_z local foi determinado. O mapa com os valores do σ_z local foi representado utilizando um gráfico bidimensional, onde a posição da micro-região é representada pelos valores de X e Y, enquanto que o valor do σ_z local é associado a uma cor, segundo uma tabela de cores.

A Figura X-10a mostra a topografia da amostra A-02 para uma área de análise de $500 \times 500 \text{ nm}^2$, sendo que as alturas são dadas em tons de cinza. As cores mais claras correspondem a valores maiores de Z, enquanto que as mais escuras aos menores (veja o gráfico tridimensional desta superfície na Figura X-3g, para $L = 500 \text{ nm}$). Esta topografia foi dividida em pequenos elementos quadrados, de lado (L) 5 nm , e o desvio padrão de Z foi calculado para cada um dos elementos e seu valor associado a uma cor segundo a tabela de cores, mostrada na Figura X-10b. O mapa dos valores de σ_z local, para $L = 5 \text{ nm}$, está representado na Figuras X-10c.

Este procedimento foi repetido para mais três tamanhos diferentes de micro-regiões quadradas, com lados $13,8 \text{ nm}$, $27,5 \text{ nm}$ e 55 nm , e os mapas dos valores de σ_z local estão representados nas Figuras X-10d, X-10e e X-10f, respectivamente.



Podemos observar a partir dos quatro gráficos (Figuras X-10c, X-10d, X-10e e X-10f)

que:

- Se mantivermos o tamanho da área de análise fixa e variarmos a posição da área de análise na amostra, existirá uma dispersão nos valores de σ_z local. A variabilidade nas cores dos quatro gráficos demonstra este fato.
- Para cada tamanho de área de análise $L \times L$, existirá uma cor predominante. Ou seja, os valores de σ_z local se concentrarão em torno de um valor médio de σ_z local ($\bar{\sigma}_z$).
- O valor médio de σ_z local ($\bar{\sigma}_z$) aumenta com o tamanho da área de análise.
- Conforme a área de análise aumenta, começa a prevalecer apenas uma cor no mapa. Ou seja, o valor médio de σ_z local ($\bar{\sigma}_z$) começa a ficar uniforme em todas as posições da amostra.

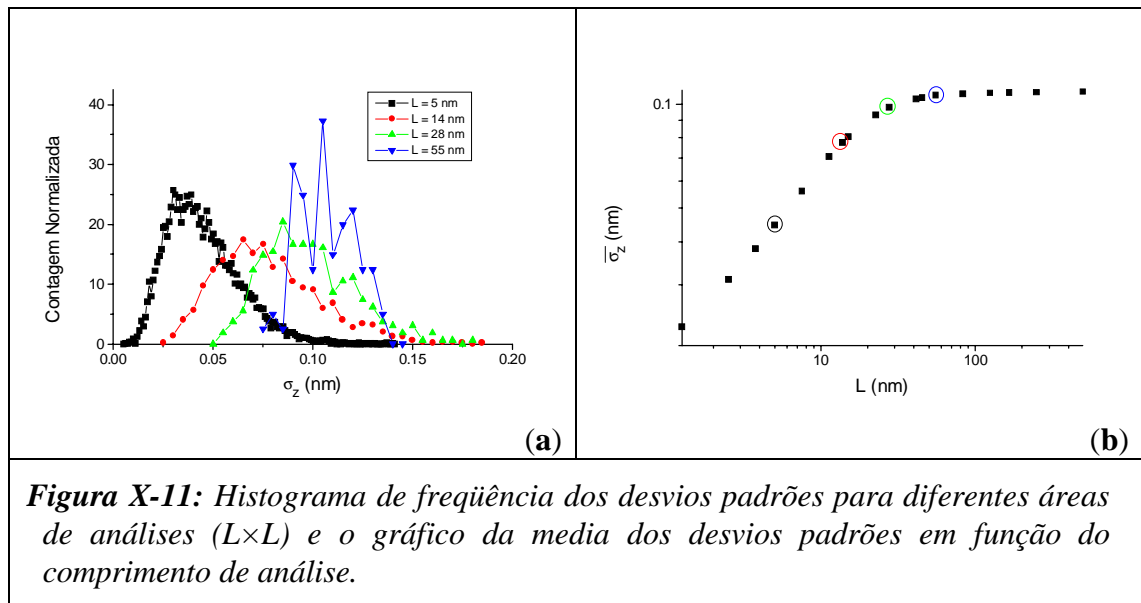


Figura X-11: Histograma de frequência dos desvios padrões para diferentes áreas de análises ($L \times L$) e o gráfico da media dos desvios padrões em função do comprimento de análise.

A Figura X-11a mostra os histogramas de frequência normalizada dos σ_z locais para os quatro gráficos representados nas Figuras X-10c, X-10d, X-10e e X-10f. A Figura X-11b mostra o gráfico di-log do desvio padrão médio ($\bar{\sigma}_z$) em função do lado L do quadrado, que define a área de análise local na qual é quantificado o σ_z local. Estes dois gráficos ilustram as conclusões listadas nos itens a, b e c descritos nos parágrafos anteriores, ou seja:

- a) Para uma área de análise fixa em $L=28$ nm, temos uma dispersão no valor do σ_z local que vai desde 0,05 nm até próximo de 0,2 nm. Para $L=14$ nm a dispersão de σ_z local vai de 0,02 nm até 0,15 nm.
- b) Para cada histograma pode-se observar que os valores de σ_z local se concentram em torno de um valor médio ($\bar{\sigma}_z$): para $L=5$ nm os valores do σ_z local se concentram em torno de 0,03 nm; para $L=28$ nm os valores do σ_z local se concentram em torno de 0,08 nm.
- c) Conforme aumenta o tamanho da área de análise (L) o valor médio de σ_z local ($\bar{\sigma}_z$) também aumenta, conforme mostra o gráfico da Figura X-11b.
- d) Nos histogramas, podemos observar que conforme aumenta o valor de L a dispersão dos valores de σ_z local (largura do histograma) também diminui.

Observe no gráfico da Figura X-11b quatro pontos, que foram destacados com circunferências pontilhadas, que são os valores de $\bar{\sigma}_z$ dos quatro gráficos mostrados na Figura X-10. Além dos quatro valores de L descritos até aqui, outros quatorze valores de L também foram considerados. Os dezoito valores de $\bar{\sigma}_z$ medidos estão representados no gráfico da Figura X-11b.

O gráfico da Figura X-11b mostra uma outra informação importante: a partir de um valor de L os valores de $\bar{\sigma}_z$ ficam praticamente constantes com o aumento de L .

A Figura X-12 mostra o gráfico di-log genérico do comportamento das medidas de $\bar{\sigma}_z$ em função de L , obtidas para as seis amostras analisadas. Podemos observar as seguintes características:

- a) Para valores pequenos de L , existe um comportamento linear com um coeficiente angular igual a α .
- b) Para L acima de um valor crítico (L_c) o valor de $\bar{\sigma}_z$ fica constante e

igual a $\bar{\sigma}_{cte}$.

c) Existe uma região de transição entre estes dois comportamentos.

O comportamento linear observado no item (a) é verificado quando representamos os dados no gráfico di-log. Isso implica numa relação do tipo $\bar{\sigma}_z(L) \propto L^\alpha$.

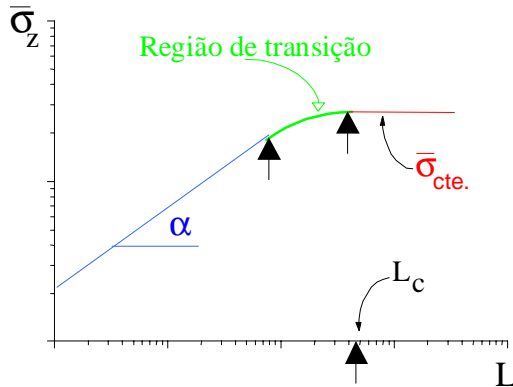


Figura X-12: Gráfico di-log genérico de $\bar{\sigma}_z \times L$ e a interpretação geométrica dos parâmetros L_c e α .

Yoshinobu [2,3,4] fez um modelamento da evolução da interface Si/SiO₂, para o caso da oxidação da superfície do silício, que tinha as seguintes características:

$$\bar{\sigma}_z(L, t_{ox}) \propto \begin{cases} L^\alpha & \text{para } L < L_c \\ (t_{ox})^\beta & \text{para } L > L_c \end{cases} \quad [X-1]$$

sendo que t_{ox} é o tempo de oxidação. O valor encontrado de α ficou entre 0,3 a 0,6. L_c é o comprimento de correlação, determinado experimentalmente a partir da área mínima ($L_c \times L_c$) a partir da qual o valor o desvio padrão permanece constante. Para cada tempo de oxidação (t_{ox}) existirá uma área de análise crítica ($L_c \times L_c$), tal que a quantificação de $\bar{\sigma}_z$ permanecerá constante ($\bar{\sigma}_{cte}$) para áreas de análises maiores.

Kardar et al. [5] propôs um modelo de crescimento de interface, modelo KPZ, com condições semelhantes aos obtidos por Yoshinobu.

A Figura X-13 mostra os gráficos do desvio padrão médio em função do

comprimento de análise para as diferentes amostras analisadas. Os coeficientes α foram obtidos a partir do coeficiente angular da parte linear crescente da curva.

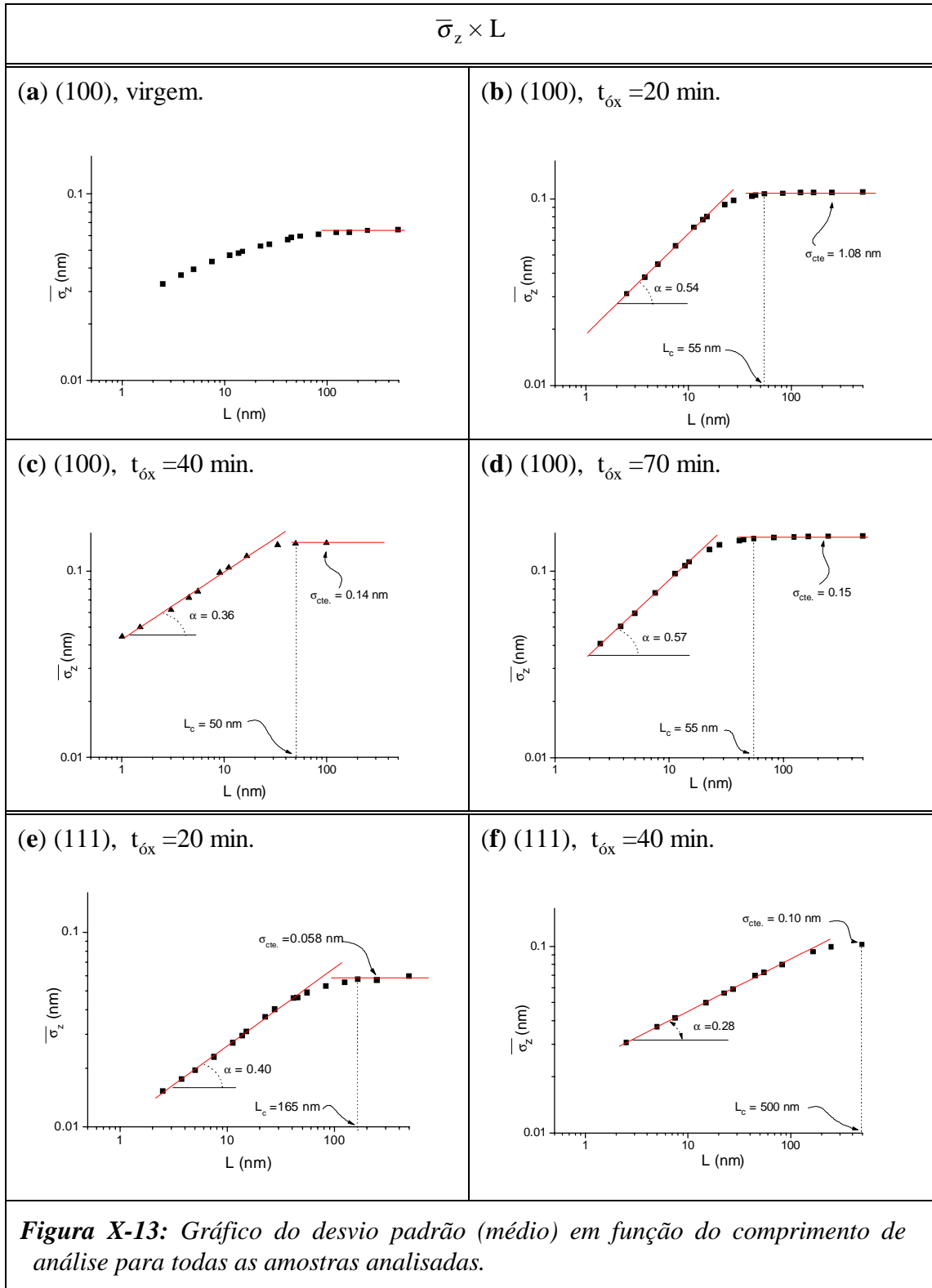
A determinação do parâmetro L_c não tem uma boa precisão, pois os eixos estão em escalas logarítmicas e o ponto exato onde a curva passa a ser constante não é bem definido, devido a região de transição.

O gráfico **(a)**, da Figura X-13, mostra a curva de $\bar{\sigma}_z \times L$ para a amostra virgem com a varredura V-500. Pode-se observar neste gráfico uma constância do valor de $\bar{\sigma}_z$ em torno de 0,06 nm para valores de L maiores que 100 nm. No entanto, o comportamento linear observado nos outros gráficos, para $L < L_c$, não está evidente nesta curva (nem para as áreas de análises menores). Uma possível explicação para a não linearidade seria o fato da superfície não ter sofrido o processo de oxidação, e portanto, não obedecer as regras mostradas na equação [X-1].

Os gráficos **(b)**, **(c)** e **(d)** da Figura X-13 representam os valores de $\bar{\sigma}_z$ em função de L para as amostras com orientação (100) oxidadas, com os tempos de 20 minutos, 40 minutos e 70 minutos, respectivamente. Podemos observar nesses gráficos que o comportamento linear crescente e a saturação de $\bar{\sigma}_z$ para $L > L_c$ está bem claro.

Os gráficos **(d)** e **(f)** da Figura X-13 representam os valores de $\bar{\sigma}_z$ em função de L para as amostras com orientação (111) oxidadas, com os tempos de 20 minutos e 40 minutos, respectivamente. Nesses dois gráficos pode-se observar o padrão de comportamento linear para valores pequenos de L , enquanto que para $L > L_c$ o valor de $\bar{\sigma}_z$ fica invariante.

A Tabela X-4 mostra os valores de α , L_c e $\bar{\sigma}_{cte}$, obtidos a partir dos gráficos da Figura X-13.



Os valores de $\bar{\sigma}_{\text{cte}}$ ficaram em 0,108 nm, 0,14 nm e 0,15 nm para os tempos de

20 minutos, 40min. e 70 minutos, respectivamente. Este resultado corrobora a previsão do modelo o modelo de KPZ [5] (veja as regras mostradas na equação [X-1]) onde o valor de $\bar{\sigma}_{cte}$ tende a aumentar em função do aumento do tempo de oxidação (t_{ox}).

Tabela X-4: Valores do comprimento de correlação (L_c) e α obtidos a partir das topografias das amostras estudadas neste trabalho.

Amostra	L_c (nm)	α	$\bar{\sigma}_{cte}$ (nm)
A-00	100	—	0,06
A-02	55	0,54	0,11
A-04	50	0,36	0,14
A-07	55	0,57	0,15
A-12	165	0,40	0,58
A-14	500	0,28	0,10

No estudo de Yoshinobu [2] o valor de $\bar{\sigma}_{cte}$ ficou em 0,3 nm para o caso de um filme de óxido de 16 nm. A espessura estimada para o A-07 é de 11,7 nm, e o valor de $\bar{\sigma}_{cte}$ ficou em 0,15 nm. Comparando estes dois resultados, a regra da equação [X-1] continuou sendo verificada.

Os valores de $\bar{\sigma}_{cte}$ para as duas amostras com orientação (111) tiveram valores que corroboraram a regra da equação [X-1]: o valor de $\bar{\sigma}_{cte}$ aumentou para um tempo de oxidação maior. É interessante observar que os valores de $\bar{\sigma}_{cte}$ para as amostras com o mesmo tempo de oxidação e orientações diferentes, (100) e (111), tiveram valores bem diferentes. As amostras com orientação (111) registraram os menores valores de $\bar{\sigma}_{cte}$.

Para as amostras com orientação (100) o valor de L_c ficou praticamente constante em aproximadamente 50 nm. Por outro lado, as duas amostras com orientação (111) tiveram valores bem diferentes para L_c : 165 nm e 500 nm. Os valores de L_c para as amostras com orientação (111) tiveram os maiores valores de L_c .

Conforme podemos observar na Tabela X-4, os valores encontrados para α são compatíveis com os encontrados por Yoshinobu [2]: de 0,3 a 0,6.

Mandelbrot [6,7,8,2] demonstra ¹⁶² que α está relacionado com a dimensão fractal

(D_F) da seguinte maneira:

$$D_F = 3 - \alpha . \quad [X-2]$$

Utilizando os valores de α , mostrados na Tabela X-4, na relação X-2 são obtidas as dimensões fractais, que são mostradas na Tabela X-5. Nesta tabela são mostrados também o D_F obtidos pelo algoritmo de contagem de caixas, veja Capítulo IV seção 2.5.

<i>Tabela X-5: Comparação dos valores de dimensão fractal obtidos pelo método de Yoshinobu e pela contagem de caixas.</i>		
Amostra	$D_F = 3 - \alpha$ (Yoshinobu)	D_F (contagem de caixas)
A-02	2,46 \pm 0,01	2,48 \pm 0,04
A-04	2,64 \pm 0,01	2,50 \pm 0,04
A-07	2,43 \pm 0,01	2,43 \pm 0,04
A-12	2,60 \pm 0,01	2,45 \pm 0,01
A-14	2,72 \pm 0,01	2,53 \pm 0,02

É importante observar que a D_F obtida pelo método de Yoshinobu monitora o desvio padrão médio enquanto que o da contagem de caixas monitora o valor do pico-a-pico dentro da área de análise.

5. Resumo das medidas de rugosidades

É importante lembrar também que as rugosidades das interfaces do SiO_2 , quando são analisadas em diferentes escalas apresentam características variáveis. Quando esta interface é observada em uma escala de ampliação do microscópio óptico ela é praticamente plana, veja Figura X-14a. Conforme as ampliações vão sendo feitas, a interface continuará plana, até que, em uma escala crítica, aparece a rugosidade. Após esta escala crítica, quando são feitas as ampliações seguintes o que pode ser observado são sucessões de rugosidades qualitativamente diferentes (veja Figura X-14b e X-14c) que dependerão da escala e da posição em que foram observadas. Pode-se dizer que a rugosidade da interface é bastante complexa, e vai se modificando conforme vão se sucedendo as ampliações,

passando de uma morfologia planar para rugosa, e depois para uma estrutura discreta, onde a idéia de fronteira entre dois materiais desaparece dando lugar à átomos distribuídos no espaço (veja Figura X-14d). Obviamente entre a escala **a** e **d** poderá existir uma variedade maior de complexidade que as que foram representadas nesta seqüência de figuras.

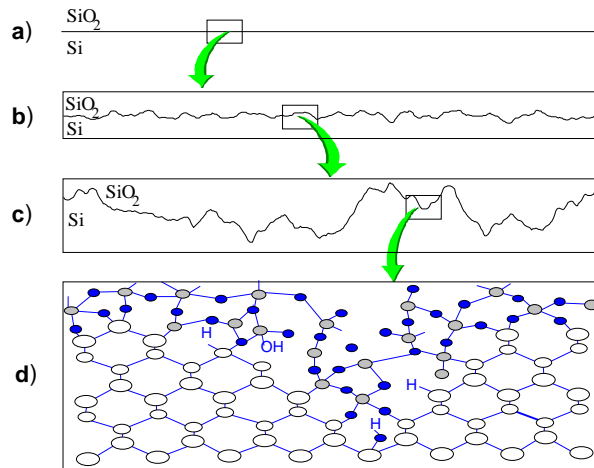


Figura X-14: Interface do Si/SiO₂ observadas a partir de diferentes áreas de análises.

A Figura X-14 pode ser considerada um sumário das rugosidades observadas nas interfaces do Si/SiO₂. Ao observarmos a interface a partir de uma escala suficientemente grande teremos uma superfície homogênea e uniforme, como mostra a Figura X-14a. Por outro lado, se observarmos em uma escala suficientemente pequena teremos apenas uma distribuição discreta de átomos, como está representado na Figura X-14d. As Figuras X-14b e X-14c representam as escalas onde as rugosidades podem ser observadas.

A Figura X-14a representa as escalas onde o valor da rugosidade é uniforme e homogêneo. No nosso caso, podemos associar a essas escalas um valor de rugosidade constante e igual a $\bar{\sigma}_{cte}$, como mostram os gráficos da Figura X-13.

A área de análise $L_c \times L_c$ representa a escala onde é observada a transição entre a superfície uniforme e homogênea (Figura X-14a) para uma superfície desordenada (Figura X-14b).

As Figura X-13b e X-13c representam as escalas onde as rugosidades têm o comportamento desordenado. As Figuras X-10d e X- 10e ilustram o grau de heterogeneidade da medida da rugosidade nessas escalas.¹⁶⁴Nesse caso o valor da rugosidade dependerá da

posição e da escala em que for medida, mas respeita a seguinte regra [6]:

$$\bar{\sigma}_z = k L^\alpha \quad [\text{X-3}]$$

onde $\bar{\sigma}_z$ é o desvio padrão médio, medido a partir de uma área de análise quadrada de lado L. O valor de α é que irá caracterizar uma dada topografia da interface Si/SiO₂.

Os valores de $\bar{\sigma}_{cte}$, L_c e de α dependerão de vários fatores, tais como os parâmetros de oxidação (t_{ox}) e a orientação da superfície do silício. A Figura X-13 mostra os valores de $\bar{\sigma}_{cte}$, L_c e de α para amostras com diferentes condições de crescimento de óxido e de orientação de superfície de silício.

Das análises de rugosidade de uma amostra em diferentes escalas pode-se concluir que o comprimento de correlação (L_c) de uma dada rugosidade é um limite tecnológico para a largura do eletrodo de porta (W) a ser construído no conjunto Si/SiO₂. O motivo desta afirmação é que a medida da rugosidade em áreas de análises menores que $L_c \times L_c$ é fortemente dependente da posição em que a área de análise é tomada dentro da amostra analisada, conforme mostram os gráficos das Figura X-10 e X-13.

A resolução vertical do equipamento de medida é muito importante na determinação das topografias das interfaces Si/SiO₂, pois as variações de alturas são muito pequenas. Na Figura X-8 pode-se observar que o maior valor do pico-a-pico de Z (Z_{pp}), dentre todas as amostras medidas, foi de 1,8 nm, o que dá aproximadamente três parâmetros de rede do silício. Isto significa que a altura variou três parâmetros de rede [9, 10], ou sete átomos, ao longo de um percurso lateral de 1000 parâmetros de rede (500 nm).

No que se refere ao incremento do campo elétrico local devido às rugosidades, um dos aspectos mais significativo da rugosidade é o valor do pico a pico, pois está intimamente relacionado com o estreitamento do dielétrico e o aumento do gradiente de potencial, e o conseqüente aumento do campo elétrico local.

6. Bibliografía

- 1 VAN DER MEULEN, Y.J J. Electrochem. Soc., Vol.119, p.530 (1972).
- 2 YOSHINOBU, T. et al. Jpn. J. Appl. Phys., Vol.33, p.383 (1994).
- 3 YOSHINOBU, T. et al. Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol.367, p.329 (1995).
- 4 YOSHINOBU, T. et al. J. Vac. Sci. Technol. B, Vol.13 (4) p.1630 (1995).
- 5 KARDAR, M; PARISI, G.; ZHANG, Y. Phys. Rev. Lett., Vol.56 (9), p.889 (1980).
- 6 MANDELBROT, B.B. The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York, (1982).
- 7 MANDELBROT, B.B. Phys. Scripta, Vol.32, p.257 (1985).
- 8 FEDER, J. Fractals, Chap. 10-14, Plenum, New York (1988).
- 9 KITTEL, C. Introducción a la Física del Estado Sólido, Reverté, S.A, Espanha (1976).
- 10 MULLER, R.S; KAMINS, T.I Device Electronics for Integrated Circuits, Wiley&Sons, New York (1986).

Capítulo XI

Simulação de Capacitores MOS com Diferentes Estruturas

1. Introdução

Os resultados obtidos das simulações com diferentes estruturas são apresentados da seguinte maneira: gráfico 3D da intensidade dos campos elétricos, histograma das intensidades dos campos elétricos locais, gráfico mostrando a distribuição espacial dos vetores campos elétricos, e das curvas equipotenciais, nas vizinhanças do defeito simulado. Em alguns casos, quando necessários, serão mostrados gráficos e tabelas adicionais.

2. Capacitor MOS ideal

A distribuição dos campos elétricos para o capacitor ideal foi obtida para ser utilizada como referência na comparação com outras estruturas, que apresentarão defeitos estruturais e elétricos.

O resultado da simulação do capacitor ideal é mostrado na Figura XI-1, que é um gráfico da intensidade do campo elétrico em função da posição x e y . Neste gráfico a intensidade do campo elétrico local apresenta um comportamento bastante uniforme dentro do dielétrico, com valor de 11,7 MV/cm. No lado do semicondutor apresenta um campo elétrico relativamente elevado próximo à interface Si/SiO₂, decaindo exponencialmente para valores desprezíveis para profundidades maiores que 5 nm.

O valor estimado do campo elétrico médio ($|\vec{\mathcal{E}}_{\mathcal{M}}| = \mathcal{E}_{\mathcal{M}}$) que recai sobre o

óxido para esta configuração, é obtido pela relação:

$$\mathcal{E}_M = V_P/d_{\text{óx}}, \quad [\text{XI-1}]$$

sendo $V_P = -24 \text{ V}$ e $d_{\text{óx}} = 20 \text{ nm}$, teremos $\mathcal{E}_M = -12 \text{ MV/cm}$.

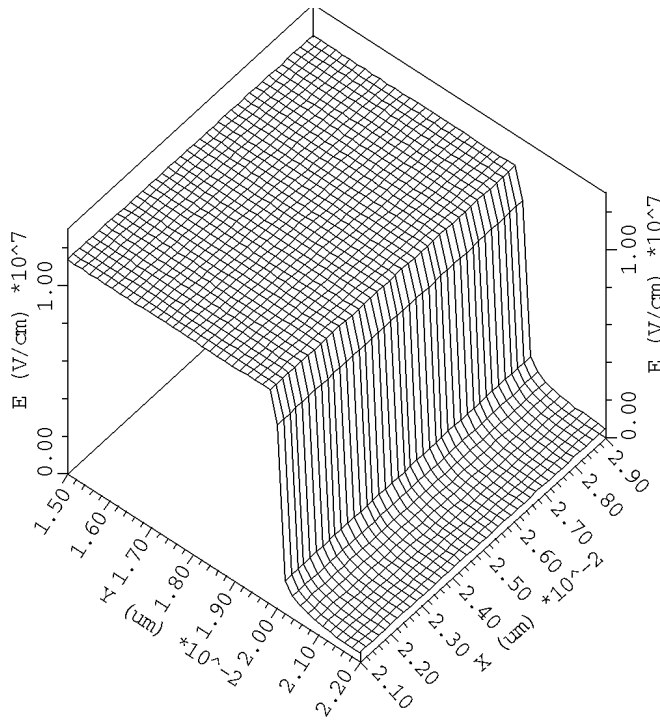


Figura XI-1: Campo elétrico local em um capacitor MOS ideal. No dielétrico o campo elétrico foi uniforme e igual a 11,7 MV/cm.

A Equação XI-1 não leva em conta a diferença da função trabalho entre o alumínio e o silício, que fará com que o equilíbrio termodinâmico do conjunto Al/SiO₂/Si seja obtido às custas da criação de um campo elétrico (\mathcal{E}_{str}) dentro do SiO₂. O campo elétrico \mathcal{E}_{str} é devido apenas à equalização das funções trabalho do Al e do Si, e é dado por:

$$\mathcal{E}_{\text{str}} = ((\xi + \chi) - \phi_M)/d_{\text{óx}} \quad [\text{XI-2}]$$

substituindo os valores teremos: $\mathcal{E}_{\text{str}} \cong 0,46 \text{ MV/cm}$. Como o valor de ξ depende da dopagem do substrato de silício, o valor de \mathcal{E}_{str} também dependerá. Observe que \mathcal{E}_{str} é independente de V_P .

Para uma estrutura ideal, a Equação XI-1 pode ser corrigida considerando \mathcal{E}_{str} :

$$\mathcal{E}_M = V_P/d_{\text{óx}} + \mathcal{E}_{\text{str}} \quad [\text{XI-3}]$$

O potencial que irá "recair" sobre o dielétrico não será exatamente V_P , pois parte desta diferença de potencial estará no substrato de silício, que tem uma resistividade diferente de zero. Se houverem cargas fixas no dielétrico ou cargas nas interfaces do dielétrico, também haverá perturbação adicional na diferença de potencial que irá "recair" no dielétrico. Experimentalmente, o problema é resolvido considerando o potencial de banda plana V_{BP} que é um potencial aplicado na porta e que faz com que as bandas de energias fiquem planas ("flat band"), compensando os efeitos das cargas do dielétrico e o efeito de \mathcal{E}_{str} . O argumento da compensação é de um ponto de vista macroscópico e uma aproximação unidimensional, pois se for analisado em duas dimensões algumas geometrias de distribuições de cargas não poderiam ter o seu efeito anulado apenas com a aplicação de um potencial de porta conveniente. Assim, o potencial que irá recair sobre o dielétrico será a diferença: $V_P - V_{\text{BP}}$, e teremos:

$$\mathcal{E}_M = (V_P - V_{\text{BP}})/d_{\text{óx}} . \quad [\text{XI-4}]$$

A Equação XI-4 se torna uma aproximação melhor quanto maior for a região sob a qual o campo elétrico estiver aplicado, como é o caso de determinação de características I-V de um capacitor. Neste caso o valor do campo elétrico obtido por esta equação é bastante bom para ser utilizada na relação de Fowler-Nordheim para determinação da corrente. A adequação deste campo médio e macroscópico para a determinação da corrente de F-N pode ser explicada pelo fato desta corrente ser medida em uma área macroscópica.

A Figura XI-2 mostra que tanto o vetor campo elétrico (XI-2a) como as linhas de equipotenciais (XI-2b), dentro da estrutura do capacitor ideal, são paralelos e não apresentam perturbações, como prevê a aproximação de capacitor ideal.

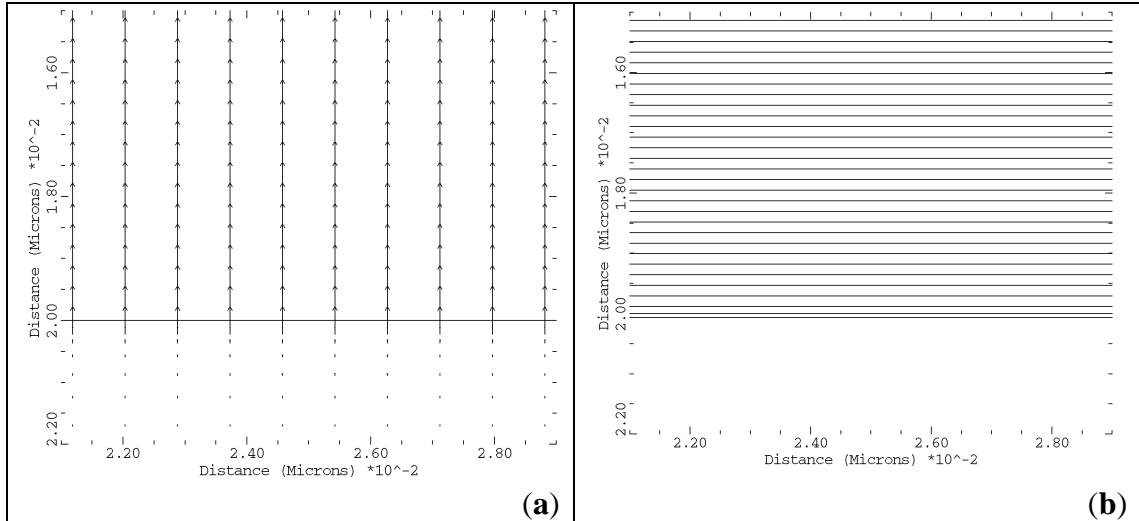


Figura XI-2: Distribuição espacial dos vetores campo elétrico (a) e das curvas equipotenciais (b) no capacitor ideal.

A Figura XI-3 mostra o histograma dos campos elétricos locais no dielétrico e no silício, nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ (correspondente à Figura XI-1). Neste histograma é possível constatar a existência de duas populações distintas de campos elétricos locais: campos "baixos" e "elevados". A população referente aos baixos campos elétricos locais corresponde aos campos dentro do substrato de silício (nas vizinhanças da interface Si/SiO₂), enquanto que os elevados correspondem aos campos dentro do dielétrico.

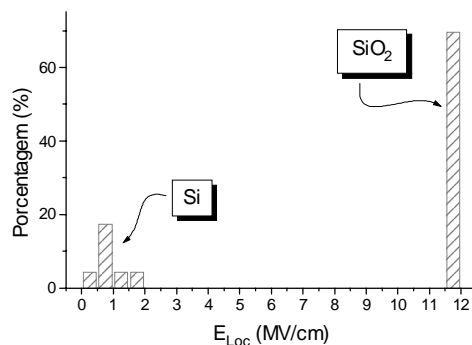


Figura XI-3: Distribuição das intensidades dos campos elétricos locais no dielétrico e no silício. O valor mais provável dentro do SiO₂ é de 11,7 MV/cm.

Na Figura XI-3, o valor médio para os campos correspondentes ao do dielétrico foi de 11,7 MV/cm, desvio padrão foi nulo e o valor máximo do campo elétrico, em todo o capacitor, foi de 11,7 MV/cm, ou seja a distribuição correspondente aos altos

campos, em um capacitor ideal, é uma função delta de Dirac.

Dentro do silício, nas vizinhanças da interface Si/SiO₂, o campo elétrico local variou de zero a 1,9 MV/cm, nas vizinhanças da interface, como mostra o histograma das intensidades dos campos elétricos locais, na Figura XI-3. O valor máximo de \mathcal{E}_{loc} dentro do silício é dado pela continuidade do vetor deslocamento dielétrico na interface Si/SiO₂:

$$\mathcal{E}_{si} = \epsilon_{ox} * \mathcal{E}_{ox} / \epsilon_{si} \quad [XI-5]$$

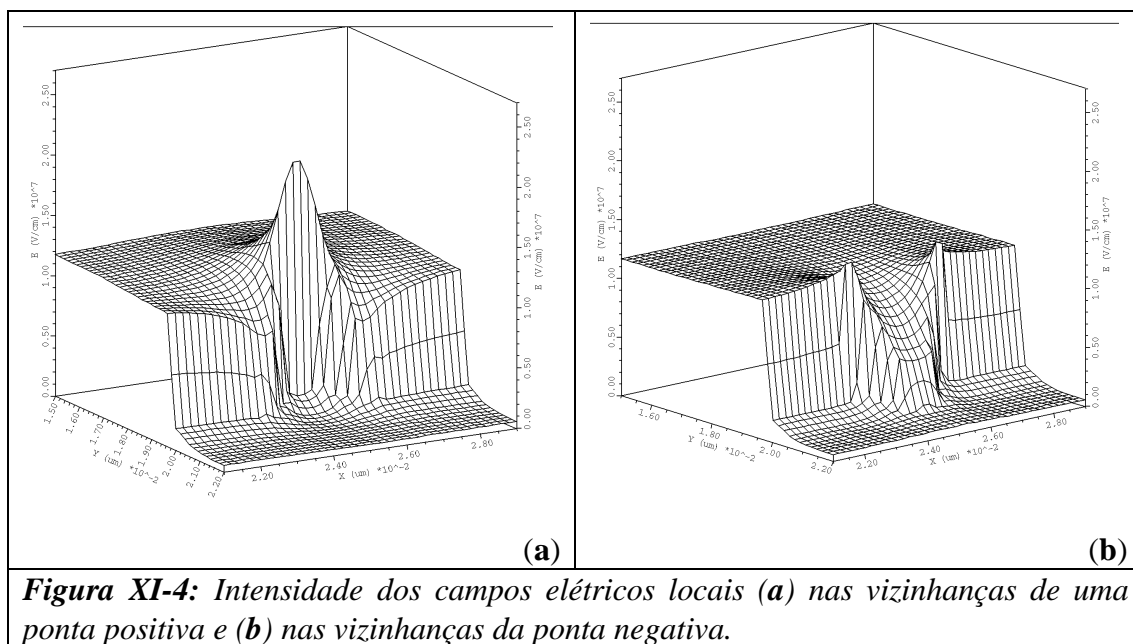
substituindo os valores, $\mathcal{E}_{si} = 3,9$ MV/cm. Este valor vai decrescendo exponencialmente [1], conforme aumenta a distância da interface Si/SiO₂. A uma distância de 2 nm da interface, o valor de \mathcal{E}_{si} já é menor que 1 MV/cm, como mostra a Figura XI-1.

3. Rugosidade Geométrica

Nesta seção serão analisados os resultados das simulações de capacitores MOS com rugosidade estrutural na interface Si/SiO₂, que foram classificados em dois tipos: rugosidade positiva e negativa. Rugosidade positiva é considerada como sendo aquela ocasionada por uma protuberância (ponta) de Si apontando óxido adentro, ocasionando um afinamento local do dielétrico ($d_{loc} < d_{ox}$); por outro lado, a rugosidade negativa é aquela resultante de uma protuberância (ponta) de SiO₂ apontando em direção do silício, causando um alargamento da espessura local do óxido ($d_{loc} > d_{ox}$).

Na Figura XI-4a é mostrado o gráfico das intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma rugosidade (ponta) positiva. A ponta tem formato semi-circular de raio 1 nm; com isso, teríamos um afinamento local de até 1 nm no filme de óxido, que ao invés de 20 nm de espessura, teria 19 nm nesta região. Se for considerado apenas o efeito de afinamento local do óxido o campo elétrico local seria de 12,6 MV/cm, estimado a partir da Equação XI-4, na região onde o óxido é mais fino. No entanto, na estrutura simulada o campo elétrico nas vizinhanças da ponta atinge um valor de até 21,8 MV/cm,

um valor significativamente maior que o valor não perturbado, que é de 11,7 MV/cm, e maior também, em aproximadamente 70% do estimado pela Equação XI-4, se apenas o efeito do afinamento local do óxido fosse considerado. Este efeito adicional de incremento do campo elétrico local é associado à forma da rugosidade (ponta).



A Figura XI-4b mostra o gráfico das intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma ponta negativa. Neste caso não houve um incremento muito acentuado do campo elétrico local, atingindo um valor máximo de 15,0 MV/cm na região onde a interface deixa de ser plana para se tornar curva. Por outro lado, a região da ponta negativa propriamente dita, não apresentou o incremento de campo elétrico observado na ponta positiva. Se a Equação XI-4 fosse utilizada neste caso para a determinação dos campos elétricos locais, o valor maior que o não perturbado, que chegou a 15 MV/cm, não poderia ser explicado, pois na ponta negativa há valores da espessura local d_{loc} igual ou maior que a espessura média d_{ox} . Portanto, haveria apenas valores iguais ou menores que 11,7 MV/cm. A Equação XI-4 é uma equação unidimensional e apenas uma boa aproximação para valores de campos elétricos macroscópicos (médios).

Este incremento no campo elétrico local, devido à rugosidade estrutural,

poderá ser atribuído a dois fatores: afinamento local do dielétrico e ao formato geométrico da ponta, que chamamos aqui de efeito ponta. Em resumo:

- a) O efeito de curvatura da interface, que é praticamente uma equipotencial, impõe uma certa distribuição do potencial no espaço compreendido entre esta interface e a outra, SiO₂/Al. A distribuição de potencial irá resultar num gradiente de potencial variável nas regiões onde a interface é muito acidentada, ou seja rugosa. Como o potencial varia bastante nas vizinhanças da ponta haverá também um campo elétrico elevado nesta região, resultante da equação de Maxwell:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi \quad \text{[XI-6]}$$

- b) O afinamento local do dielétrico terá um efeito bastante interessante: o espaço disponível, entre as duas interfaces do dielétrico, para que o potencial varie de V_p será menor na parte mais fina, resultando em um maior gradiente de potencial aumentando o campo elétrico local.

Veja na Figura XI-5b e XI-6b as linhas de equipotenciais nas vizinhanças da ponta positiva e negativa.

No caso da rugosidade negativa, o segundo fator, acima mencionado, não participa do incremento do campo elétrico local: o fator curvatura é que levou ao incremento do campo na região de transição plano-curvo da interface Si/SiO₂.

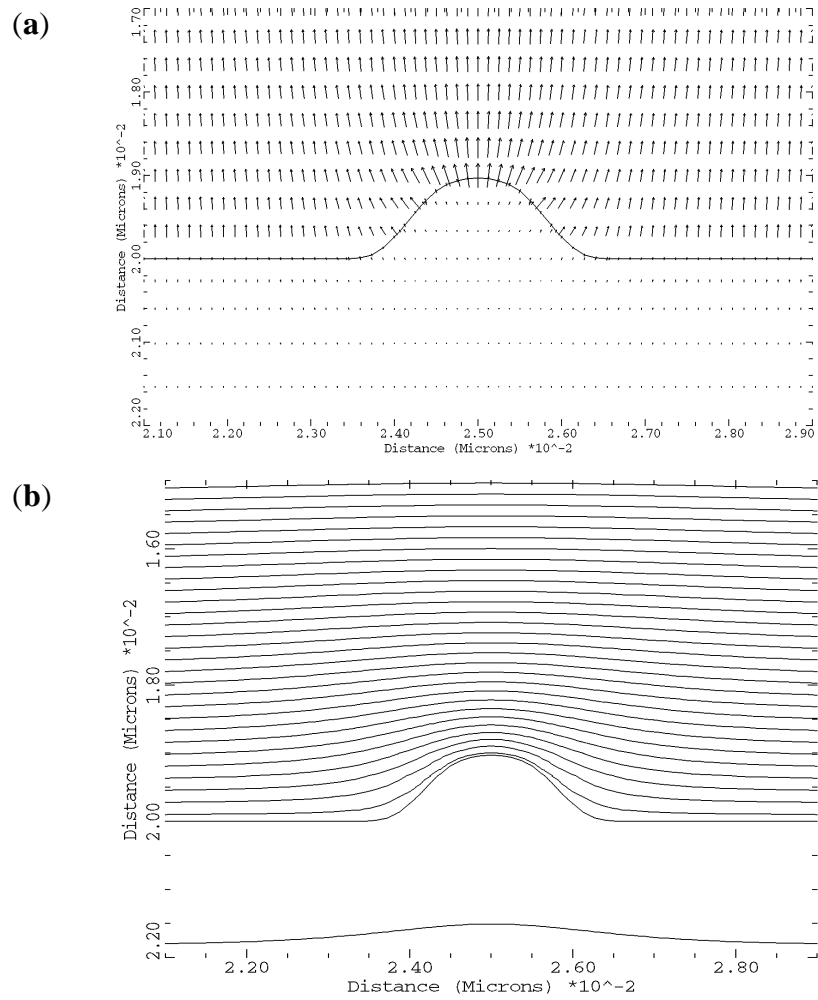


Figura XI-5: (a) Vetor campo elétrico nas vizinhanças da ponta positiva e (b) as linhas equipotenciais.

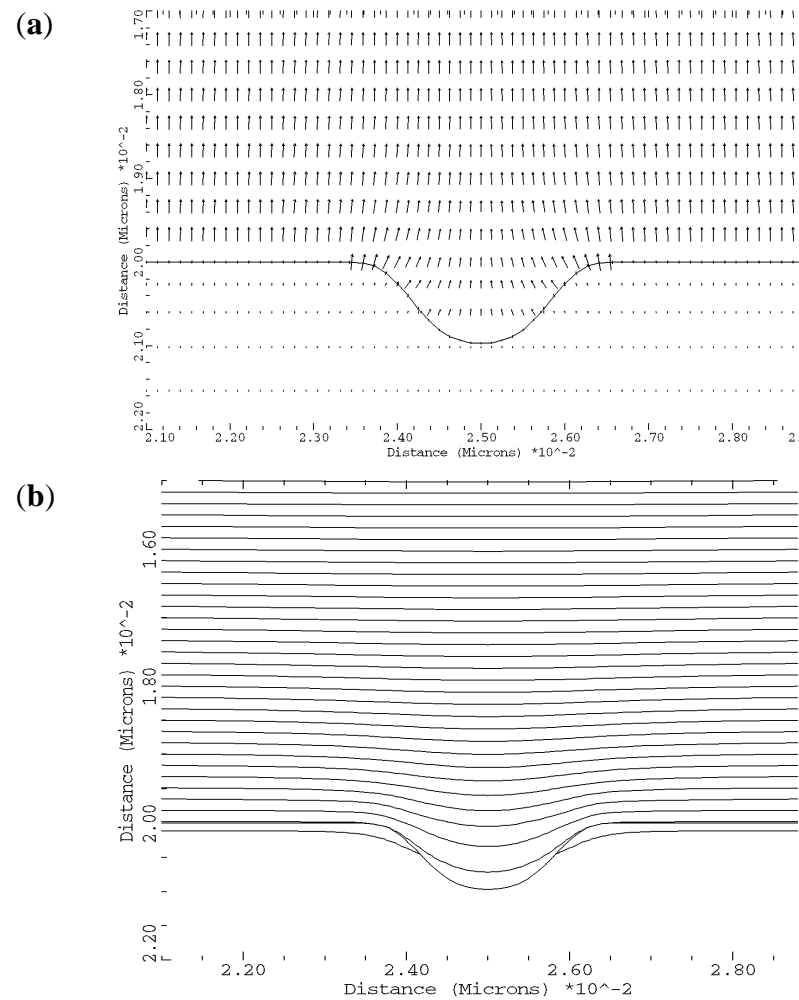


Figura XI-6: (a) Vetor campo elétrico nas vizinhanças da ponta negativa e (b) as linhas de equipotenciais.

A Figura XI-5a mostra a distribuição espacial dos vetores campo elétrico locais, enquanto que na Figura XI-5b estão representadas curvas de equipotenciais, sendo a diferença de potencial entre duas curvas consecutivas de 0,2 Volts. Pela distribuição espacial do vetor campo elétrico podemos constatar que o campo elétrico, nas vizinhanças da interface Si/SiO₂, tende a ser perpendicular a esta interface. As maiores intensidades estão próximas à região em que as espessuras locais são menores. O gráfico das equipotenciais mostrou uma concentração espacial (gradiente elevado) de linhas de equipotenciais sobre a ponta positiva, o que pode ser traduzido como maior campo elétrico local. Dentro do silício, na região da ponta, pode-se observar que houve um aumento da distância entre duas equipotenciais sucessivas, o que significa menor campo elétrico local. Na região onde a interface passa de plano para curva, no lado do dielétrico, há um aumento da distância entre duas equipotenciais, e a conseqüente diminuição do campo elétrico local.

A Figura XI-6a mostra a distribuição espacial dos vetores campos elétricos locais nas vizinhanças de uma ponta negativa. Temos um campo elétrico local bastante intenso na região de transição plano-curvo da interface Si/SiO₂. Na região da ponta propriamente dita, o campo elétrico é bastante pequeno, comparado com o campo elétrico não perturbado. A Figura XI-6b mostra as curvas equipotenciais, sendo que a diferença de potencial entre duas curvas consecutivas é de 0,2 V. Podemos notar que a maior concentração de curvas equipotenciais ocorre na vizinhança da região da interface em que esta deixa de ser plana para se tornar curva induzindo um estrangulamento das linhas de equipotencial. Podemos notar também que dentro do semiconductor o gradiente de potencial é bastante pequeno.

Se for feita uma análise comparativa entre as duas estruturas na região de transição plano-curva da interface pode-se observar que no caso da rugosidade positiva, o campo elétrico nesta região é a menor de todo o dielétrico, enquanto que para a rugosidade negativa esta região é a que apresenta o maior campo elétrico dentro do dielétrico.

A rugosidade positiva tende a estrangular as linhas de equipotenciais, fazendo com que o gradiente de potencial nesta região

campo elétrico local. Enquanto isso, no lado do silício o que foi convencionalmente chamado de rugosidade positiva, tende a aumentar as distâncias entre duas curvas equipotenciais, diminuindo o campo elétrico local nesta região. Para a rugosidade negativa, o estrangulamento das linhas equipotenciais é no lado do silício, mas, devido à pequena variação do potencial neste meio, a perturbação criada por este "estrangulamento" é pequena. No lado do óxido, nesta mesma região, há um alargamento das faixas entre duas equipotenciais consecutivas, e a diminuição do campo elétrico local na região.

É interessante analisar as condições de contorno que são verificadas no dispositivo real, durante seu funcionamento, e que também foram adotadas na simulação: o potencial de porta $V_p = -24V$ é aplicado no eletrodo de porta, e um potencial V_{Si} nulo é aplicado ao substrato de silício, no eletrodo de aterramento na base da lâmina (à aproximadamente 1 mm da interface Si/SiO₂). As implicações destas condições de contorno são que:

- a) As interfaces dos dois eletrodos de alumínio: SiO₂/Al e Si/Al, são equipotenciais, com potenciais de V_p e V_{Si} , respectivamente.
- b) A interface Si/SiO₂ não é necessariamente uma equipotencial.

Tabela XI-1: Valores estatísticos dos campos elétricos locais nas duas estruturas: Positiva e Negativa.

RUGOSIDADE	VALOR MÉDIO (MV/CM)	DESVIO PADRÃO (MV/CM)	MÁXIMO VALOR DE CAMPO (MV/CM)
POSITIVA	12,66904	2,05219	21,775
NEGATIVA	10,97134	1,4666	15,007

Na Figura XI-7a é mostrado o histograma de frequência do campo elétrico local para um capacitor com uma ponta positiva. O valor médio dos campos elétricos correspondentes ao dielétrico foi de 11,9 MV/cm, desvio padrão de 1,4 MV/cm e valor máximo de intensidade de campo foi de 21,8 MV/cm. Neste ponto podemos constatar a diferença entre considerar o efeito ponta e não o considerar. Se apenas o efeito do

afinamento local do óxido fosse considerado, teríamos, pela Equação XI-4, 12,63 MV/cm nas vizinhanças da ponta. Existe uma diferença de aproximadamente 70% entre estes dois valores.

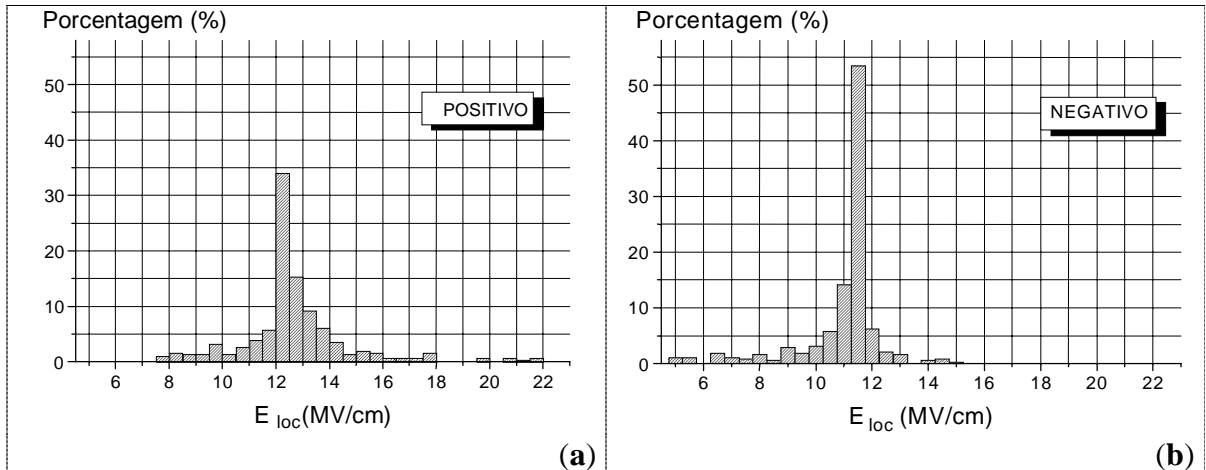


Figura XI-7: Histograma dos valores dos campos elétricos locais para os capacitores com rugosidades positiva (a) e negativa (b).

Se for comparado o histograma do capacitor com rugosidade positiva e o da negativa com o do capacitor ideal, Figura XI-3, pode-se constatar a existência de uma dispersão para os valores dos campos elétricos locais para a estrutura Positiva e Negativa de 2,05 MV/cm e 1,47 MV/cm, respectivamente. O valor médio dos campos elétricos locais para a estrutura Negativa foi menor, 10,97 MV/cm, que a da estrutura ideal, 11,70 MV/cm, enquanto que a da estrutura Positiva foi maior, 12,67 MV/cm.

4. Campo elétrico dentro do silício

A Figura XI-8a mostra o campo elétrico dentro do silício, nas vizinhanças da ponta positiva, e a Figura XI-8b, da ponta negativa. O campo elétrico, nesta região, atinge valores de 1,9 MV/cm, muito superior ao campo de ruptura do silício em uma junção P-N, que é de 0,3 MV/cm [2-4].

Isto suscita uma questão: será que a ruptura do dielétrico não teria início no silício, que ao atingir um campo elevado, para o silício, de 1,9 MV/cm, começa a ter um elevado fluxo

de corrente local, seguido de um aquecimento local (efeito Joule)? A resposta seria negativa porque o mecanismo de ruptura em silício é por avalanche, e para que haja avalanche são necessários, no mínimo, dois elementos:

- a) Um campo elétrico suficientemente elevado para acelerar o elétron, durante o seu livre percurso médio, para atingir energia igual ou maior que a energia de ligação átomo(s)-elétron.
- b) Que a região de campo elétrico elevado seja suficientemente grande para que o elétron efetue um número significativo de colisões (n) com quebras de ligações, para que o processo de avalanche se realize ($\approx 2^n$ elétrons).

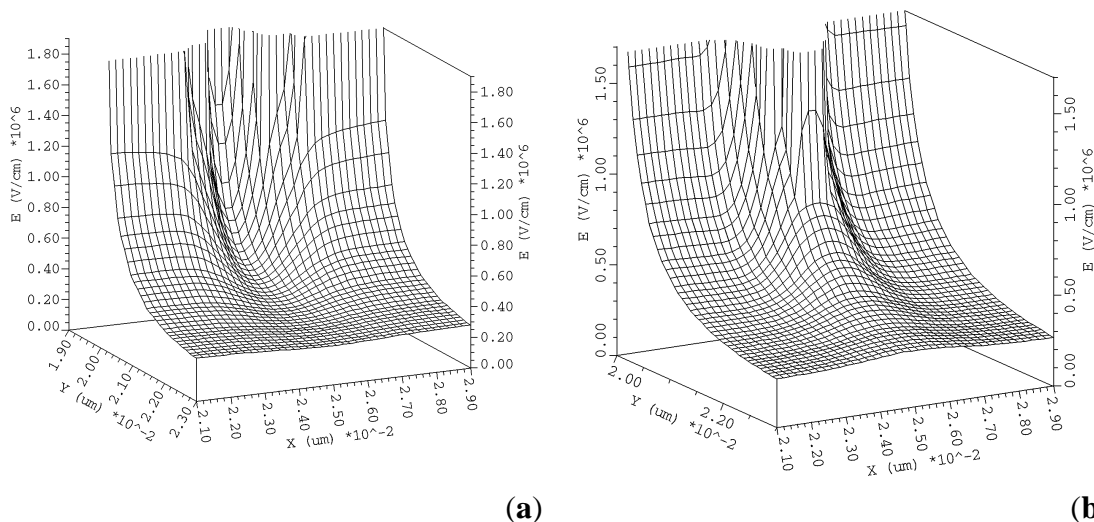


Figura XI-8: Intensidades dos campos elétricos locais no silício nas vizinhanças de (a) uma ponta positiva e (b) uma ponta negativa.

Numa junção P-N, em regime de avalanche, teríamos um campo de 0,3 MV/cm ao longo de uma região depletada, ou seja, com campo elétrico elevado, com largura aproximada de 1000 nm [5].

No caso analisado nesta seção, um campo elétrico de 1,9 MV/cm (seis vezes superior ao da ruptura de uma junção P-N) na interface Si/SiO₂ decai exponencialmente com a distância, para aproximadamente 0,3 MV/cm para uma distância de 3 nm da interface. Isto inviabiliza a ocorrência do processo de avalanche, pois o livre percurso médio do

elétron no silício é de aproximadamente 6,2 nm [4,6]. A condição de campo elétrico elevado é verificada, mas a região abrangida pelo campo elétrico elevado é muito pequena, 3 nm, quando comparado com o livre percurso médio do elétron no silício e com a área em que ocorre avalanche, observada experimentalmente, que é de aproximadamente 10 μm .

Ruptura de silício em capacitores MOS também é observado em regime de depleção profunda, que é obtido através da aplicação de um potencial de porta com uma frequência elevada (> 10 Hz) e uma rampa de potencial de porta também elevada, de forma a não permitir a criação de uma camada de inversão. Assim, a largura da região depletada vai aumentando até a ocorrência de uma ruptura por avalanche no silício. Rusu e Bulucea 1979 [7] determinaram o valor teórico de 60 Volts, para $V_P - V_{FB}$, para um d_{ox} de 50 nm ($\mathcal{E}_M \cong 8,3$ MV/cm) e dopagem de substrato de 10^{15} cm^{-3} . A largura da região depletada, neste caso, é da ordem de 10 μm .

5. Efeito da curvatura de uma rugosidade topográfica na rugosidade eletrônica

Nesta seção foi analisado o efeito da curvatura da rugosidade da interface Si/SiO₂ na perturbação do campo elétrico local, ou rugosidade eletrônica. É interessante observar que a espessura mínima do óxido é de 19,0 nm para as quatro estruturas. A diferença nos raios de curvaturas é obtida às custas do posicionamento conveniente do centro do semicírculo para as quatro estruturas, veja ilustração e detalhes no Capítulo XIII, seção 3. Portanto, os diferentes valores obtidos para o campo elétrico máximo, para as quatro estruturas, podem ser atribuídos apenas à diferença nos raios de curvaturas.

As Figuras XI-9a, b, c e d mostram as intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma ponta positiva com raios de curvaturas diferentes: 0,50 nm, 0,75 nm, 1,00 nm e 2,00 nm, respectivamente. A ponta tem o formato geométrico semi-circular, e é constituída de uma reentrância do silício para dentro do filme de dielétrico (rugosidade

positiva). O valor máximo do campo elétrico local é encontrado dentro do dielétrico e nas regiões próximas à ponta, ou seja, na região onde a espessura local do óxido d_{loc} é menor.

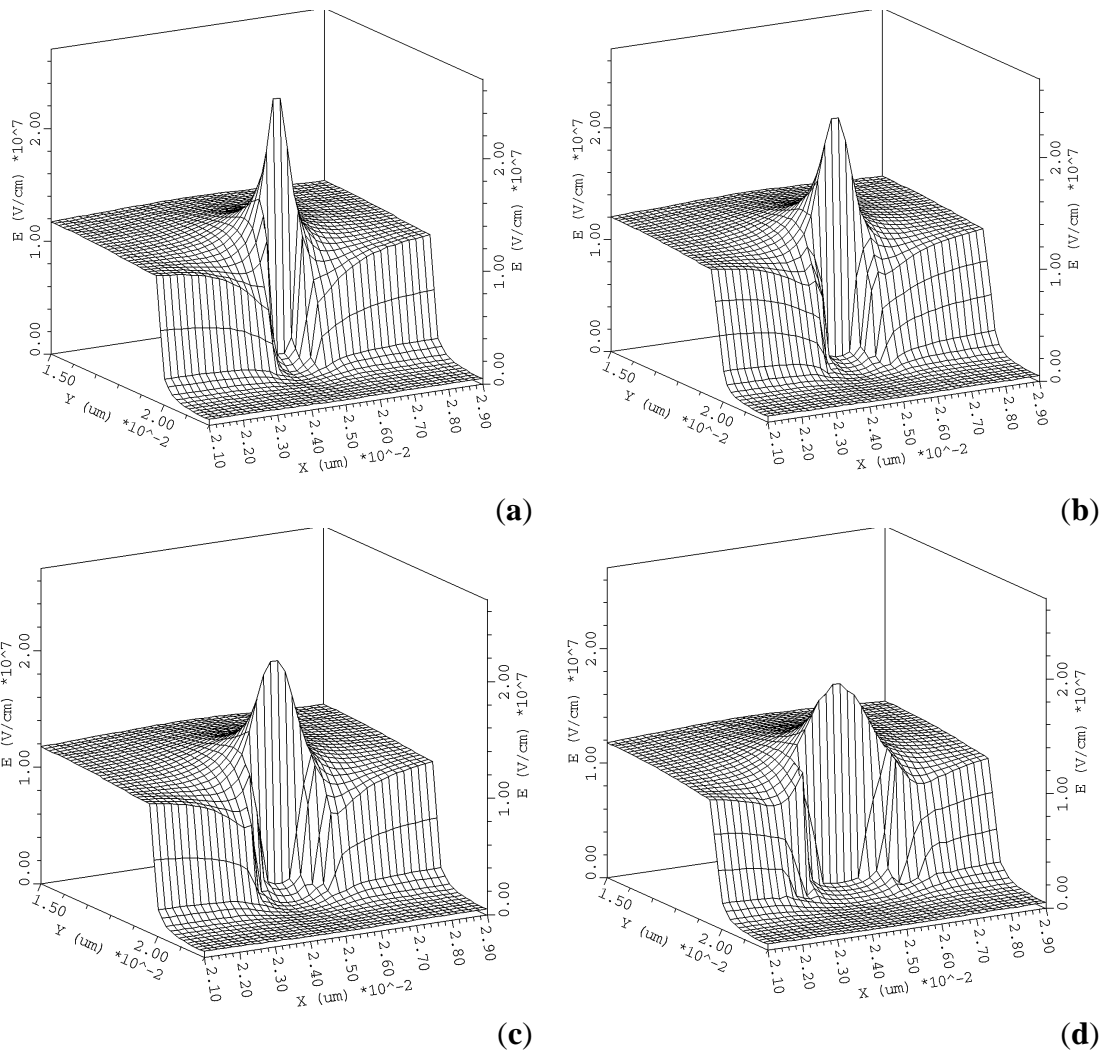
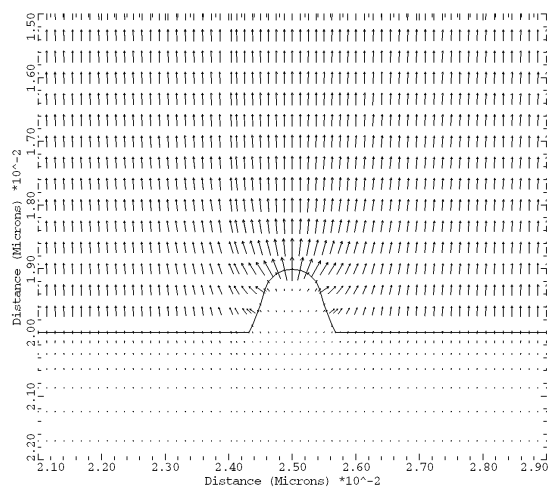
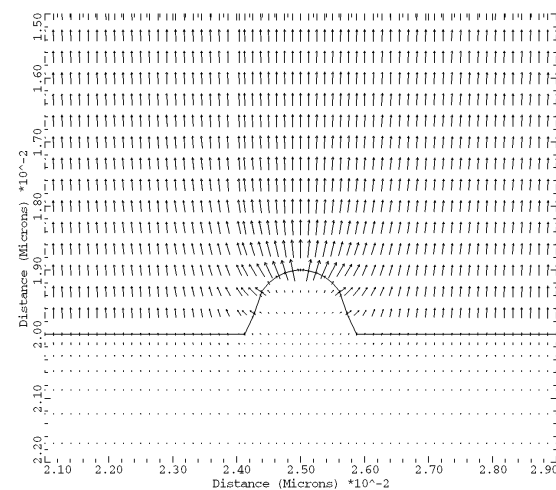


Figura XI-9: Intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma ponta com raio de curvatura R dadas por (a) 0,5nm, (b) 0,75 nm, (c) 1,0 nm e (d) 2,0 nm.

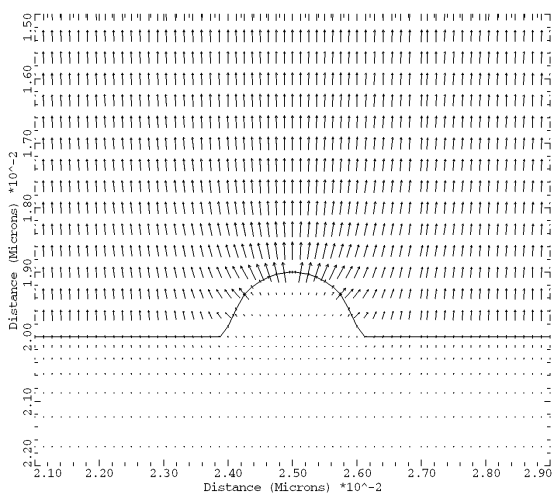
(a)



(b)



(c)



(d)

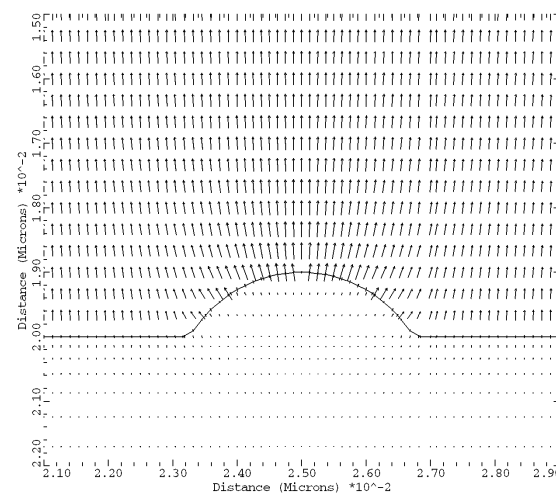


Figura XI-10: Vetor campo elétrico nas vizinhanças de uma ponta com raio de curvatura de (a) 0,5 nm, (b) 0,75 nm, (c) 1,00 nm, (d) 2,00 nm.

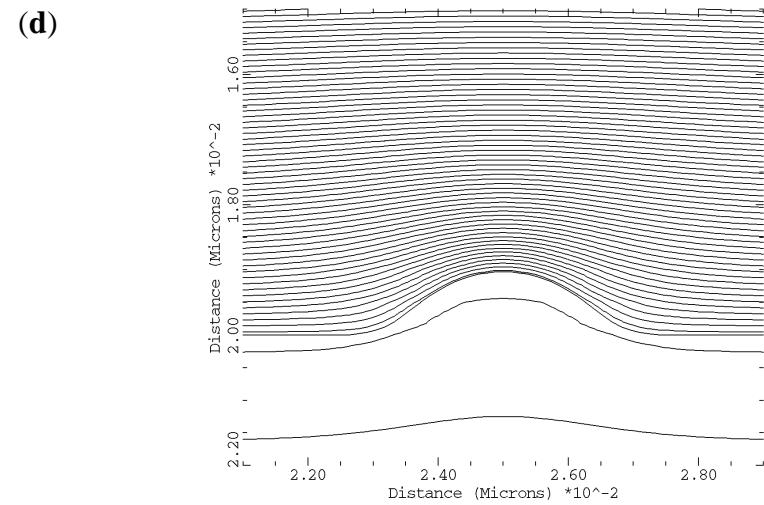
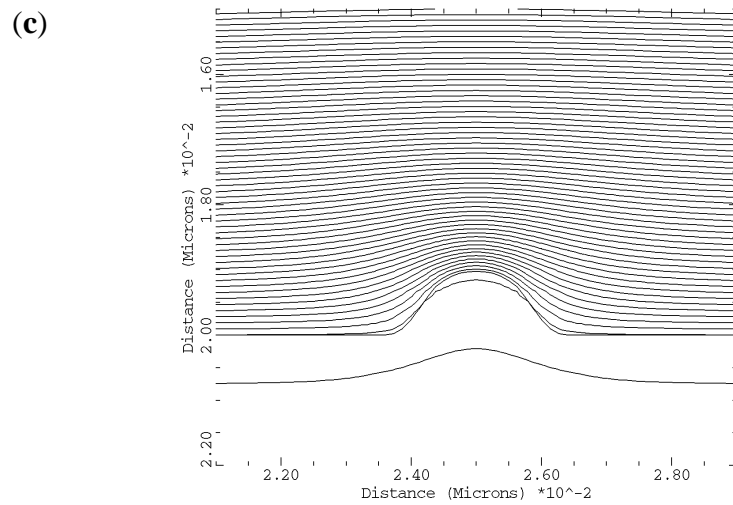
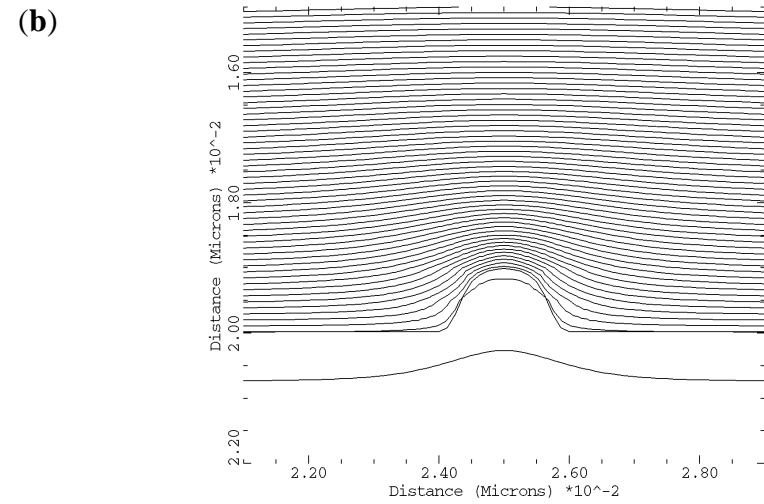
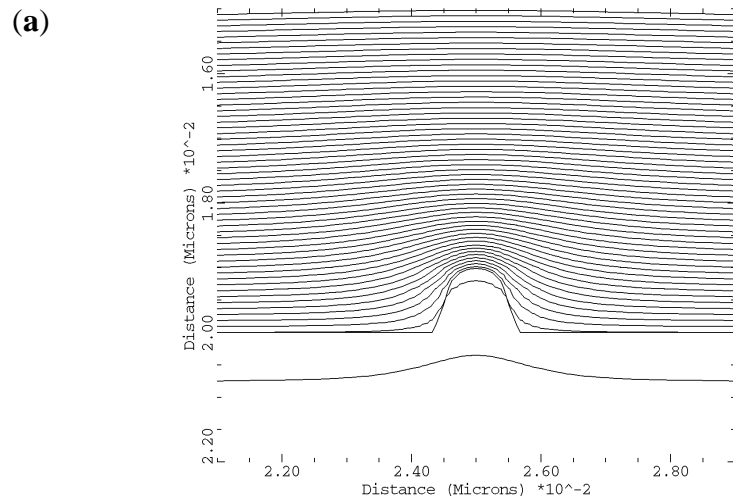


Figura XI-11: Curvas equipotenciais para as estruturas com raio de curvatura a) 0,50 nm (b) 0,75 nm, (c) 1,00 nm e (d) 2,00 nm. A diferença de potencial entre duas curvas equipotenciais consecutivas é de 0,1 V.

Os resultados obtidos para o máximo valor do campo elétrico local estão representados na Tabela XI-2. e na Figura XI-12.

Tabela XI-2: Estatística feita em relação ao campos elétricos locais, em uma área vizinha da ponta.

RAIO (nm)	VALOR MÉDIO (MV/cm)	DESVIO PADRÃO (MV/cm)	MÁXIMO VALOR DE CAMPO (MV/cm)
0,50	12,3003	2,04449	25,376
0,75	12,4395	1,92462	22,961
1,00	12,62522	1,83921	21,184
2,00	12,94878	1,50479	18,705

A Figura XI-12a mostra os valores médios dos campos elétricos locais ($|\vec{\mathcal{E}}|_{loc}$) em função do raio de curvatura da ponta. Os três primeiros pontos estão praticamente sobre uma reta de coeficiente angular de 0,16 e linear de 11,7, enquanto que o quarto ponto, correspondente ao raio de curvatura 2,0 nm, escapa do comportamento linear. Este comportamento linear vem da tendência dos valores médios dos campos elétricos serem obtidos pela seguinte equação:

$$\mathcal{E}_M = (V_P - V_{BP})/d_{ox} + f(R) \quad [XI-7]$$

que é a Equação XI-4 com um fator de correção $f(R)$, associado à rugosidade eletrônica. Como mantivemos a espessura local d_{loc} fixa na ponta (em 19 nm) e variamos o raio de curvatura da ponta, nas regiões vizinhas à ponta, onde foram obtidos estes valores médios, a espessura deixou de ser 20 nm para variar conforme o raio de curvatura da ponta. O coeficiente linear de 11,7 é o valor do campo elétrico sem o efeito da perturbação da ponta; ou para um raio de curvatura nula (ou infinita) ou ainda, para uma área de análise muito maior que a da região que cobre a ponta.

O gráfico da Figura XI-12b mostra o desvio padrão dos campos elétricos locais ($\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$) para diferentes raios de curvaturas. Podemos observar que quanto maior o raio menor será a dispersão dos valores do campo elétrico local. O coeficiente linear tem relação com a área em que foi feita a amostragem dos valores do campo elétrico local.

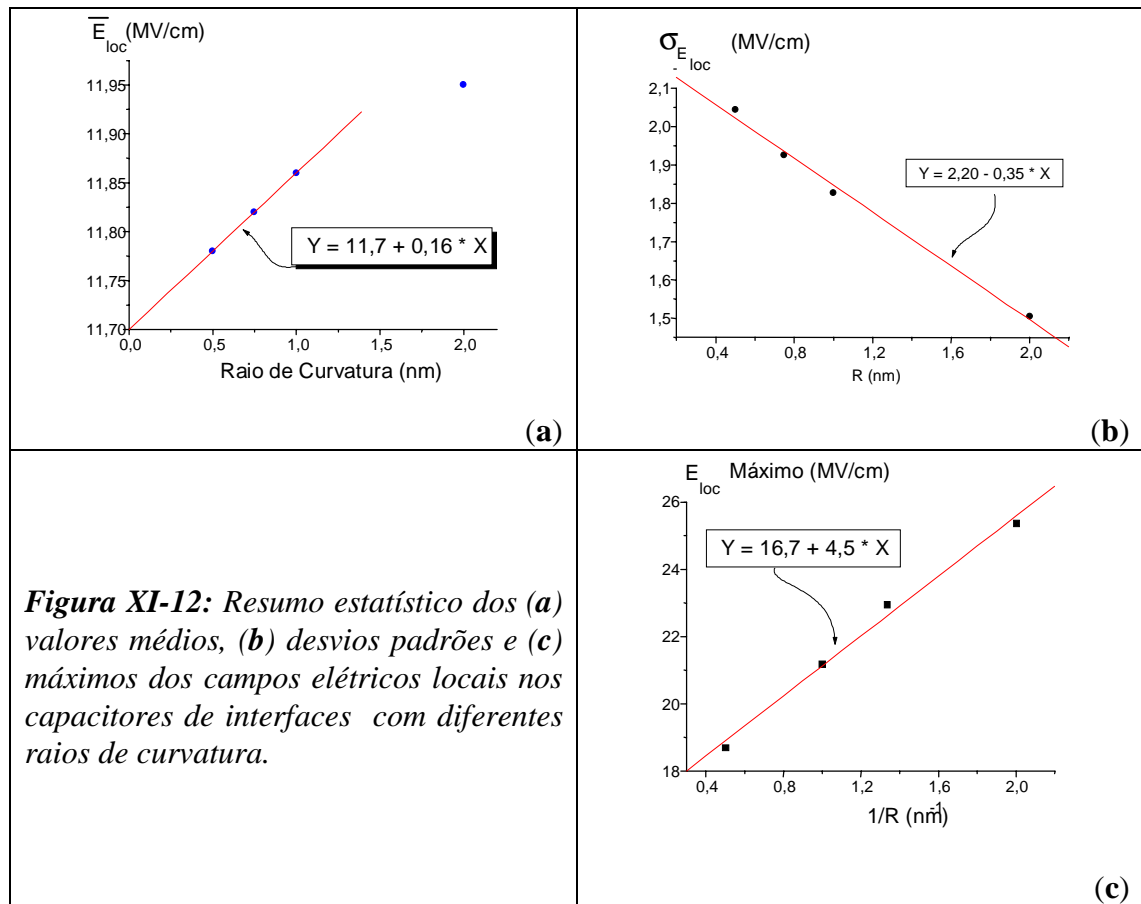


Figura XI-12: Resumo estatístico dos (a) valores médios, (b) desvios padrões e (c) máximos dos campos elétricos locais nos capacitores de interfaces com diferentes raios de curvatura.

O gráfico da Figura XI-12c é o máximo valor do campo elétrico local (\mathcal{E}_{loc} Máximo) em função do inverso do raio de curvatura da ponta. Podemos observar que o máximo valor de \mathcal{E}_{loc} é maior quanto menor for o raio de curvatura, isto é, quanto mais aguda for a ponta.

A Figura XI-13 mostra o gráfico da intensidade do campo elétrico local para as quatro estruturas analisadas mais a da estrutura ideal ao longo de um corte transversal passando pelo meio da rugosidade. Na Figura XI-13a, que mostra as intensidades dentro

do dielétrico, podemos observar que os valores dos campos elétricos locais próximo à interface SiO_2/Al , que não apresentou rugosidades, tendem a um único valor: 11,48 MV/cm, para as quatro estruturas. Podemos observar, também, que a perturbação criada pela ponta se estende até a distância aproximada de 10 nm da interface Si/SiO_2 , sendo esta distância igual para as quatro estruturas analisadas. Esta coincidência, muito provavelmente, está associada ao "casamento" das influências da interface plana, SiO_2/Al , com a da interface rugosa, Si/SiO_2 , e a posição geométrica central é a solução mais trivial. Podemos constatar também que as quatro curvas, correspondentes aos campos elétricos locais, se separam uma da outra à distância de $\approx 2,0$ nm da interface Si/SiO_2 , o que sugere que o incremento do campo elétrico devido ao fator curvatura atua em uma região muito pequena, enquanto que o fator afinamento local do dielétrico tem um alcance maior.

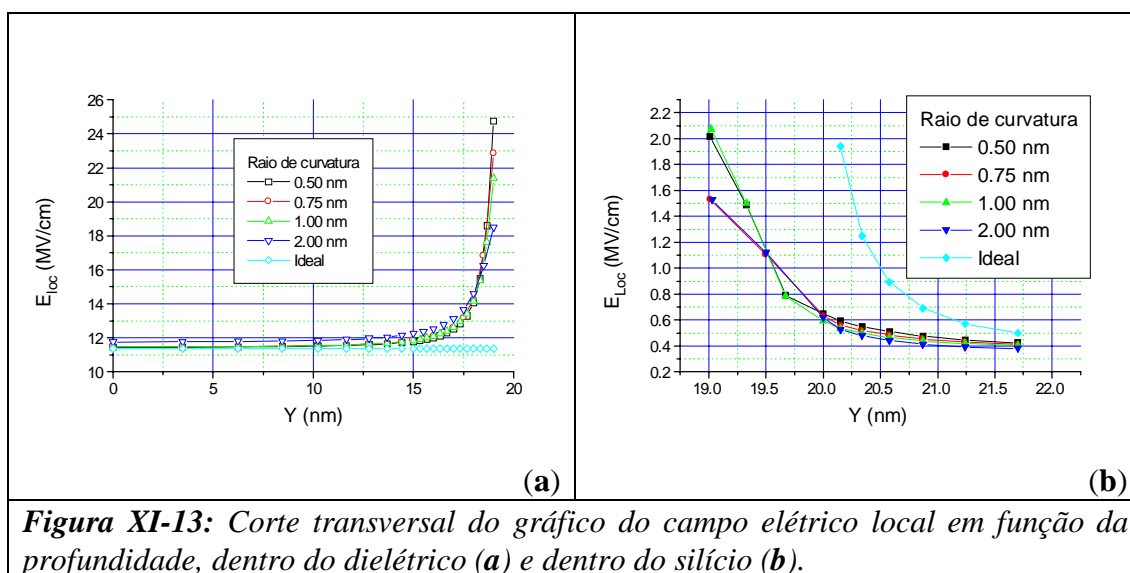


Figura XI-13: Corte transversal do gráfico do campo elétrico local em função da profundidade, dentro do dielétrico (a) e dentro do silício (b).

Na Figura XI-13b, são mostradas cinco curvas de intensidade do campo elétrico local no silício para as quatro estruturas analisadas, e uma para a estrutura ideal. Podemos ver que atenuação do campo elétrico local é bastante semelhante para as quatro estruturas analisadas, enquanto que para a estrutura ideal, a atenuação é maior, muito próximo à interface, mas que para distâncias maiores que 2,2 nm, as cinco curvas praticamente coincidem.

A Figura XI-10 mostra as distribuições espaciais dos vetores campo elétrico nas quatro estruturas consideradas. O que pode ser observado, de imediato, é que a menor área em que os vetores campo elétrico estão perturbados corresponde a da estrutura com raio de curvatura menor ($R = 0,50 \text{ nm}$); porém esta estrutura é também a que apresenta o maior incremento da intensidade do campo elétrico local ($25,4 \text{ MV/cm}$) Veja Tabela XI-2. Em contrapartida, a estrutura com raio de curvatura maior ($R = 2,00 \text{ nm}$) é a que apresenta a maior área em que o vetor campo elétrico é perturbado e, das quatro estruturas analisadas, a que tem o menor incremento da intensidade do campo elétrico local ($18,7 \text{ MV/cm}$). É interessante observar que este efeito "compensativo", entre incremento de intensidade e área em que o vetor campo elétrico é perturbado, se manifesta apenas quando a análise é feita em uma estrutura com no mínimo duas dimensões.

A Figura XI-11 mostra as distribuições espaciais das curvas equipotenciais para as quatro estruturas analisadas. A diferença de potencial entre duas equipotenciais consecutivas é de $0,1 \text{ V}$. O que pode ser observado em todas as estruturas é que a distância entre duas linhas equipotenciais (gradiente de potencial) é bem maior no lado do SiO_2 do que no lado do silício. Isto decorre da equação:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad [\text{XI-8}]$$

ou seja, como a permissividade dielétrica do silício (ϵ_{Si}) é maior que a do SiO_2 , e a distribuição de carga (ρ) é a mesma, o gradiente será menor na região do silício.

Pode-se observar também que a localização das maiores concentrações de linhas equipotenciais ocorrem nas vizinhanças da ponta. Por que esta perturbação não se propaga até a outra interface? A resposta é simples: porque na outra interface (SiO_2/Al) as equipotenciais são planas, pois esta condição de contorno foi imposta ao sistema *a priori*. Portanto, a solução do problema consistiu em casar equipotenciais planares com as equipotenciais curvas, causadas pela ponta, resultando com isso a concentração das

equipotenciais apenas nas vizinhanças da ponta.

Um outro ponto importante a ser observado na Figura XI-11 é que a estrutura com ponta mais aguda ($R = 0,50 \text{ nm}$) é a que apresenta a maior concentração das linhas de equipotenciais nas vizinhanças da ponta. Isto pode ser entendido pelo fato de que na estrutura com raio de curvatura menor existe menos "espaço" para que a transição perturbado não-perturbado se realize. Na estrutura com raio de curvatura maior, a transição é feita suavemente, quando comparada com a de raio menor.

Se forem comparados as Figuras XI-10 com XI-11 pode se observar também que o campo elétrico local é maior na estrutura com maior concentração de linhas equipotenciais ($R = 0,50 \text{ nm}$), o que está de acordo com a equação de campo elétrico local:

$$\vec{E}(x, y) = -\vec{\nabla}\phi(x, y) \quad [\text{XI-9}]$$

A Figura XI-14 mostra os histogramas de frequência das intensidades dos campos elétricos locais nas quatro estruturas analisadas. O histograma foi construído utilizando valores dos campos elétricos locais nas vizinhanças da ponta, que em X vai de $2,1 \cdot 10^{-2}$ a $2,9 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$, e de Y de $1,5 \cdot 10^{-2}$ até $2,2 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$. Veja na Figura XI-10 a distribuição espacial do vetor campo elétrico nesta região. Em todas as quatro estruturas o intervalo de campo elétrico local que apresentou a maior frequência foi entre 12,0 a 12,5 MV/cm.

Na Figura XI-14 é possível também observar que a dispersão dos valores do campo elétrico local é maior conforme o raio vai aumentando. As Figuras XI-10a e XI-10d mostram a distribuição espacial do vetor campo elétrico para os raios 0,50 nm e 2,00 nm, respectivamente, permitindo assim a verificação de uma maior área de campo elétrico perturbado na estrutura com raio de curvatura 2,00 nm.

No capacitor com raio 0,50 nm o campo elétrico é afetado localmente e atinge valores muito elevados mas a uma distância relativamente pequena este campo é atenuado para valores próximos aos do equilíbrio. Por outro lado, nas vizinhanças da ponta com raio maior

(2,00 nm) o campo não atinge valores tão intensos mas a área de abrangência deste campo elevado é bem maior.

Nos quatro histogramas, mostrados na Figura XI-14, pode-se observar que conforme o raio de curvatura vai diminuindo, apesar da dispersão também diminuir, alguns intervalos de campos elétricos elevados, maiores que 19 MV/cm, passam a ter uma porcentagem significativa, e que não é observado em raios de curvaturas maiores.

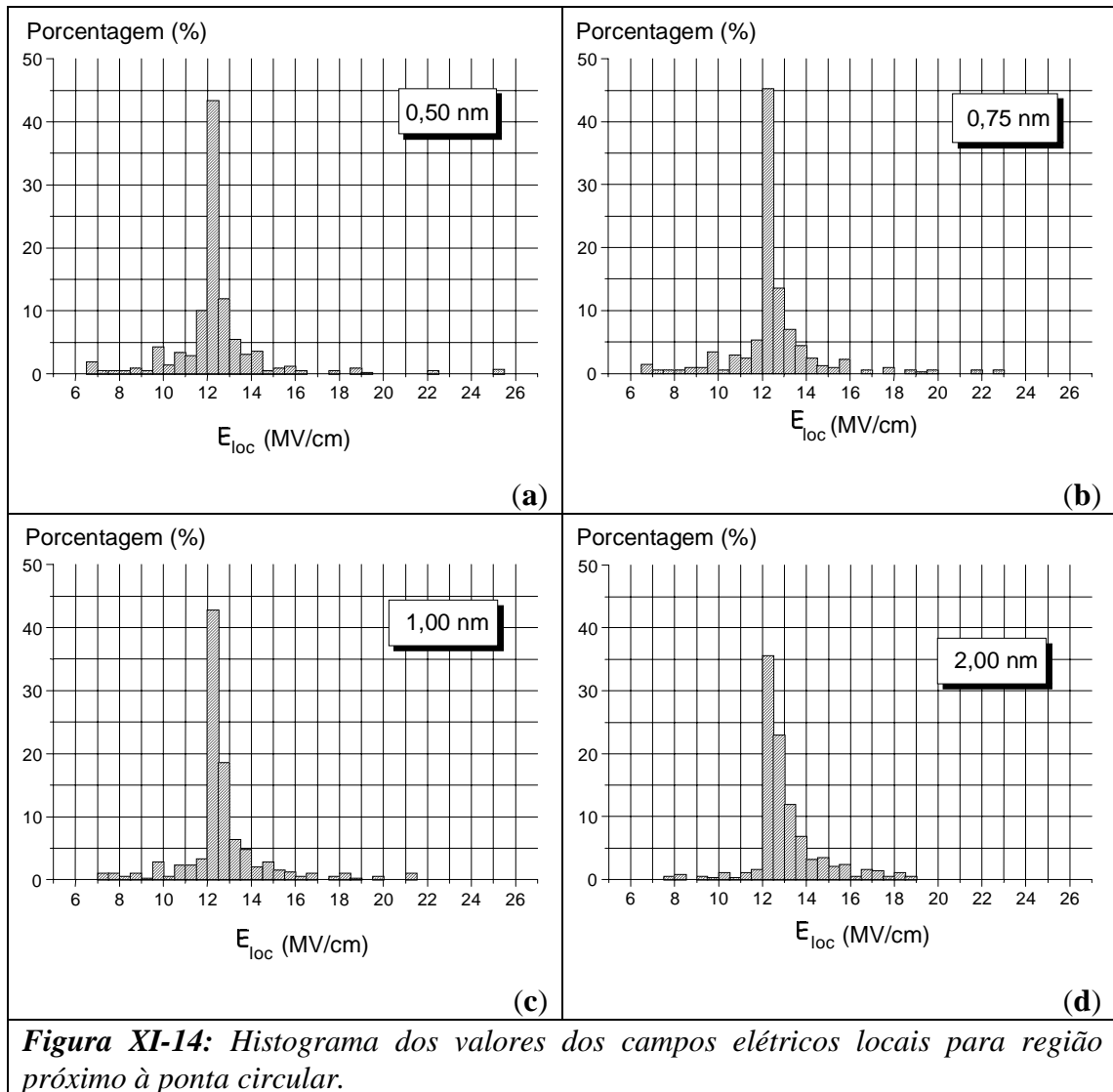


Figura XI-14: Histograma dos valores dos campos elétricos locais para região próximo à ponta circular.

Armstrong 1957 [8,4] estudou o efeito de curvaturas nas bordas de junções planares,

devido à anisotropia na difusão de dopantes, que apresentavam curvaturas de raio X_j . O estudo mostrou que campo elétrico na região curva é significativamente maior que na parte plana da junção, ocasionando uma ruptura da junção a baixos potenciais, pois na região curva o campo elétrico local é bem maior que na região plana. A redução do potencial de ruptura da junção é mais drástica em junções rasas porque o raio de curvatura X_j é menor nestas estruturas, aumentando mais o campo elétrico local.

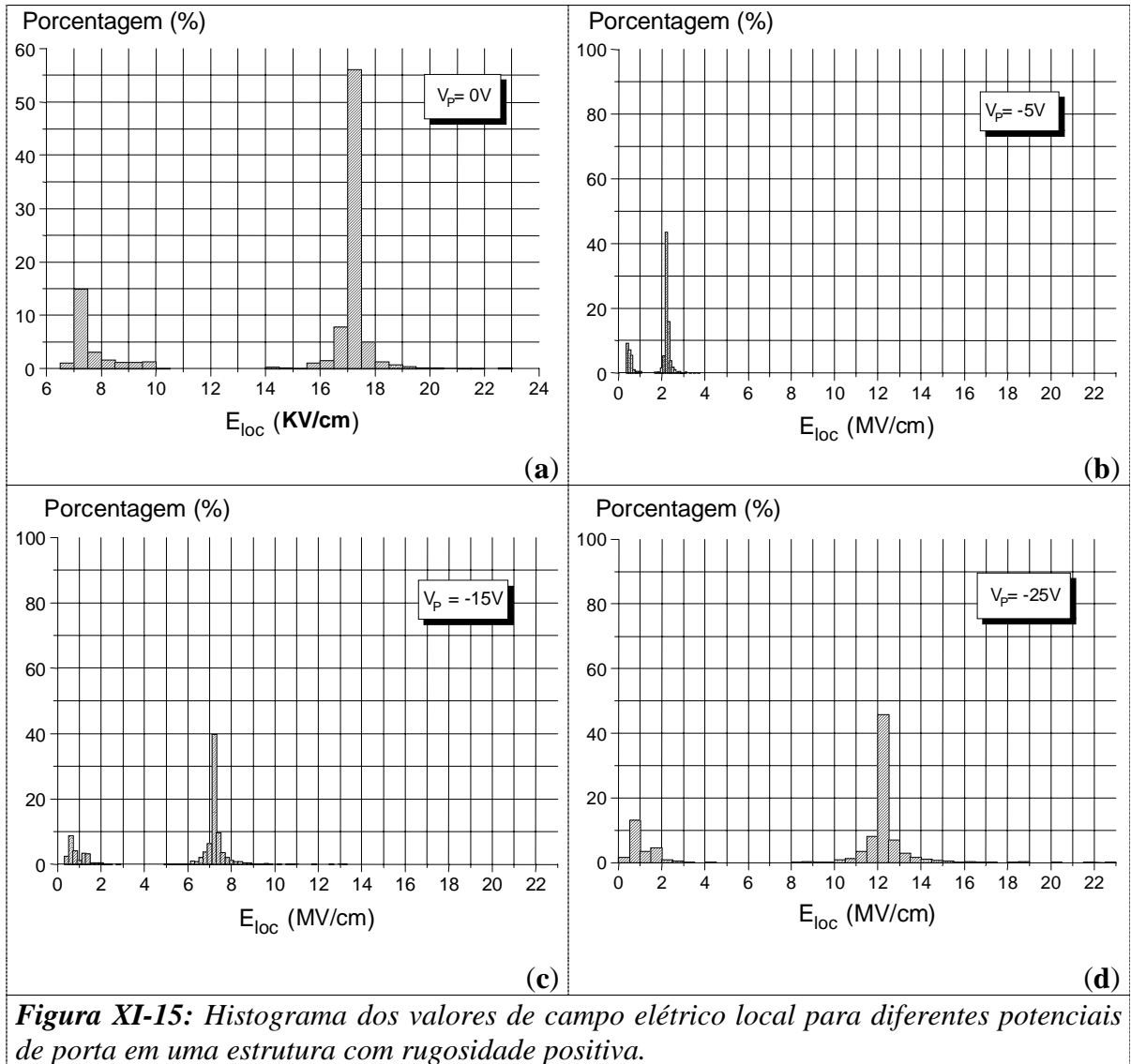
Groetzberger 1966 [1,9] utilizando um capacitor MOS para medir potencial de ruptura de silício por avalanche, observou que em substratos de silício com baixas dopagens (alta resistividade) há um aumento do campo elétrico na região depletada, próxima às bordas do eletrodo de porta, diminuindo o potencial de ruptura do silício. Este efeito é essencialmente um efeito de curvatura das equipotenciais no silício, fazendo com que as equipotenciais sejam estranguladas, criando um campo elétrico local maior que o existente nas regiões planas.

O'Shea 1995 [9], utilizando microscopia de força atômica, realizou medidas de campos de rupturas locais utilizando a ponta de prova do microscópio como eletrodo e obteve, para o óxido de silício, um campo de ruptura local de $13,2 \pm 0,8$ MV/cm. Este valor não difere muito do campo elétrico macroscópico deste material, que é de 13,25 MV/cm, para uma espessura de dielétrico de 20 nm [10]. A Figura XI-13 sugere uma explicação, quando mostra o campo elétrico nas vizinhanças da interface SiO_2/Al quase igual ao campo elétrico não perturbado. A área do eletrodo de porta, que era o cabeçote do microscópio, era de 500 nm², uma área significativamente grande.

6. Rugosidade eletrônica para diferentes potenciais de porta

A Figura XI-15 mostra os histogramas de frequência das intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma rugosidade positiva (raio de curvatura 1,00 nm) para diferentes tensões de porta: 0V, -5V, -15V e -25V. Observe que os valores dos campos

elétricos são diferentes para os quatro gráficos. Veja no Capítulo VIII, seção 4, a descrição detalhada desta experiência.



Se considerarmos o desvio padrão das intensidades dos campos elétricos locais ($\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$) como sendo a medida da rugosidade eletrônica podemos constatar, pelos histogramas da Figura XI-15 que conforme V_p aumenta, de um histograma para outro, a largura dos picos dos histogramas vão ficando também maiores. Veja o gráfico de $\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$ versus V_p na Figura XI-16b.

Os valores médios dos campos elétricos locais (\overline{E}_{loc}) das populações referentes ao campo no SiO₂ também vão aumentando, conforme aumenta o potencial de porta (V_p) aplicado no capacitor MOS. Veja o gráfico de \overline{E}_{loc} versus V_p na Figura XI-16a.

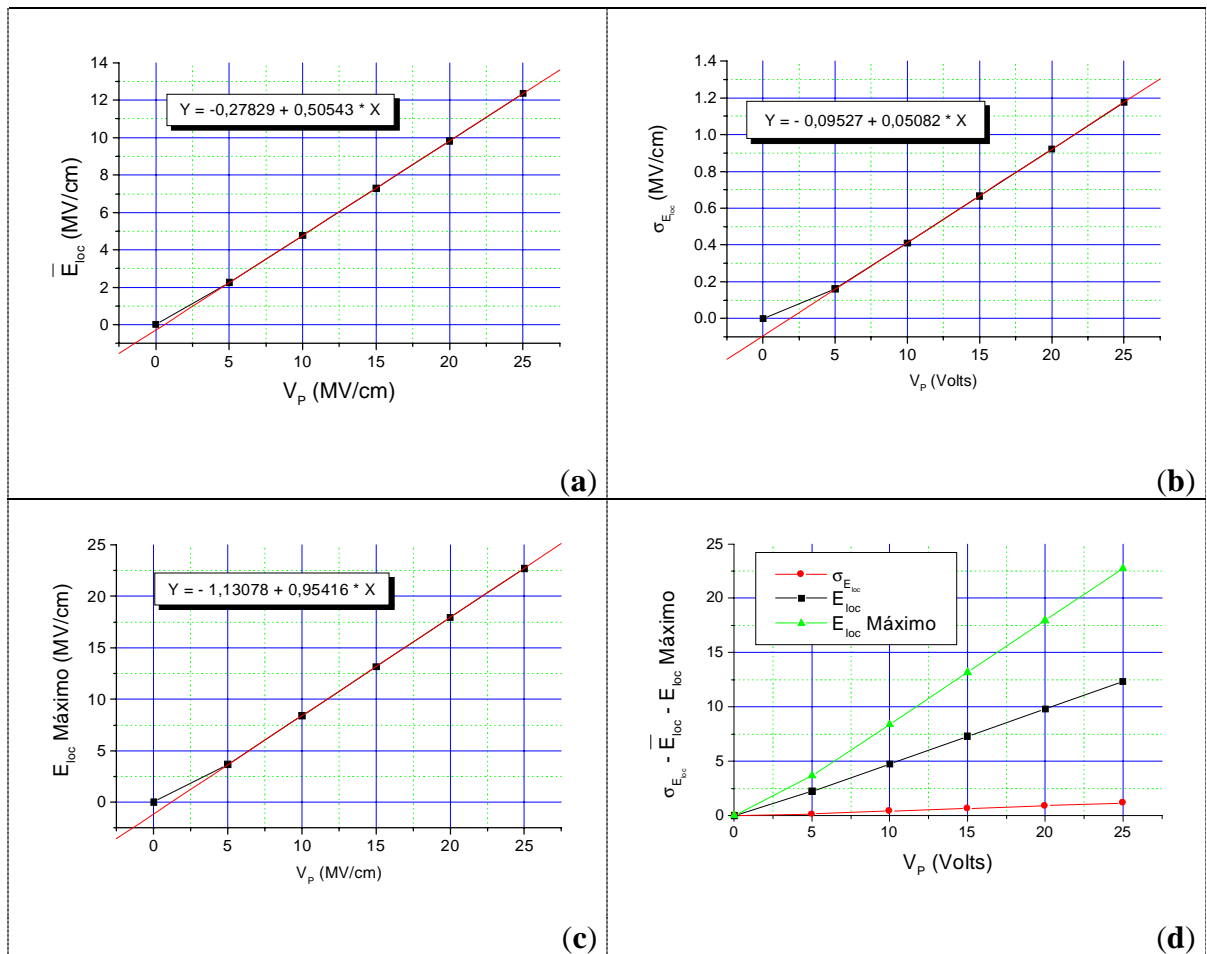


Figura XI-16: Gráfico da estatística do valor médio, desvio padrão e máximo valor do campo elétrico local para uma estrutura com rugosidade positiva de raio = 1,0 nm e com diferentes valores de potencial de porta.

A Figura XI-16a mostra o gráfico da média dos campos elétricos locais (\overline{E}_{loc}) em função do potencial de porta (V_p). Podemos observar um comportamento linear com um coeficiente angular de aproximadamente 0,5 e unidade de 10^{-1} nm^{-1} . Este número é igual ao inverso da espessura do óxido ($1/d_{ox} = 1/(20 \text{ nm}) = 0,05 \text{ nm}^{-1}$), conforme a equação que

relaciona o campo elétrico com o potencial de porta da Equação XI-3.

O coeficiente linear negativo tem a ver com o potencial de banda plana (V_{FB}). Na Equação XI-3 ela é representada pelo \mathcal{E}_{str} , e nesse caso vale -0,278 MV/cm. Este é um boa estimativa para o valor para o \mathcal{E}_{str} , pois substituindo na Equação XI-3 e considerando um potencial de porta de 24 V teríamos o campo elétrico médio obtido pelo capacitor ideal simulado, que foi de 11,7 MV/cm. É bom lembrarmos que no gráfico da Figura XI-16a estamos trabalhando com o módulo do campo elétrico local, e que o potencial de banda plana para esta estrutura MOS considerada sempre será no sentido de criar um \mathcal{E}_{str} que diminui o campo elétrico médio \mathcal{E}_M , portanto eles sempre terão sinais opostos.

O ponto correspondente a $V_p = 0$ V, é o único ponto fora da reta, dos potenciais considerados neste gráfico, pois para este potencial o regime de funcionamento do capacitor não é mais de acumulação, onde todo o campo irá recair no dielétrico. Para $V_p = 0$ V o capacitor está operando em regime de depleção, com isso haverá uma pequena região depletada dentro do silício, "consumindo" parte do potencial.

No gráfico da Figura XI-16b é mostrado o desvio padrão das intensidades dos campos elétricos locais ($\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$) em função do potencial de porta (V_p). Neste caso também foi verificado um comportamento linear. O coeficiente angular foi de 0,05 (10^{-1} nm^{-1}) e o coeficiente linear foi de -0,1 MV/cm. Observe que o coeficiente angular do gráfico de $\overline{\mathcal{E}_{loc}}$ versus V_p é dez vezes maior que o do gráfico $\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$ versus V_p . Com isso, podemos afirmar que conforme o potencial de porta aumenta o campo elétrico médio aumenta e a rugosidade eletrônica também aumenta, mas numa proporção bem menor, de dez para um.

O gráfico da Figura XI-16c mostra o campo elétrico máximo encontrado para cada potencial aplicado. O gráfico é linear com coeficiente angular de 0,95 (10^{-1} nm^{-1}) e coeficiente linear de -1,1 MV/cm. Este coeficiente angular quase igual a 1 indica que se o

potencial de porta variar de 5V a intensidade do campo elétrico máximo irá variar em quase 5 MV/cm.

Tabela XI-3: Tabela com os valores estatísticos do campo elétrico local nas vizinhanças da ponta positiva com raio de curvatura 1 nm.

V_P (V)	$\bar{\mathcal{E}}_{loc}$ (MV/cm)	$\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$ (MV/cm)	\mathcal{E}_{loc} MÁXIMO (MV/cm)
0	0,01724	6,2E-4	0,02281
5	2,25509	0,16079	3,6584
10	4,77132	0,41101	8,3894
15	7,29837	0,66608	13,175
20	9,8292	0,9213	17,956
25	12,36194	1,17623	22,729

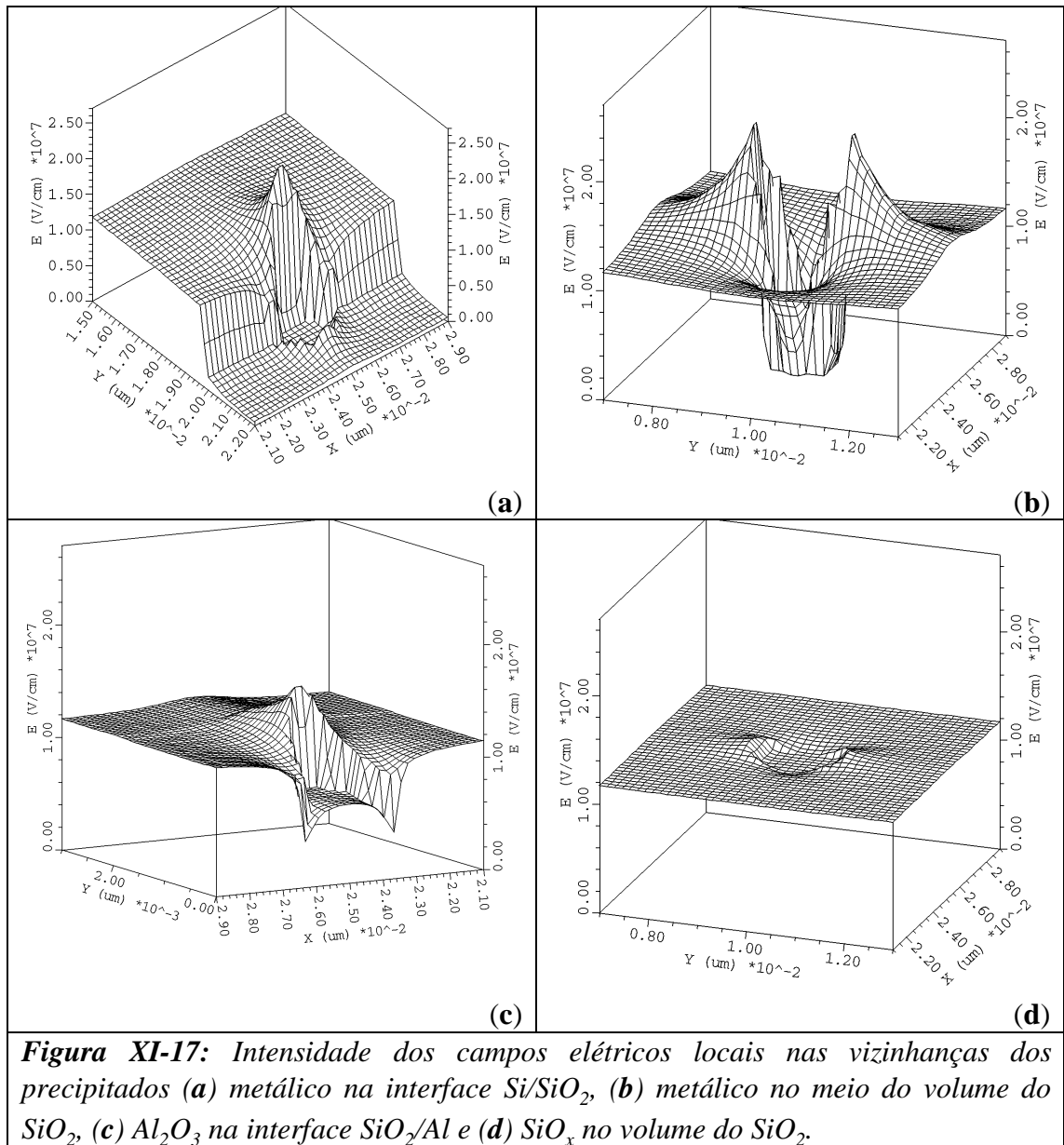
O gráfico da Figura XI-16d mostra a superposição dos três gráficos anteriores e dá uma idéia das variações relativas dos três parâmetros em função do potencial de porta aplicado no capacitor MOS.

A Tabela XI-3 mostra os valores de três parâmetros estatísticos valor médio ($\bar{\mathcal{E}}_{loc}$), desvio padrão ($\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$) e máximo valor (\mathcal{E}_{loc} Máximo) do campo elétrico local em função do potencial de porta (V_P).

A perturbação causada pela ponta positiva teve impacto nos gráficos do desvio padrão e do máximo valor do campo elétrico local, Figuras XI-16b e XI-16c respectivamente. No gráfico da média dos campos elétricos locais em função do potencial de porta, Figura XI-16a, teríamos um valor de 11.8 MV/cm para um potencial de 24V, enquanto que para a estrutura ideal obtivemos o valor de 11.7 MV/cm, uma diferença menor que 1%.

7. Precipitados

Os precipitados de diferentes materiais inseridos na interface Si/SiO₂ ou no SiO₂/Al têm a forma uma composição de duas sinóides, apresentando duas pontas laterais, a ponta tem



formato semi-circular de raio 1 nm. A forma e tamanho dos precipitados nas duas interfaces são idênticas, permitindo assim uma análise comparativa dos efeitos de

diferentes materiais que constituem o precipitado na rugosidade eletrônica. Os precipitados metálico e de SiO_x , inseridos dentro do SiO_2 , têm exatamente a mesma forma de dimensão: uma circunferência de raio 1 nm. Veja detalhes do procedimento no Capítulo VIII.

É importante também notar, nesta simulação, que o formato dos precipitados das interface Si/SiO_2 e SiO_2/Al não eram exatamente semicirculares, mas uma composição de duas sinóides, que apresentam duas pontas laterais. Veja na Figura XI-18a que as pontas laterais do precipitado são consideravelmente agudas e que, mesmo assim, não foram as regiões com os campos mais intensos (veja Figura XI-17a). A explicação é que a ponta deve ser paralela, ou ter pelo menos uma componente na direção do campo elétrico para que haja acumulação de cargas e, conseqüentemente, o efeito ponta, que é o que acontece com a ponta esférica do precipitado, sendo bem menos aguda que a ponta lateral, apresenta o maior valor de campo elétrico local.

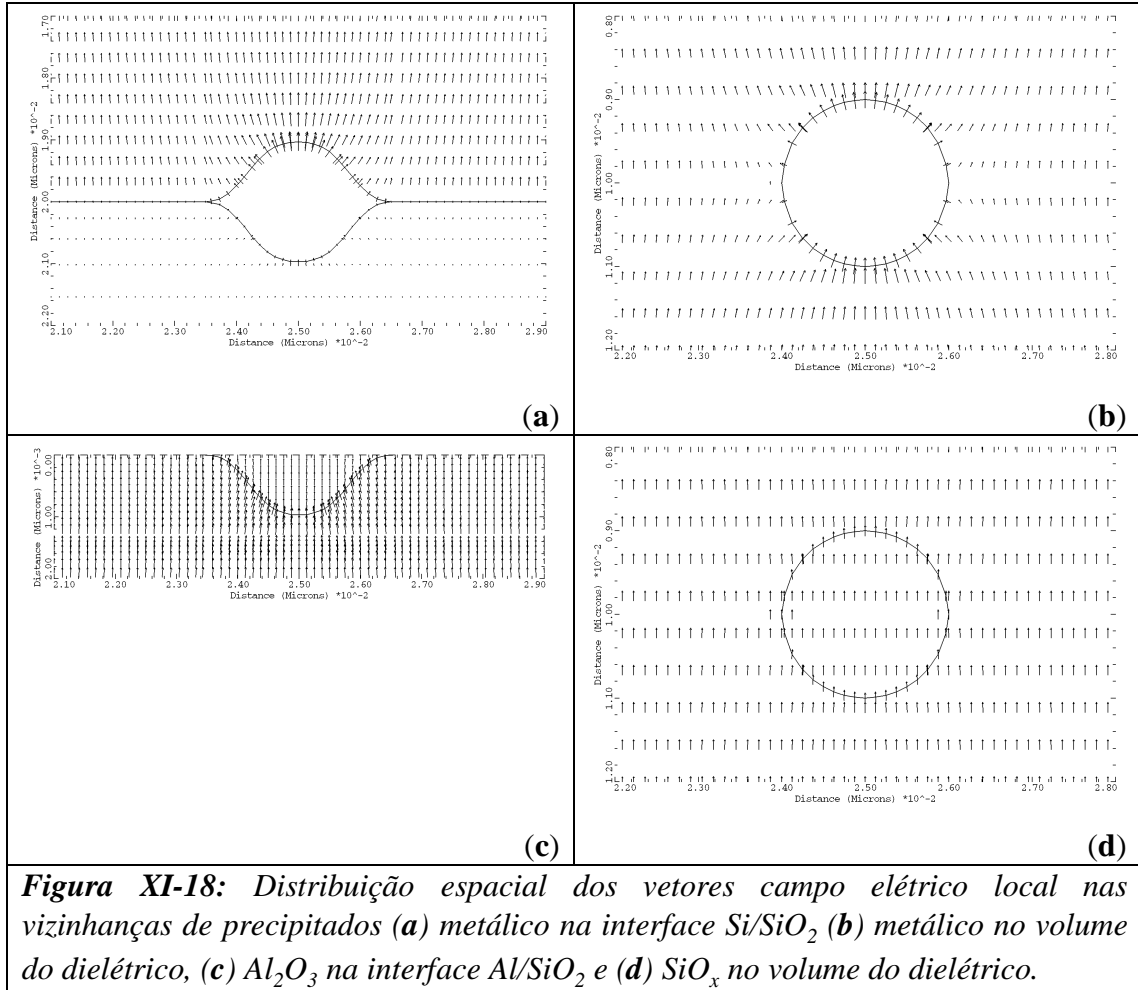
Na Figura XI-17a, podemos notar que o campo elétrico dentro do precipitado é menor que no silício enquanto que no histograma, mostrado na Figura XI-20a, temos campos elétricos de até 4 MV/cm no silício. Como já foi discutido na seção 4 deste Capítulo, o campo elétrico é suficientemente intenso para ocorrer o evento da ruptura, porém a área coberta por este campo intenso é muito pequena, comparado com os 10 μm necessários para o evento de avalanche no silício [5].

O precipitado de óxido de alumínio (Al_2O_3) é formado durante o processo de sinterização [11], que é utilizado freqüentemente para melhorar o contato do eletrodo do substrato de silício e fazer o recozimento das densidades de estados na interface Si/SiO_2 . A perturbação dos campos elétricos locais, devido à presença deste precipitado, é grande podendo atingir no SiO_2 , nas vizinhanças da interface $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$, valores próximos a 17 MV/cm [Figura XI-17c], enquanto que dentro do precipitado, atinge valores próximos de 7 MV/cm. O histograma da Figura XI-20c apresenta duas populações distintas: a de baixos campos, centrado em torno de 7 MV/cm, correspondente aos campos dentro do

Al_2O_3 , e uma segunda população, com valores em torno de 11,5 MV/cm, correspondente aos campos elétricos locais no SiO_2 . É interessante observar que a posição onde é máximo o valor do campo elétrico, para Al_2O_3 e SiO_2 estão lado a lado, na "ponta" do precipitado e são 17 MV/cm e 7,5 MV/cm, e que a razão destes dois valores é de $\cong 2,3$, que é o valor da razão das constantes dielétricas dos dois materiais. Isto é esperado, pois o vetor deslocamento dielétrico \vec{D} deve ser constante nos dois lados da interface:

$$\vec{D} = \epsilon \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad \mathcal{E}$$

$$\Rightarrow \epsilon_{\text{Al}_2\text{O}_3} \cdot \mathcal{E}_{\text{Al}_2\text{O}_3} = \epsilon_{\text{Si}} \cdot \mathcal{E}_{\text{Si}} \quad [\text{XI-10}]$$



A presença de óxido com estequiometria ligeiramente diferente de SiO₂ já foi determinada através de vários estudos [12,13]. Neste caso, conforme as Figuras XI-17d e XI-18d, os campos elétricos locais sofrem uma pequena perturbação na intensidade e direção, incrementando o campo elétrico no meio SiO₂ até 12,5 MV/cm. Este resultado mostra que os precipitados de SiO_x, comumente encontrados em silício crescido pela técnica Czochralski (CZ), não afetam diretamente as características elétricas do capacitor MOS pelo incremento de campo elétrico local. Estes precipitados, por outro lado, podem funcionar como centros de armadilhamentos para metais, passando então a atuar como precipitados com características metálicas. Neste caso ele passa a ser altamente prejudicial, como já foi discutido no caso de precipitados metálicos.

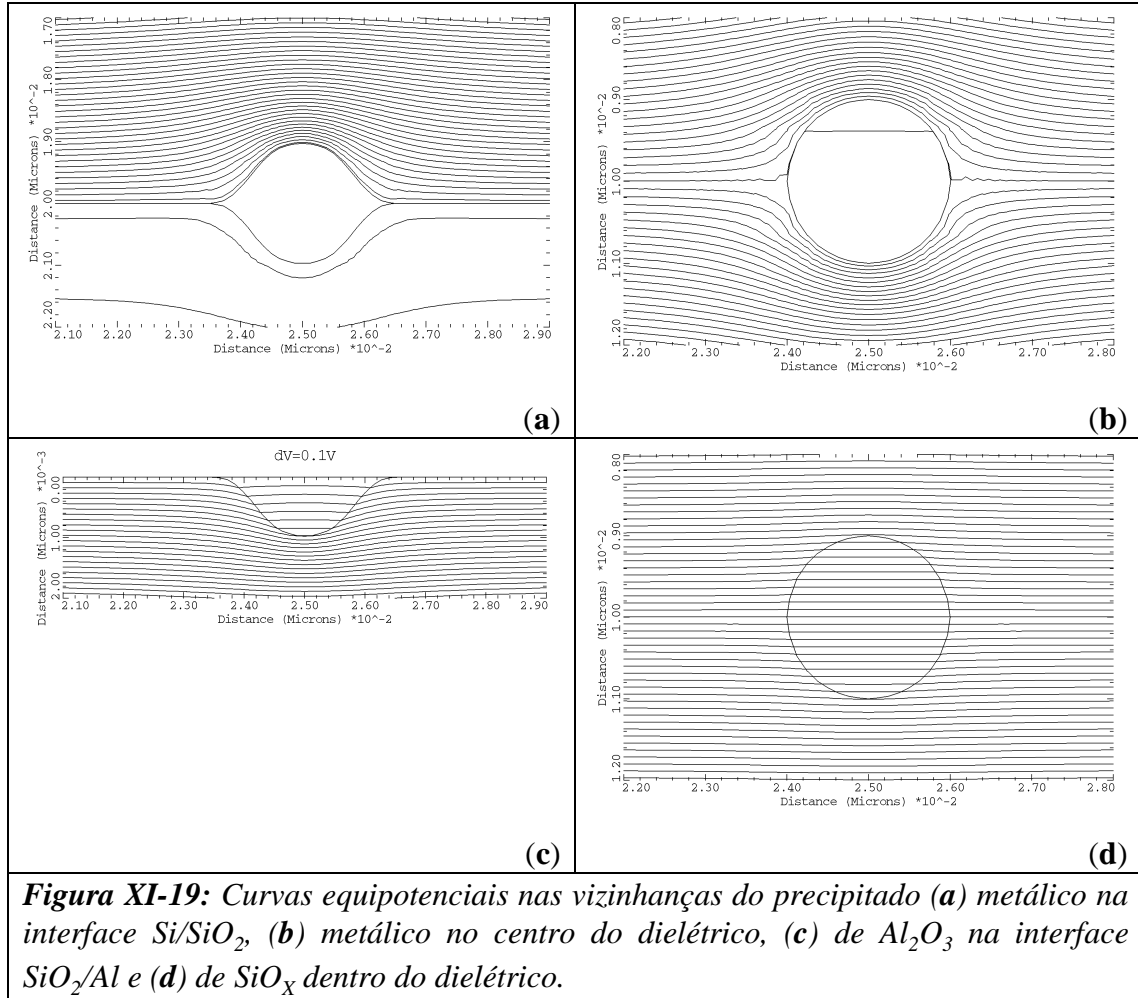
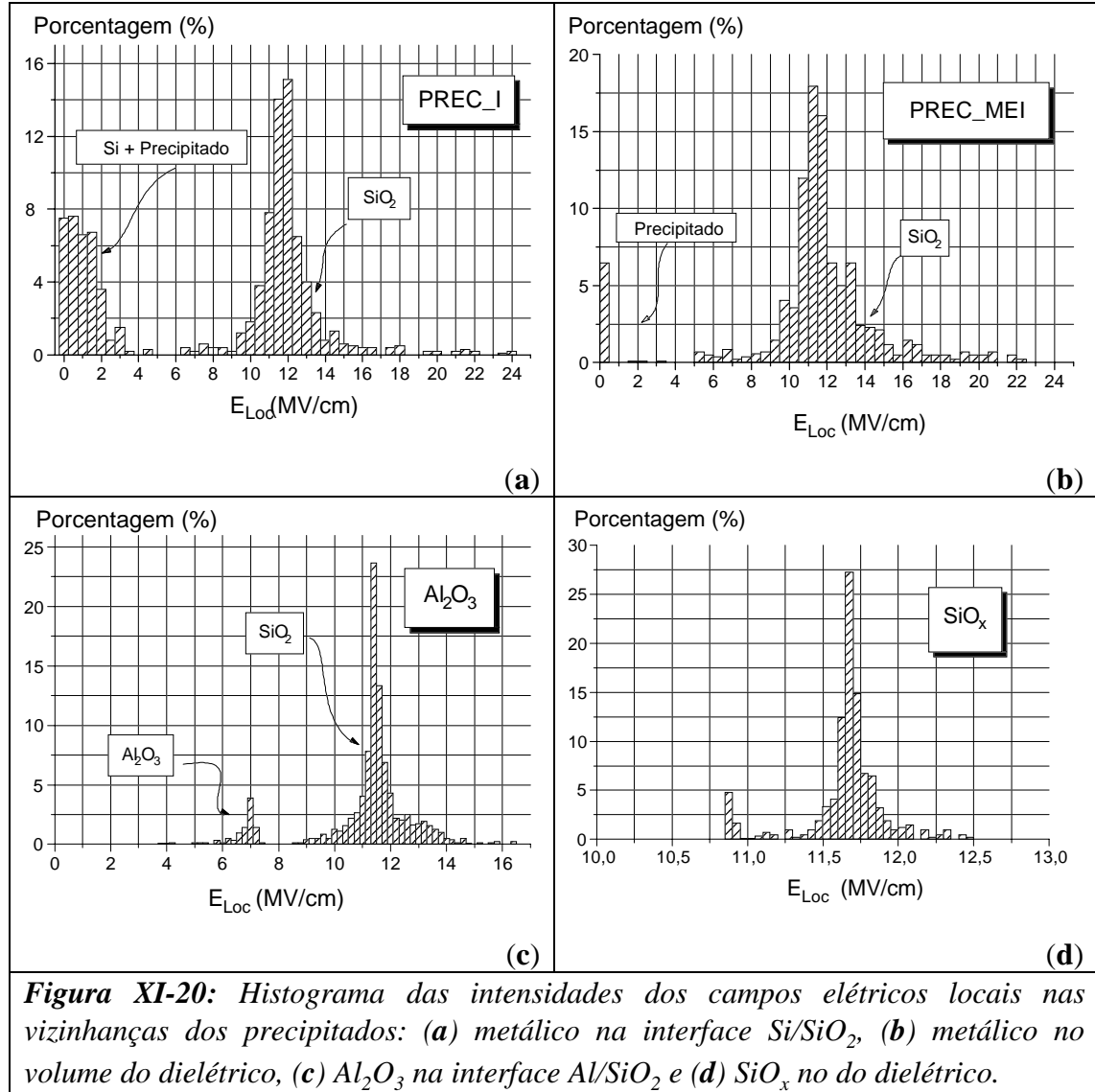


Figura XI-19: Curvas equipotenciais nas vizinhanças do precipitado (a) metálico na interface Si/SiO₂, (b) metálico no centro do dielétrico, (c) de Al₂O₃ na interface SiO₂/Al e (d) de SiO_x dentro do dielétrico.

No histograma mostrado na Figura XI-20c, correspondente à estrutura com precipitado metálico no volume do dielétrico, pode-se constatar a grande dispersão dos valores para os campos elétricos locais referentes à população no lado do dielétrico. O valor médio para os valores correspondentes aos altos campos foi de 11,9 MV/cm, com desvio padrão de 1,4 MV/cm, enquanto que o máximo valor do campo elétrico local foi de 23,8 MV/cm e foi obtido próximo à interface precipitado/SiO₂, no lado do SiO₂.



A presença de precipitados metálicos, ou semi metálicos, assim como os seus efeitos nas características elétricas dos dispositivos eletrônicos já foram apresentados em vários trabalhos [14, 15, 16,17].

Honda 1995 [14], ao fazer um estudo do comportamento de impurezas de Fe durante a oxidação em HCl obteve imagens XTEM bastante interessantes de precipitados de Fe dentro do SiO₂, na interface Si/SiO₂ e dentro do volume do Si. A forma do precipitado é de um poliedro irregular com dimensões típicas de 40x58 nm², sendo que a espessura do

óxido crescido foi de 30 nm. Em uma das imagens, onde foi mostrado o precipitado na interface Si/SiO₂, pode-se notar que apesar da espessura nominal do óxido ser de 30 nm, nas vizinhanças do precipitado, a espessura local foi reduzida a aproximadamente 10 nm. Neste caso houve um afinamento local do óxido juntamente com presença de um precipitado metálico, o que resultará em um campo elétrico local extremamente elevado e possível ruptura, quando este capacitor for colocado em funcionamento. Foi feita uma simulação deste defeito, conforme a geometria mostrada na microfotografia, veja Figura VIII-8, mas a perturbação do campo elétrico local foi tão grande que a convergência não foi possível. Isto indica que os capacitores contendo estes defeitos devem romper a baixos campos, ou até mesmo nem funcionar.

Takiyama 1994 [17] em um trabalho detalhado sobre efeitos elétricos de impurezas de Fe e outros metais pesados, sugeriu que as amostras que apresentavam maiores índices de deterioração foram aquelas com precipitados de Fe na interface Si/SiO₂ e dentro do SiO₂. Esta sugestão está de pleno acordo ao estabelecido pelas simulações dos precipitados metálicos. Teremos uma perturbação maior do campo elétrico local nos casos em que o precipitado se localiza na interface Si/SiO₂ e dentro do SiO₂. Para isso veja os histogramas dos campos elétricos locais nas vizinhanças dos precipitados metálicos, mostrados na Figura XI-20a e XI-20b, sendo que no caso do precipitado "agregado" ao SiO₂ a área da região perturbada é maior do que a de um precipitado localizado na interface Si/SiO₂ (compare a Figura XI-17a com XI-17b).

O SiO_x é encontrado principalmente na interface Si/SiO₂ [18,19] e é uma transição entre uma estrutura cristalina (do Si) para uma desordenada (vítrea) do SiO₂. O SiO_x (sub-estequiométrico) tem um largura de banda proibida extremamente sensível ao valor de x [20]. O valor da constante dielétrica relativa para o SiO está entre 3 a 6, e o valor do campo de ruptura é de aproximadamente 3 MV/cm [21].

Nas vizinhanças da interface (a aproximadamente $0,7 \pm 0,2$ nm dentro do

SiO₂) existe uma mistura de silício com oxigênio, que tem uma estequiometria média de SiO_{0,4±0,2}. A constante dielétrica desta fase, obtida pela técnica de elipsometria espectroscópica foi de $3,2 \pm 0,5$ [22-23].

Em óxidos crescidos por forno convencional (óxido térmico) foi observado o aparecimento de birrefringência. Taft [24] mostrou que esta está diretamente relacionada com o stress compressivo, que por sua vez deriva da não uniformidade do coeficiente de expansão térmica [25]. A origem da diferença dos índices de refração não está clara. Para temperaturas de oxidação abaixo de 1200°C existe a possibilidade de existência de diferentes "politipos" de SiO₂ [24].

A presença de precipitados de oxigênio no substrato de silício foi detectado experimentalmente [26] com dimensões de 4 a 9 nm e espessura de 0,3 a 0,6 nm. A distribuição espacial destes precipitados, nas vizinhanças da interface Si/SiO₂, é aleatória, e a densidade numérica destes precipitados tende a aumentar com a temperatura em que o óxido é crescido. Estes precipitados são bastante comuns em lâminas Czochralski (CZ).

Os precipitados de oxigênio dentro do substrato de silício, e fora da região eletricamente ativa do dispositivo, têm o papel benéfico de armadilhar impurezas metálicas [27-28]. Um dos motivos deste fenômeno é que as impurezas tendem a acumular nas regiões tensionadas [1].

Krivalek e Blanc [29,30] encontraram aglomerados cristalinos de silício (densidade de 6×10^{11} cm⁻²) dentro do SiO₂ e nas vizinhanças da interface Si/SiO₂. O tamanho destes aglomerados variavam entre 10-50 Å [1].

A presença de Al₂O₃ já foi detectada por várias técnicas, tais como espectroscopia de raios X (XPS) [31, 32], espectroscopia de elétrons Auger [33,34,35] e microscopia eletrônica de transmissão (TEM) [33,32]. O Al₂O₃ fica na interface Al/SiO₂, e em alguns casos chega a formar um filme de espessura de até 2,5 nm, envolto entre o

alumínio e o óxido de silício [33]. A constante dielétrica relativa do Al_2O_3 cristalino está entre 8,6 a 10,6 [36] e do amorfo é de 8,81 [37]. O campo de ruptura para o Al_2O_3 é de 0,098 MV/cm [36].

8. Precipitado Metálico dentro do Si

A presença de um precipitado metálico esférico (raio igual a 1 nm) dentro do substrato de silício mostrou que há um incremento significativo na intensidade do campo elétrico local.

O campo elétrico local passou de um valor abaixo de 0,1 MV/cm, referente a uma estrutura MOS ideal, para 6 MV/cm nas vizinhanças de um precipitado metálico. O incremento do campo elétrico local dependerá da distância do precipitado metálico à interface Si/SiO₂. A uma distância de 1nm da interface o campo elétrico máximo é de aproximadamente 6 MV/cm. Se essa distância aumentar para 4 nm da interface o campo elétrico máximo passará a ser de apenas 3 MV/cm.

É interessante observar que a presença do precipitado metálico resultar num incremento do campo elétrico local para valores bem acima do campo elétrico de ruptura de uma junção P-N, que é de aproximadamente 0,3 MV/cm, este incremento não acarretará na ruptura do dielétrico. Isto é justificado pelo fato de que no caso de uma junção P-N o mecanismo de ruptura é o de avalanche. Neste caso a avalanche não ocorre porque a região em que o campo elétrico assume valores elevados é confinado a uma região muito pequena, ao longo de um raio de aproximadamente 3 nm do precipitado. Fora desta região o campo cai

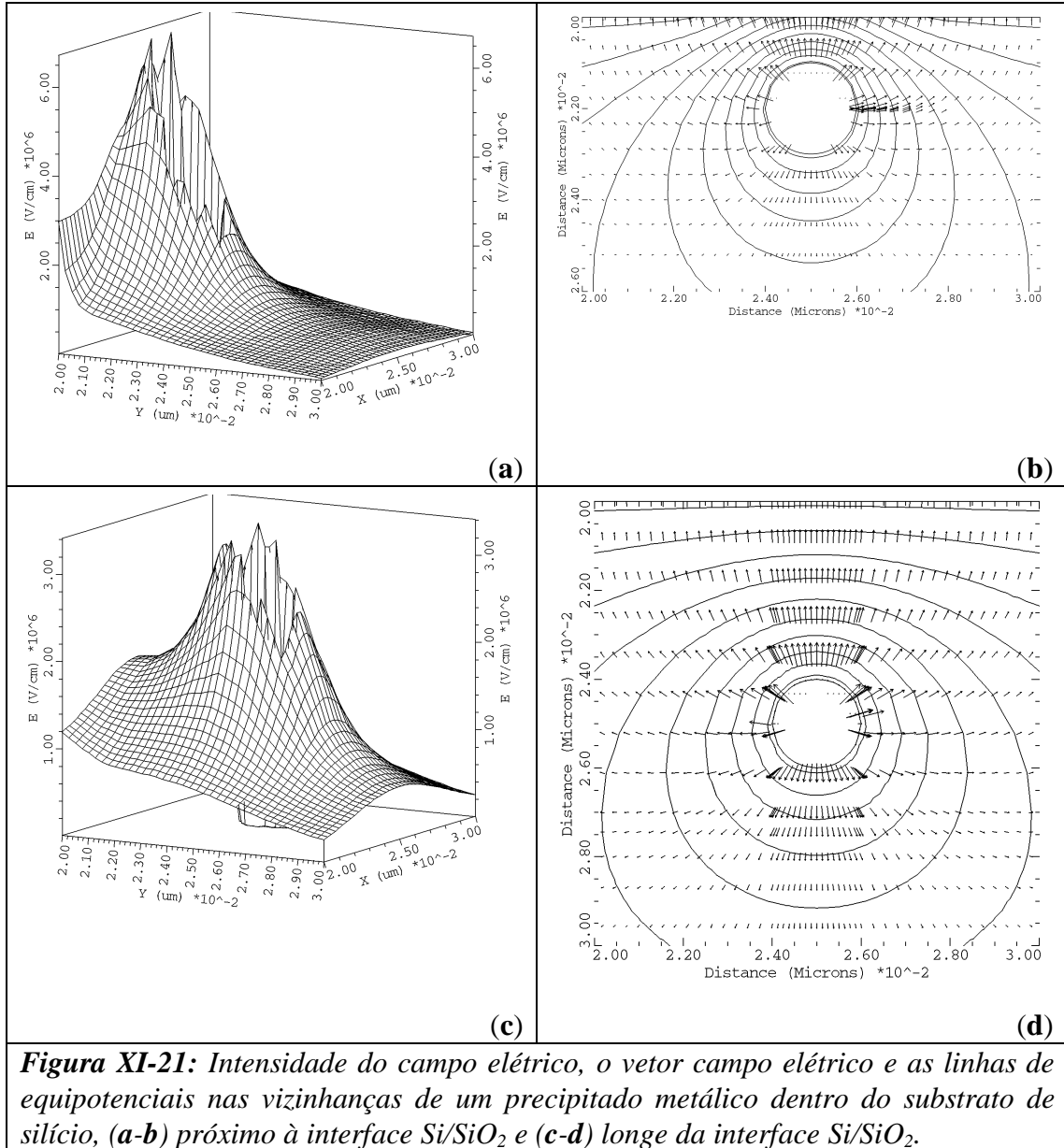


Figura XI-21: Intensidade do campo elétrico, o vetor campo elétrico e as linhas de equipotenciais nas vizinhanças de um precipitado metálico dentro do substrato de silício, (a-b) próximo à interface Si/SiO₂ e (c-d) longe da interface Si/SiO₂.

exponencialmente para zero. Com esta distância o elétron não consegue ganhar energia do campo elétrico para iniciar o processo de avalanche, onde são necessários aproximadamente uma região com 1 μm com campo elétrico acima de 0,3 MV/cm.

9. Sumário das simulações das estruturas idealizadas

O afinamento local do dielétrico é um fator importante para incrementar o valor do campo elétrico local dentro do dielétrico, mas além deste fator a forma da ponta (raio de curvatura) também é muito importante. Pode-se afirmar que o afinamento local do campo elétrico induz uma perturbação de longo alcance, porém de baixa intensidade, no valor do campo elétrico local. Por outro lado o raio de curvatura da rugosidade induz uma perturbação de curto alcance mas de elevada intensidade, no campo elétrico local.

A presença de precipitados dentro do dielétrico dependerá da natureza de seu material. Se for de natureza metálica será extremamente prejudicial. No entanto, se for de um material com constante dielétrica próxima ao do óxido, a perturbação será pequena, como no caso do SiO_x e do Al_2O_3 .

Na presença de uma ponta, ou rugosidades, quanto maior o campo elétrico médio maior será a perturbação do campo elétrico local (rugosidade eletrônica). Esta constatação foi obtida observando a razão do campo elétrico perturbado sobre o campo elétrico médio, que aumenta (quase que linearmente) com o aumento do campo elétrico médio.

10. Bibliografia

- 1 NICOLIAN, E.H.; BREWS, J.R. Physics and Technology, John Wiley & Sons, New York (1982).
- 2 MILLER, S.L. Phys. Rev., Vol.105, p.1246 (1957).
- 3 CHYNOWETH, A.G. Phys. Rev., Vol.118, p.425 (1960).
- 4 GROVE, A.S. Physics and Technology of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, New York (1967).

- 5 SZE, S.M. Physics of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, New York p.850 (1981).
- 6 MULLER, R.S; KAMINS, T.I Device Electronics for Integrated Circuits, John Wiley & Sons, (1986).
- 7 RUSU, A.; BULUCEA, C. IEEE Transactions Electron. Devices, Vol. ED-26, p.201 (1979).
- 8 ARMSTRONG, H.L. IRE Transactions Electron. Devices, Vol. ED-4, 15 (1957).
- 9 O'SHEA, S.J; et al. J. Vac. Sci. Technol. B, Vol. 13, p.1945 (1995).
- 10 FALSTER, R. J. Appl. Phys., Vol. 66 (7), p.3355 (1989).
- 11 HECHT, M.H. et al. J. Appl. Phys., Vol.57, p..5256 (1985).
- 12 MAZUR, J.H.; WASHBURN, J Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol.31 (1984).
- 13 MARTINEZ, E.; YNDURAIN, F. Phys. Rev. B, Vol.. 24 p..5718 (1981).
- 14 HONDA, K.; OHSAWA, A.; NAKANISHI, T. J. Electrochem. Soc., Vol. 142 (10) (1995).
- 15 TAKIZAWA, R.; NAKANISHI, T.; OHSAWA, A. J. Appl. Phys. Vol. 62, p.4933 (1987).
- 16 SADAMITSU, S. et al. Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 30, p.1591 (1991).
- 17 TAKIYAMA, M. et.al In: Seventh International Symposium of Silicon Material and Technology: Semiconductor Silicon, Ed. HUFF, H.R.; BERGOLZ, W.; SUMINO, K., PV 94-10, The Electrochem. Soc. Proc. Series, New Jersey, p. 346 (1994).
- 18 GRUNTHANER, F.J.; et.al J. Vac. Sci. Technol., Vol.16 (5), p.1443 (1979).
- 19 FIORI, C.; DEVINE, R.A.B. Phys. Rev. B, Vol.. 33 (4) p.2972 (1986).
- 21 KLEIN, N.; GAFNI, H. IEEE Transactions Electron. Devices, Vol..ED-13, p.281 (1966).
- 22 ASPNES, D.E.; THEETEN, J.B. Phys. Rev. Lett., Vol.43 (14), p.1047 (1979).
- 22 TAFT, E.; CORDES, L. J. Electrochem. Soc., Vol..126, p.131 (1979).
- 23 ASPNES, D.E.; THEETEN, J.B. J. Electrochem. Soc., Vol.127 (6), p.1359 (1980).

- 24 TAFT, E. J. *Electrochem. Soc.*, Vol. 125, p. 968 (1978).
- 25 JACCODINE, R.J.; SCHLEGEL, W.A. *J. Appl. Phys.*, Vol. 37, p.2429 (1966).
- 27 HU, S.M. *J. Vac. Sci. Technol.*, Vol.14 (17) (1977).
- 27 TAN, T.Y; GARDNER, E.E; TICE, W.K. *Appl. Phys. Lett.*, Vol..30, p.175 (1977).
- 28 TICE, W.K.; TAN, T.Y. *Appl. Phys. Lett.*, Vol..28, p.,564 (1976).
- 29 KRIVALEK, O.L et al. *Appl. Phys. Lett.*, Vol.. 32, p.437 (1978).
- 30 BLANC, J. et al. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 30, p.1201 (1977).
- 31 BAUER, R.S; BACHRACH, R.Z.; BRILLSON, L.J. *Appl. Phys. Lett.*, Vol.. 37, p. 1006 (1980).
- 32 ROBERTS, S.; DOBSON, P.J. *J. Phys. D*, Vol. 14{L17} (1981).
- 33 MIURA, Y; HIROSE, K. *J. Appl. Phys.*, Vol.77 (7), p.3554 (1995).
- 34 STRAUSSER, Y.E., et al. *Thin Solid Films*, Vol.52, p.203 (1978).
- 35 OLSEN, L.C.; et al. *J. Appl. Phys.*, Vol.53, p.6398 (1980).
- 36 VAN VLACK, L.H. *Physical Ceramics for Engineers*, Addison-Wesley, Mass. (1964).
- 37 "Claim Top Combination of Electrical, Thermal and Physical Properties for New Basic Material", *Insulation*, p.17 (1957).

Capítulo XII

Simulação de Capacitores com Interfaces Reais

1. Introdução

Estes resultados são referentes à experiência em que o campo elétrico local de duas amostras com diferentes rugosidades nas interfaces Si/SiO₂ é determinada utilizando simulação numérica. As características elétricas de ruptura das amostras PTP (Processamento Térmico Pulsado) e RRL (Rampa de Resfriamento Lento) também são determinadas e a sua correlação com o campo elétrico local é discutida.

O procedimento para a confecção das amostras, medidas das topografias e das características elétricas das amostras estão descritas no Capítulo IX.

Os resultados obtidos estão divididos em três partes. A primeira parte são as medidas das rugosidades da interface Si/SiO₂ nas amostras PTP e RRL, seção 2. A segunda parte é o resultado das simulações dos capacitores virtuais com interfaces Si/SiO₂ similares às das amostras RRL e PTP, seção 3. A terceira parte são os resultados das medidas das características elétricas dos capacitores construídos a partir das nas lâminas PTP e RRL, seção 4.

2. Medidas das rugosidades das interfaces Si/SiO₂

As medidas das topografias, através de microscopia de força atômica, das interfaces

Si/SiO₂ nas amostras RRL e PTP foram realizadas conforme o procedimento descrito no Capítulo IX.

A Figura XII-1 mostra o gráfico do desvio padrão médio das alturas ($\bar{\sigma}_z$) em função do comprimento de análise (L) para as topografias das amostras PTP e RRL com área de análise de 500x500 nm². A medida das rugosidades foi feita usando apenas o método de Yoshinobu, conforme as conclusões do estudo de medidas de rugosidades, no Capítulo X.

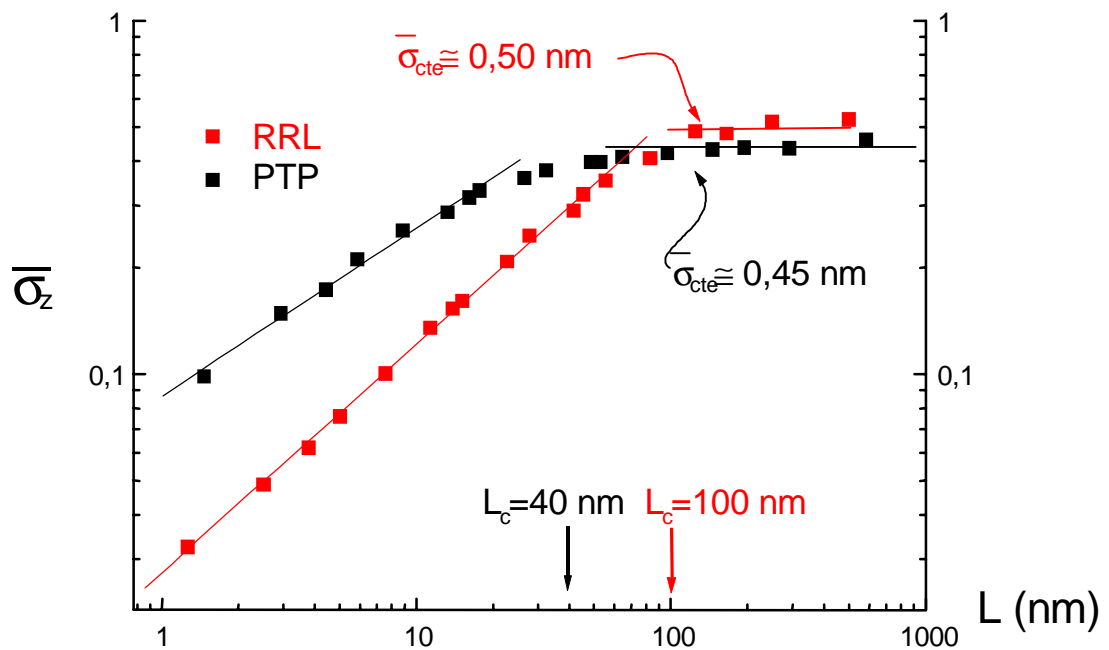


Figura XII-1: Gráfico do desvio padrão médio das alturas ($\bar{\sigma}_z$) em função do comprimento de análise (L) para as amostras RRL e PTP.

Pela Figura XII-1 podemos observar que para uma escala pequena, $1 \text{ nm} < L < 80 \text{ nm}$, o valor de $\bar{\sigma}_z$ para a amostra RRL é sistematicamente menor que o da amostra PTP.

Conforme o comprimento de análise (L) vai aumentando o $\bar{\sigma}_z$ das duas amostras também vão aumentando mas, a da amostra RRL aumenta a uma taxa maior: $L^{0,48}$ e $L^{0,62}$ para a amostra PTP e RRL, respectivamente. O valor de $\bar{\sigma}_z$ da amostra RRL passa a ser maior que a da PTP para L maior que 80 nm.

A Tabela XII-1 mostra os valores dos parâmetros do método de Yoshinobu, obtidos a partir do gráfico da Figura XII-1.

Tabela XII-1: Valores do comprimento de correlação (L_c), $\bar{\sigma}_{cte}$, α e DF obtidos a partir das topografias das amostras RRL e PTP para varredura de $500 \times 500 \text{ nm}^2$.

Amostra	L_c (nm)	$\bar{\sigma}_{cte}$ (nm)	α	DF=3- α
PTP	40	0,45	0,48	2,52
RRL	100	0,50	0,65	2,35

A amostra PTP tem o valor de $\bar{\sigma}_z$ praticamente constante ($\bar{\sigma}_{cte}$) para L maiores que 40 nm, e seu valor fica em torno de 0,45 nm. Veja $\bar{\sigma}_{cte}$ na curva referente à amostra PTP na Figura XII-1.

A amostra RRL passa a ter o valor de $\bar{\sigma}_z$ constante só a partir de $L = 100$ nm e seu valor fica em torno de 0,50 nm. Veja $\bar{\sigma}_{cte}$ na curva referente à amostra RRL na Figura XII-1.

A dimensão fractal (DF) obtido a partir do parâmetro α também atribui a amostra PTP a maior rugosidade.

A Figura XII-2 mostra os gráficos da altura Z em função de X, ao longo de um corte transversal da superfície tridimensional das interfaces Si/SiO₂ das amostras PTP e RRL, para uma varredura de $500 \times 500 \text{ nm}^2$. Neste corte transversal podemos observar que a amplitude das alturas (Z) das amostras RRL e PTP estão igualmente confinadas entre os valores de altura de $-1 \text{ nm} < Z < 1 \text{ nm}$.

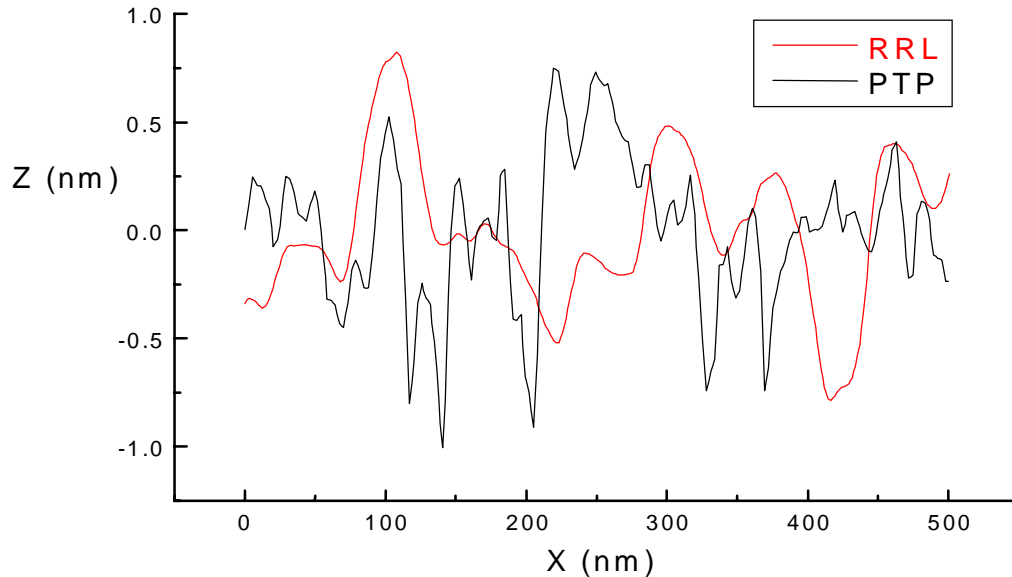


Figura XII-2: Corte transversal da superfície da interface Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP.

No entanto, podemos observar que a amostra PTP também tem uma estrutura rugosa de curto alcance, fazendo com que uma ponta de altura 1 nm e largura de 50 nm se apresente associadas a outras pontas menores. Em outras palavras podemos dizer que a amostra PTP apresenta um número maior de pontas e também que é a amostra com as pontas mais agudas.

2.1 Sumário das rugosidades

Nas amostras analisadas, as espessuras nominais dos óxidos foram de aproximadamente 20 nm, enquanto que as amplitudes das alturas medidas na interface Si/SiO₂, nas duas amostras, foram de ≈ 1 nm. Com isso, a espessura do óxido varia localmente em até 5% devido a rugosidade na interface Si/SiO₂.

Podemos observar que os valores de $\overline{\sigma}_{cte}$ das duas amostras são bastante próximas, ou seja, para uma análise de desvio padrão em uma escala da ordem de 500x500 nm² teremos medidas de $\overline{\sigma}_z$ bastante próximas. Por outro lado, quando analisamos o $\overline{\sigma}_z$ em uma escala de 50x50 nm² o gráfico da Figura XII-1 211 mostra que o $\overline{\sigma}_z$ da amostra PTP é

maior que a da amostra RRL. O corte transversal comparando as interfaces Si/SiO₂ das duas amostras, Figura XII-2, ilustra bem este resultado. A amostra RRL tem as irregularidades de grande amplitudes, mas a da amostra PTP apresenta esta irregularidade e uma rugosidade adicional, com amplitudes menores e de curto alcance.

3. Campo elétrico local dos capacitores simulados

Nesta seção serão mostrados os resultados das simulações dos capacitores virtuais cujas estruturas foram descritas na seção 6 do Capítulo IX.

A Figura XII-3 mostra a distribuição espacial das intensidades dos campos elétricos locais, nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP. A Figura XII-3a e XII-3c mostram as intensidades dos campos elétricos locais para a amostra PTP e RRL, respectivamente. Podemos observar que os campos elétricos para a amostra PTP, a mais rugosa, apresenta uma perturbação maior nas intensidades dos campos elétricos, enquanto que para a amostra RRL, a menos rugosa, apresenta uma distribuição mais regular e em torno de 12 MV/cm.

A Figura XII-4 mostra a distribuição espacial dos vetores campo elétrico local nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP. Ele é o complemento ao gráfico das intensidades dos campos elétricos locais, mostrados na Figura XII-3.

Podemos observar que o vetor campo elétrico é normal à superfície da interface Si/SiO₂, conforme as leis de Maxwell. Conforme o aumento da distância da interface rugosa o vetor tende a um ordenamento uniforme e paralelo.

A superfície mais rugosa, PTP, é a que apresenta a maior perturbação da distribuição espacial dos vetores campo elétrico.

A Figura XII-3b e XII-3d mostram uma amplificação da região com o campo elétrico local mais intenso para as amostras PTP e RRL, respectivamente. Podemos observar que o campo local é mais intenso para a amostra PTP, a mais rugosa, que atinge uma

intensidade de até 20 MV/cm. A amostra RRL atingiu um valor máximo de 16 MV/cm. Veja na Tabela XII-2 o resumo estatístico das intensidades dos campos elétricos locais para as duas amostras.

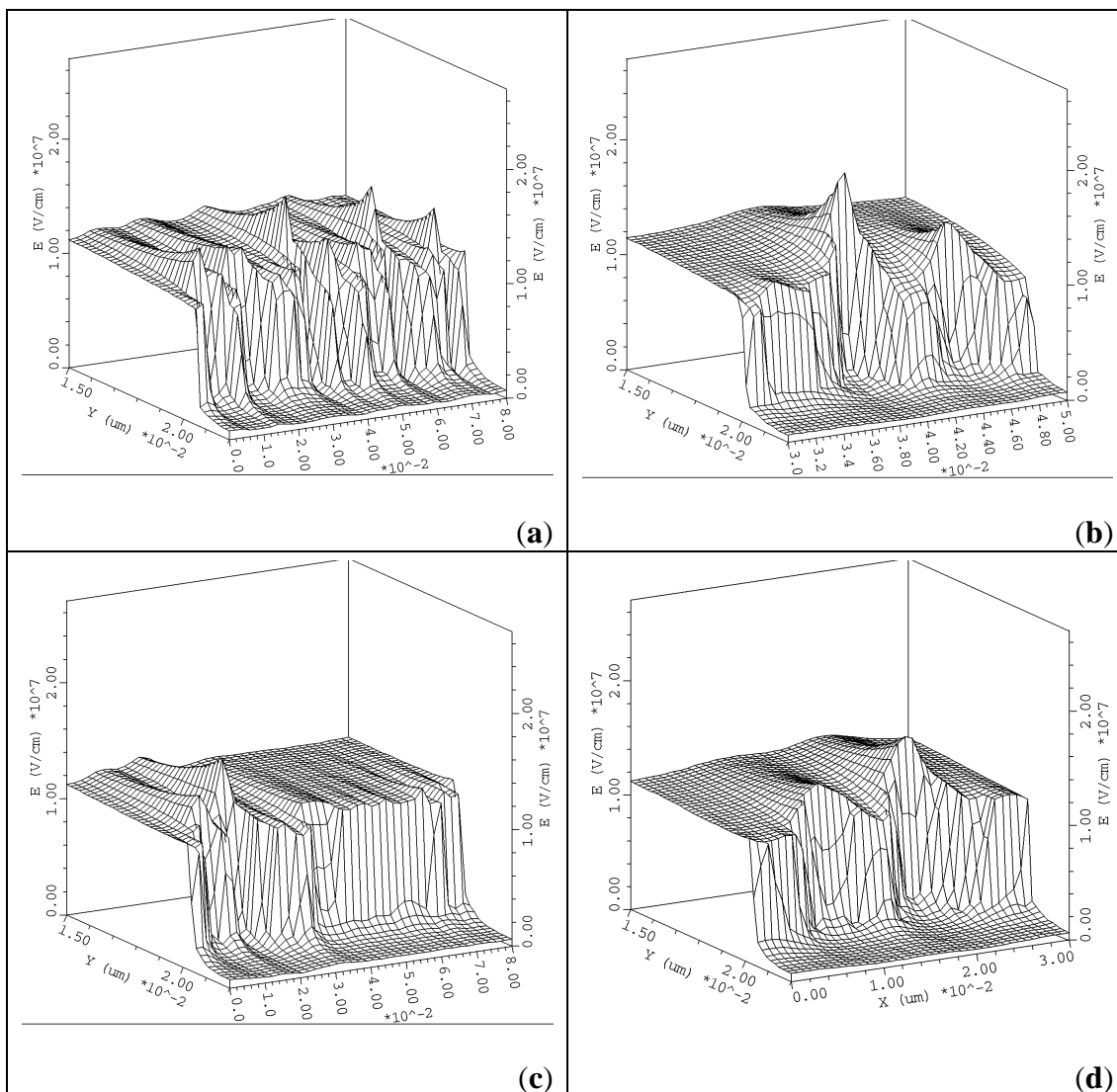


Figura XII-3: Intensidade dos campos elétricos locais nas vizinhanças de uma interface PTP (a) e (b) e RRL (c e d), assim com o a amplificação nas regiões correspondentes aos maiores campos elétricos (b e d).

Podemos observar também que na amostra mais rugosa, PTP, as regiões com campos elevados são mais frequentes, podendo ser observado na Figura XII-3a quatro regiões com campos maiores que 15 MV/cm.

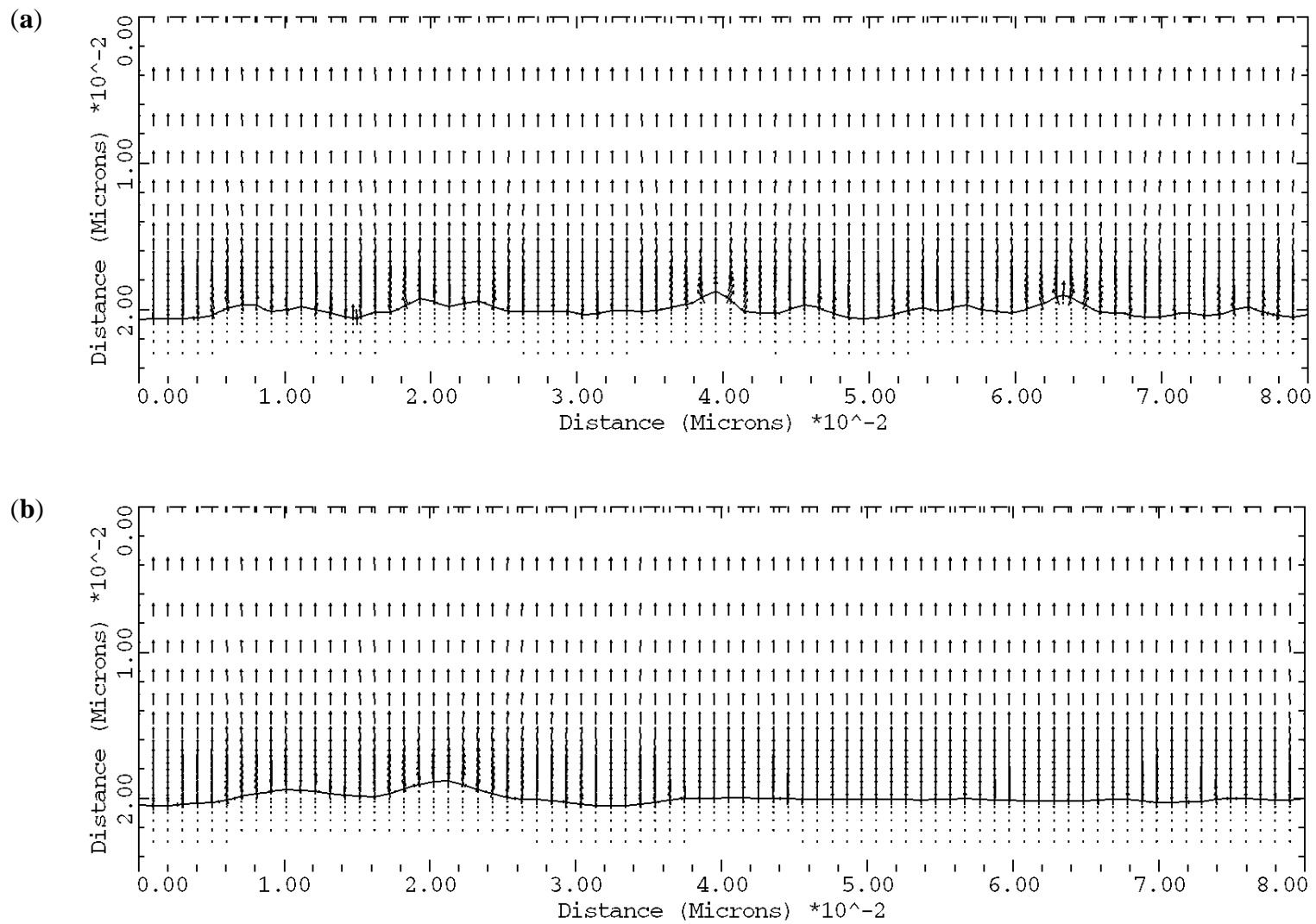


Figura XII-4: Distribuição espacial do vetor campo elétrico na interface (a) PTP e (b) RRL.

O desvio padrão ($\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$) e o valor médio ($\overline{\mathcal{E}_{loc}}$) dos campos elétricos locais foram contabilizados utilizando apenas a população dos campos elétricos do lado do SiO₂.

Tabela XII-2: Valores estatísticos dos campos elétricos locais para os capacitores construídos a partir das interfaces Si/SiO₂ das amostras RRL e PTP.

CAPACITOR	$\overline{\mathcal{E}_{loc}}$ (MV/cm)	$\sigma_{\mathcal{E}_{loc}}$ (MV/cm)	$\overline{\mathcal{E}_{loc}}$ MÁXIMO (MV/cm)
PTP	11,53851	0,94371	20,164
RRL	11,62121	0,54179	16,159

A Figura XII-5 mostra os histogramas de frequência das intensidades dos campos elétricos locais representados nos gráficos da Figura XII-3. Cada histograma tem duas populações distintas. A primeira, a baixos campos, é referente ao campo elétrico local nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ mas dentro do Si. A segunda, a campos elevados é referente ao campo dentro do SiO₂.

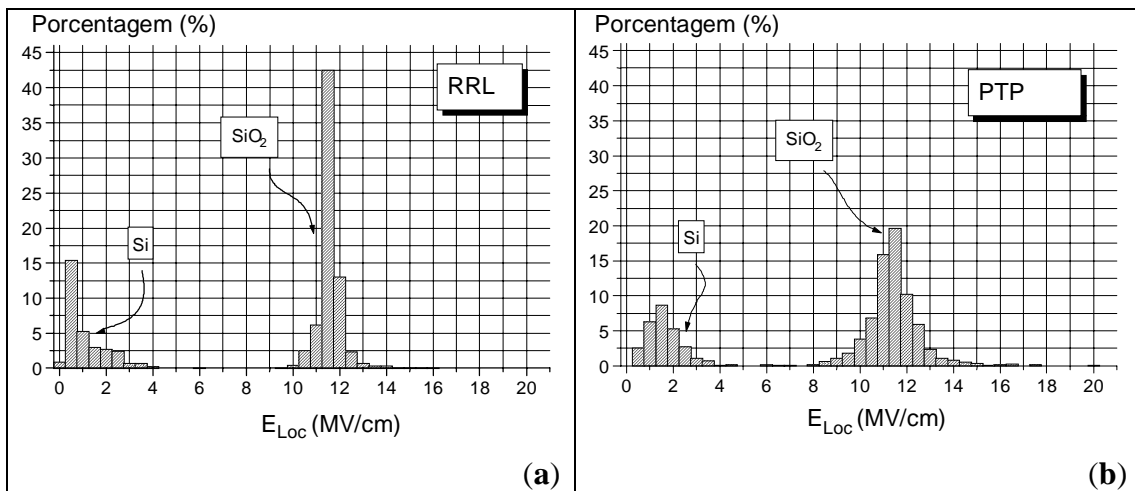


Figura XII-5: Histograma de frequência das intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças da interface Si/SiO₂ nos capacitores virtuais criados a partir das amostras (a) RRL e (b) PTP.

A Figura XII-5a, referente à amostra RRL, mostra uma população bastante concentrada nos valores de 11,7 MV/cm, atingindo uma porcentagem de 42%. Por

outro lado, no silício o campo se concentrou mais em valores próximos a 0,5 MV/cm.

A Figura XII-5b mostra o histograma da amostra PTP, a rugosa, e podemos observar que há uma dispersão maior das intensidades dos campos elétricos locais nas vizinhanças do valor mais freqüente, 11,7 MV/cm. A distribuição do campo elétrico dentro do silício também tem uma dispersão significativa e apresenta uma concentração maior em torno de 1,2 MV/cm.

É importante observar que a aplicação de uma diferença de potencial de 24V em um capacitor com um óxido de espessura de 20 nm produzirá um campo elétrico estimado em 12 MV/cm. No entanto, adicionando algumas imperfeições na interface podemos observar que localmente haverá uma perturbação nos campos elétricos, passando a assumir valores altos como 20 MV/cm em algumas regiões e de 8 MV/cm em outras.

4. Medidas de campos de ruptura para as amostras RRL e PTP

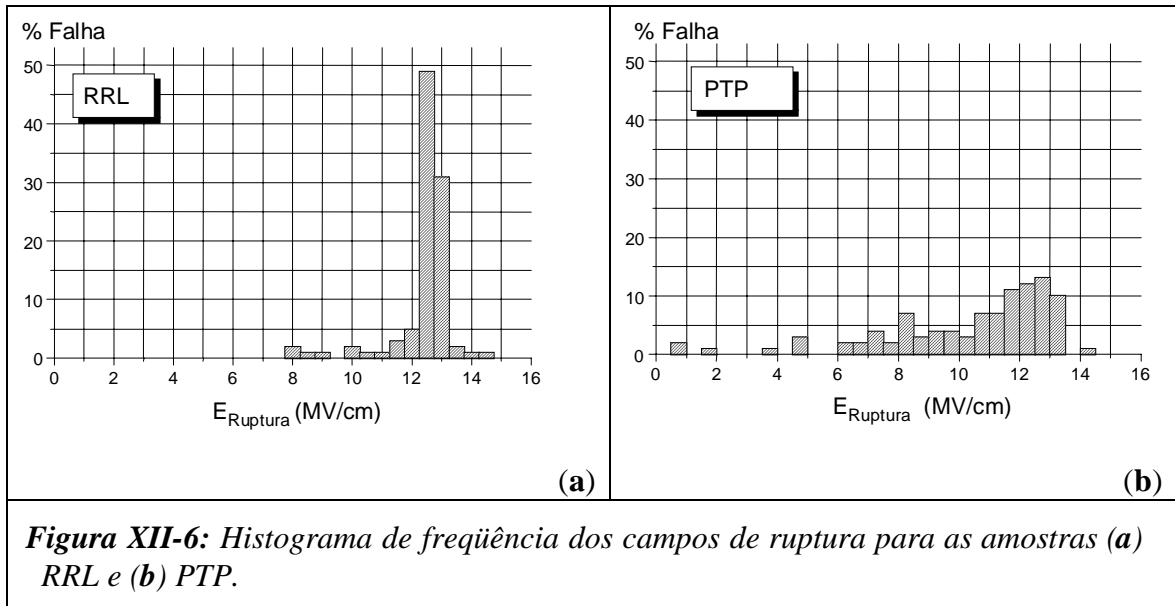
As medidas de campo elétrico de ruptura foram realizadas utilizando uma população de 100 capacitores fabricados em lâminas RRL e 100 fabricados em lâminas PTP. Cada capacitor foi submetido a uma rampa de potencial e o campo de ruptura foi medido conforme a descrição do experimento no capítulo IX.

A Figura XII-6 mostra os histogramas de freqüência dos campos de ruptura dos capacitores MOS construídos nas lâminas RRL e PTP. Nas duas amostras, o intervalo de campo de ruptura com maior freqüência foi o de 12 MV/cm a 13 MV/cm, sendo que para a amostra RRL a freqüência para este mesmo intervalo foi de 80%, enquanto que para a PTP foi de apenas 20%.

A amostra PTP apresentaram rupturas a baixos campos, entre 1 MV/cm a 5 MV/cm, em uma freqüência de 8%, enquanto que a campos médios, entre 7 MV/cm a 11 MV/cm, teve uma freqüência de 30%, e a altos campos, acima de 11 MV/cm, apresentaram uma

freqüência de 60%.

Os capacitores construídos na amostra RRL não apresentaram rupturas em baixos campos. Em campos médios verificou-se poucas rupturas, 15%, enquanto que para os altos campos obteve-se uma alta freqüência de rupturas 80%.



Os testes de ruptura, realizados nos capacitores construídos a partir das amostras PTP e RRL, mostraram características de rupturas bem distintas. A amostra PTP apresentou uma dispersão bastante grande nos valores de campo elétrico de ruptura, indo de 1 MV/cm até valores de 14 MV/cm, o valor médio, contabilizando todos os 100 capacitores foi de 10,37 MV/cm e o desvio padrão foi de 2,89 MV/cm. Por outro lado, a população de capacitores referente à amostra RRL teve seus valores de ruptura bastante concentrados em altos campos elétricos, sendo que o intervalo de campos elétricos de ruptura foi de 8 MV/cm até 14,5 MV/cm. O valor médio foi de 12,41 MV/cm e o desvio padrão foi de 1,02 MV/cm (veja Tabela XII-3).

É interessante observar que o número de capacitores com os valores de campos de rupturas maiores que 13,25 MV/cm, para espessura de 20 nm, foi surpreendentemente grande, pois a técnica de crescimento de óxido OTR não é a que produz os óxidos

com melhores características de ruptura. No entanto, as características de ruptura foram comparáveis aos dos melhores óxidos térmicos.

Tabela XII-3: Tabela dos valores estatísticos dos campos elétricos de ruptura das amostras RRL e PTP.

AMOSTRA	$\bar{\mathcal{E}}_R$ (MV/cm)	$\sigma_{\mathcal{E}_R}$ (MV/cm)	\mathcal{E}_R MÁXIMO (MV/cm)
PTP	10,37	2,89	14,03
RRL	12,41	1,02	14,36

É importante observar que o valor do campo de ruptura do dielétrico (\mathcal{E}_R) é obtido experimentalmente dividindo a diferença de potencial aplicado nos eletrodos pela espessura do óxido. Portanto \mathcal{E}_R pode ser interpretado como sendo uma média dos campos elétricos locais presentes dentro do dielétrico.

Os capacitores construídos a partir das lâminas RRL apresentaram campos elétricos de ruptura significativamente maiores que os construídos a partir da lâmina PTP. No entanto, a amostra PTP também apresentou em alguns casos campos de rupturas tão elevadas quanto às obtidas nas amostras RRL.

Tabela XII-4: Carga de ruptura Q_R , densidade de estados de interface D_{it} e altura da barreira de potencial ϕ_0 medidos para os capacitores construídos a partir das amostras RRL e PTP.

AMOSTRA	Q_R (C/cm ²)	D_{it} (10 ¹⁰ eV ⁻¹ /cm ²)	ϕ_0 (eV)
RRL	3 - 25	< 1	3,3 ± 0,2
PTP	0,1 - 6	5 ± 3	3,1 ± 0,2

4.1 Carga de ruptura

A carga de ruptura Q_R é um dos parâmetros fundamentais nos modelos atuais de ruptura [1,2] e é mostrada na Tabela XII-4 para os capacitores construídos a partir

das amostras RRL e PTP. Pode-se constatar que os valores obtidos para a amostra RRL são quase sempre maiores que as da PTP, havendo um pequeno intervalo nos valores que são comuns: 3 a 6 C/cm².

Como a amostra RRL difere da PTP apenas na topografia das interfaces, resultando daí um incremento do campo elétrico local maior na amostra PTP, e com isso uma maior injeção local de elétrons nas regiões onde o campo elétrico local é maior, a amostra PTP irá injetar localmente (microscopicamente) mais elétrons, enquanto que macroscopicamente a quantidade de elétron injetada não chegou a ser tão grande quanto a da amostra RRL.

A amostra mais rugosa, PTP, apresenta nano-regiões em que o campo elétrico local bastante intenso coexiste com nano-regiões com campos elétricos baixos. Com isso, haverá uma injeção bem maior de elétrons no SiO₂ nas nano-regiões onde o campo elétrico é intenso, em contraposição às nano-regiões com campos baixos. Isso terá como consequência uma maior erosão nessas nano-regiões devido a elevada ejeção de elétrons e resultando em uma ruptura precoce do dielétrico nestas regiões.

Na amostra com interface menos rugosa, RRL, haverá também um injeção de elétrons nas nano-regiões com os campos elétricos mais elevados mas estas nano-regiões serão em menor número e os campos elétricos envolvidos serão menores aos observados nas amostras PTP. Nestas amostras podemos afirmar que o fluxo de elétrons se dará de maneira mais “uniforme” ao longo de toda a interface Si/SiO₂.

É interessante observar que a carga de ruptura é obtida aplicando uma diferença de potencial entre os eletrodos de forma tal que o campo elétrico fica constante dentro do dielétrico. A corrente e o tempo da ruptura é monitorada criando um gráfico densidade de corrente versus tempo. A área sob a curva é a carga total que fluiu pelo capacitor até a ruptura (Q_R). Com isso o fato da amostra PTP, a mais rugosa, apresentar maior injeção de elétrons e ao mesmo tempo ter menor carga de ruptura pode ser justificada pelo tempo de ruptura. As amostras rugosas têm um tempo menor de ruptura. As amostras RRL têm uma

injeção de elétrons menores mas com eles demoram mais para romper eles têm uma carga de ruptura maior.

Os capacitores construídos em lâminas PTP injetam mais cargas durante o tempo de ruptura t_R , após o qual rompem e não conduzem mais. Por outro lado, os capacitores construídos em lâminas RRL injetam menos carga no intervalo de tempo t_R , mas eles não rompem nesse intervalo de tempo. Passado esse tempo eles continuam a conduzir por muitas unidade de t_R até que rompem. No cômputo final as amostras RRL conduzem mais carga pelo dielétrico até o evento da ruptura.

4.2 Barreira de potencial

A diferença na barreira de potencial para as amostras RRL e PTP, mostrada na Tabela XII-4, pode ser atribuída à maior injeção de elétrons na interface com maiores campos elétricos locais. Veja na equação de Fowler-Nordheim no Capítulo II, seção 3.4, que a densidade de corrente depende do quadrado do campo elétrico multiplicado pela exponencial do campo elétrico.

Na amostra PTP, que apresentou os maiores campos elétricos locais, portanto com maior injeção local dos elétrons, dando um resultado macroscópico de um abaixamento da barreira de potencial. Na amostra RRL, que tinha os menores campos elétricos locais, a barreira de potencial foi maior.

DiStefano [3] também fez um mapeamento da barreira de potencial entre os Si/SiO₂ em laminas contaminadas com concentrações diferentes de Sódio (Na), através de medidas de fotoemissão interna: obteve uma distribuição heterogênea no valor da barreira, onde havia a contaminação metálica a barreira diminuía.

A barreira de potencial, que é a diferença das funções trabalho dos dois materiais, é um parâmetro macroscópico intrínseco não podendo ser mudado, o que ocorre neste caso é que o modelo Fowler-Nordheim não leva em

conta o fator rugosidade, o que faz com

que a determinação da barreira de potencial apresente valores diferentes em amostras com diferentes rugosidades. Neste caso poderíamos dizer que a barreira de potencial obtida é uma barreira de potencial efetiva.

4.3 Densidade de estados de interface

A densidade de estados de interface D_{it} , mostrada na Tabela XII-4, apresentou valores maiores para a amostra PTP. Do ponto de vista das rugosidades podemos dizer que nas regiões com pontas e conseqüente campo elétricos elevados, haverá maior injeção de carga nessas nano-regiões. A injeção maior de carga levará a uma maior deterioração dessas nano-regiões que vão da ponta na interface Si/SiO₂ até a interface Al/SiO₂. Essa deterioração se manifestará pela criação de defeitos, tais como a densidade de estados de interface.

4.4 Medida das contaminações

Foram feitas medidas de TXRFA (Total Reflection X-Ray Fluorescence Analyse) [4] para determinar a concentração de contaminantes na interface Si/SiO₂. A técnica TXRFA consegue detectar concentrações de elementos com números atômicos que vão desde o K até o urânio. A Tabela XII-5 mostra os contaminantes encontrados, assim como suas concentrações em átomos/cm².

A amostra PTP foi a que apresentou maiores concentrações de contaminações e os elementos com maiores concentrações foram K, Zn e Fe, em ordem decrescente de concentrações. Na amostra RRL as maiores concentrações foram encontradas para os elementos K, Zn e Cu. A origem destes contaminantes, muito provavelmente, é o HF (ácido fluorídrico) que foi utilizado na penúltima etapa de limpeza da lâmina. Na literatura, as concentrações em que a contaminação por estes elementos são prejudiciais são muito maiores que as obtidas nestas amostras.

Tabela XII-5: Concentração de contaminantes na interface Si/SiO₂, medidas através da técnica TXRFA, nas amostras RRL e PTP.

ELEMENTOS	PTP (10 ¹⁰ átomos/cm ²)	RRL (10 ¹⁰ átomos/cm ²)
K	7,4 ± 0,6	5,6 ± 0,5
Ca	2,10 ± 0,07	1,20 ± 0,05
Ti	2,3 ± 0,5	1,1 ± 0,4
Cr	< 0,3	< 0,1
Mn	< 0,23	< 0,09
Fe	5,5 ± 0,2	2,0 ± 0,1
Co	< 0,19	< 0,07
Ni	0,26 ± 0,04	< 0,01
Cu	2,10 ± 0,03	3,00 ± 0,05
Zn	6,8 ± 0,1	4,30 ± 0,06

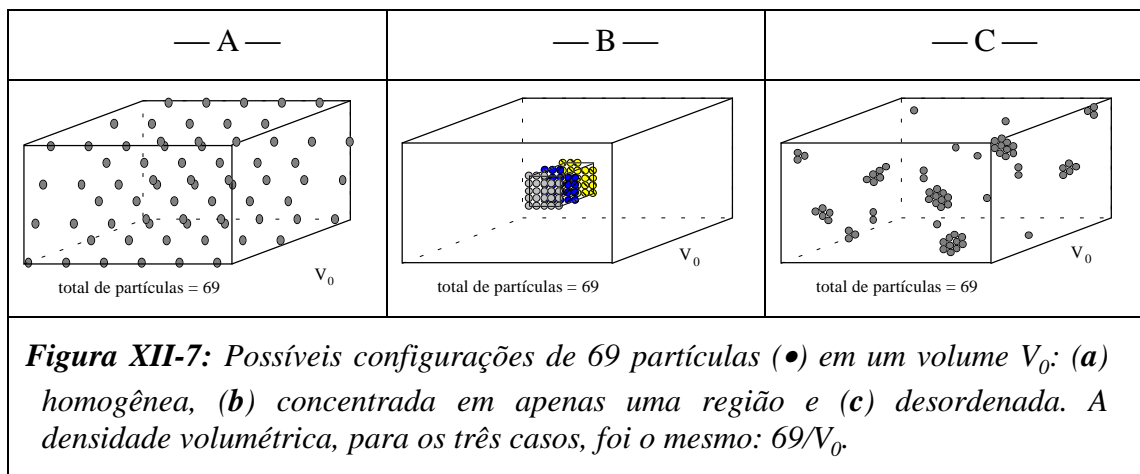
Falster [5] obteve campo de ruptura de 11,5 MV/cm para a concentração de 5,0×10¹¹ átomos/cm² de F, 1,5×10¹¹ átomos/cm² de Cu, 2,8×10¹¹ átomos/cm² de Zn (obtidos por TRFA).

Honda [6] utilizando implantação iônica para contaminar intencionalmente e controladamente, obteve um campo de ruptura de 9,7 MV/cm, para uma concentração de 1,0×10¹⁴ átomos/cm² 7,0 MV/cm para 1,0×10¹⁵ átomos/cm² de Fe. Em outro estudo Honda [7] obteve 7.5 MV/cm e 4.5 MV/cm para concentrações de 10¹⁴ e 10¹⁵ átomos/cm² de Cobre, respectivamente.

Portanto, as concentrações dos contaminantes encontradas nas amostras PTP e RRL não poderiam ser as responsáveis pelo campo de ruptura do dielétrico.

4.5 Sumário das medidas elétricas

A técnica TXRFA consegue fazer apenas medidas superficiais. A área de análise sendo de 8 mm², é bem maior que a área abrangida pelas rugosidades encontradas nestas estruturas. Pela Tabela XII-5 podemos constatar que as concentrações das impurezas na interface Si/SiO₂ podem ser consideradas praticamente desprezíveis se adotarmos um ponto de vista convencional. Por outro lado, pode-se utilizar uma abordagem microscópico-local, que no caso das contaminações seria admitir que os contaminantes não estão necessariamente uniformemente distribuídos na interface Si/SiO₂, considerando que os contaminantes estarão concentrados preferencialmente em algumas regiões, formando aglomerados ou precipitados.



Os valores de concentração, obtidos na Tabela XII-5, são concentrações médias sobre uma grande região, 8 mm², que é a área de análise do TXRFA. Isto faz com que em alguns locais, a concentração "real" possa ser bem maior que a medida experimentalmente, como por exemplo o Ferro (Fe), que teve uma concentração de $5,5 \pm 0,2$ átomos/cm² para a amostra PTP. Segundo a abordagem microscópico-local, a concentração de $5,5 \pm 0,2$ átomos/cm², medida em uma área de análise de 8 mm², pode ser interpretada da seguinte maneira: em alguns locais (dentro da área 8 mm²) a concentração "real" seja nula, enquanto que em outras sejam bem superiores a $5,5 \pm 0,2$ átomos/cm². A presença destas nano-concentrações de contaminantes metálicos na interface Si/SiO₂, pode explicar

bastante bem a ruptura do dielétrico a baixos e médios campos elétricos [5], já que estes metais iriam precipitar preferencialmente na interface Si/SiO₂, o que recai no caso do precipitado metálico, já estudado no Capítulo XI seção 7, em que uma interface com um precipitado metálico induz um grande incremento no campo elétrico local.

Lembrando também que, no caso da amostra PTP a contaminação metálica estaria coexistindo com uma maior rugosidade das interfaces do SiO₂. O efeito elétrico "puro" das rugosidades, sem o efeito adicional do metal, só seria verificado nos capacitores com elevados campos elétricos de ruptura.

5. Resumo da comparação entre o capacitor real e o simulado

O fato da rugosidade topográfica ser consideravelmente grande resulta em uma rugosidade eletrônica também bastante grande, representado pelo valor do desvio padrão dos campos elétricos locais. Com uma rugosidade eletrônica grande teremos o campo elétrico variando, de ponto a ponto, em direção, intensidade e até em sentido. Isto certamente acarretará uma alteração da interação do campo elétrico local com um portador de carga que estiver transitando nas vizinhanças. Poderá ter um efeito bastante grande na injeção de corrente por F-N, no sentido de incrementá-lo pois esta depende do produto do quadrado do campo elétrico pelo exponencial do campo elétrico. Assim, um pequeno incremento no campo elétrico levará a um aumento exponencial da corrente.

Esta variação da espessura local, pode ser tanto no sentido de afinamento como de alargamento. No caso de alargamento não há problema mas, no caso de um afinamento local da espessura do óxido o campo elétrico local é incrementado às custas deste afinamento. O afinamento local sempre vem acompanhado de uma curvatura da interface, o que poderá incrementar mais ainda o campo elétrico local.

6. Alguns comentários sobre o modelo de ruptura

O elétron ao tunelar através da barreira de potencial, existente entre o anodo e o dielétrico, irá cair na banda de condução do dielétrico. A permanência deste elétron injetado dentro da banda de condução do dielétrico poderá resultar em defeitos no dielétrico [8,9], que ao contrário do semiconductor, não tem portadores livres suficientes para reconstruir a sua rede, tornando, assim, o dano permanente. Estes defeitos¹ da rede do SiO₂ se manifestará através do aparecimento de níveis permitidos dentro da banda de energia proibida [1,10], níveis estes presentes preferencialmente próximos à interface injetora, os "e-traps" [1].

Quanto maior for a espessura do dielétrico maior será o percurso deste elétron dentro da banda de condução. Isto irá conferir uma dependência da ruptura com a espessura do óxido.

O campo elétrico também não tem um papel determinante no mecanismo em si, ele apenas atua secundariamente, acelerando o processo através da injeção de mais elétrons em um intervalo de tempo determinado. O campo de ruptura do dielétrico depende da espessura na forma: d_{ox}^n , sendo n entre 0,2 e 0,3 [11] enquanto Wolters atribui 0,5 [2] para esta dependência.

Podemos considerar as principais etapas:

- i. Injeção de elétrons do anodo dentro da banda de condução do dielétrico.
- ii. Os elétrons irão percorrer a banda de condução colidirão com a rede, transferindo uma certa quantidade de energia para a rede através do mecanismo de troca de energia por fônon. Esta energia transferida para o dielétrico irá resultar na criação de defeitos, tais como os "e-traps", que são níveis permitidos

dentro da banda proibida do dielétrico. Estes defeitos são criados próximos à interface injetora do dielétrico.

- iii. A presença destes níveis permitidos na banda proibida próximos à interface injetora irá incrementar a corrente de tunelamento, pois os elétrons irão tunelar para os defeitos e dos defeitos para a banda de condução do dielétrico.
- iv. Este processo de criação de defeitos² e aumento de corrente, mais a criação de defeitos daí resultante terá um efeito multiplicador.
- v. Estes defeitos, quando gerados longe da região injetora, irão só armadilhar os elétrons sem a contrapartida de desarmadilhamento, pois não há sítios próximos para o tunelamento, e assim haverá a formação de uma superfície de cargas negativas que inibirá a injeção de mais elétrons pelo anodo.
- vi. Haverá uma inibição, mas a injeção de elétrons não cessará. Assim, a injeção de elétrons e a criação de mais defeitos irá continuar nas regiões, ou seções retas, onde o efeito repulsivo das cargas armadilhadas não existir ou for menos intenso. Assim, os defeitos serão criados também nas regiões onde não existiam defeitos originalmente. Depois de criado o defeito, seguirá a captura de um elétrons pois enquanto não houver o armadilhamento de um elétron, esta "nova" passagem continuará sendo bastante utilizada pelos elétrons livres; isto conferirá um efeito homogeneizador na formação de defeitos e armadilhamento de elétrons.

¹a natureza dos defeitos não foi discutida neste trabalho, sendo apenas considerado os efeitos elétricos destes defeitos.

²a presença de defeitos próximos à interface injetora é devido à distribuição de energia (velocidade) dentro do dielétrico, pois haverá uma distribuição espacial não homogênea de elétrons dentro do dielétrico, haverá uma espécie de filtragem de elétrons, permitindo apenas a passagem dos mais energéticos.

- vii. A sucessão de criação de defeitos, posicionados aleatoriamente dentro do dielétrico, seguida de armadilhamento de elétrons, irá acontecer até que a densidade de defeitos esteja tão elevada que haja um tunelamento entre dois defeitos vizinhos. Se este conjunto de defeitos estiverem próximos ao catodo, o tunelamento poderá ser realizado por um circuito alternativo (além da de F-N de tunelamento pela cume da barreira): um sistema de defeitos dentro do cume da barreira. Depois que este sistema de defeitos formarem uma passagem de baixa impedância os elétrons - antes armadilhados nestes defeitos - escoarão para o anodo.
- viii. Neste ponto o transporte de elétrons, dentro do dielétrico, processar-se-á através de três mecanismos: tunelamento pela barreira de potencial do catodo, um trecho dentro da banda de condução até ser armadilhado, depois de armadilhado passa a tunelar pelo sistema de defeitos até chegar ao anodo. Sendo que o "gargalo" do fluxo de corrente é o tunelamento pelo cume da barreira de potencial (F-N).

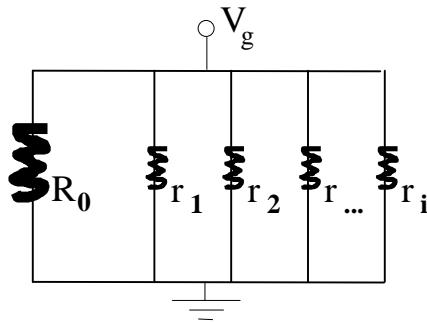


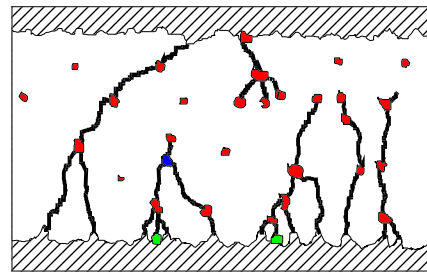
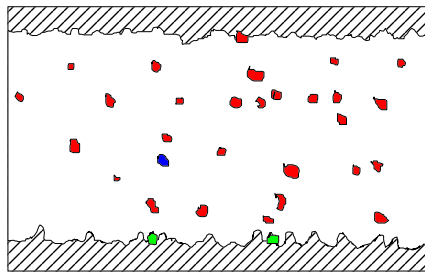
Figura XII-1: Esquema das resistências paralelas existentes em um dielétrico de um capacitor MOS, momentos antes da ruptura do dielétrico.

- ix. No entanto, o processo subjacente de criação de defeitos dentro do dielétrico prosseguirá inexoravelmente criando mais defeitos e tendo como resultado a diminuição do percurso médio do elétron dentro da banda de condução do dielétrico e um maior percurso dentro das armadilhas. E assim, o dielétrico começa a ter a sua banda de energia proibida repleta de níveis discretos, interligados e entrelaçados pelo efeito túnel, como "buracos de minhoca", por onde os elétrons poderão transitar livremente através

de tunelamento, ou até mesmo por efeito termoiônico.

- x. A construção destes "buracos de minhoca" prosseguirá até que seja criada uma passagem entre o anodo e o catodo, permitindo assim a descarga abrupta da energia $CV^2/2$, armazenada dentro do capacitor, e resultando na ruptura térmica (fusão dos materiais).
- xi. Muito provavelmente o material que irá se fundir primeiro será o silício, pois ele tem a menor temperatura de fusão, e a seguir este calor irá se propagar para as vizinhanças fundindo tanto o alumínio bem como o SiO_2 por efeito Joule.

A natureza dos defeitos criados dentro do volume do dielétrico podem originar pela presença dos campos elétricos elevados, criando um arranjo estrutural diferente daquela existente no óxido SiO_2 , que resultará em um gap de 9 eV. O mesmo ocorrerá na interface Si/SiO_2 , com a criação de densidade de defeitos na interface.



(a)

(b)

Aparentemente, a hipótese de criação de níveis dentro do dielétrico através da colisão de elétrons com a rede de sílica, seguido de ruptura de uma ligação de 4,1 eV [2] é bastante improvável. O mais provável é que algum defeito preexistente dentro do dielétrico, inicialmente em estado latente, é ativado pela passagem dos elétrons. Isto é bastante plausível, pois a rede de sílica é amorfa e cheia de defeitos, havendo tanto ligações tensionadas, "dangling bonds", átomos de silício e oxigênio intersticiais, isto sem falar dos defeitos extrínsecos. Portanto, tanto o campo elétrico como a passagem de elétron pelo filme do dielétrico podem ativar estes defeitos inicialmente latentes.

É interessante lembrar que nos modelos de ruptura apresentados resumidamente neste trabalho, a carga de ruptura é um parâmetro macroscópico, é uma média de carga injetada obtida sobre toda a área do eletrodo do capacitor. Mas simultaneamente, na região do defeito o campo elétrico é mais elevado, e com isso a injeção de carga nas suas vizinhanças deve ser bem maior que a média registrada, criando um fluxo local maior de corrente nesta região com maior criação de defeitos. Num segundo momento, nesta região de defeitos, ocorre o armadilhamento de elétrons com resultante blindagem localizada. Neste estágio da degradação do óxido/capacitor o efeito do incremento local de campo elétrico é praticamente anulado, pois a blindagem irá inibir a injeção de elétrons na região. Com isso há o efeito de "criação homogênea de defeitos", até que toda a região tenha os seus defeitos assim como seu elétron armadilhado; aí então, o efeito do incremento local do campo passara a ter importância novamente, e uma segunda onda de elétrons passará a percorrer o local, criando mais defeitos que poderão ser decisivos na criação de uma passagem preferencial dos elétrons e o descarregamento de toda carga armazenada no capacitor ao mesmo tempo, levando a uma ruptura irreversível do dielétrico e à destruição do capacitor.

7. Bibliografia

- 1 HARARI, E. J. Appl. Phys., Vol. 49, p.2478 (1978).
- 2 WOLTERS, D.R. Growth, Conduction, Trapping and Breakdown of SiO₂ Layers on Silicon, (Tese de Doutorado) Eindhoven, Netherlands, (1988).
- 3 DiSTEFANO, T.H J. Appl. Phys., Vol. 44, p.527 (1973).
- 4 SHIRAIWA, T; FUJINO, N.; SUMITA, S.; TANIZOE, Y. In: Semiconductor Fabrication: Technology and Metrology, ed. Gupta, D.C., p.314 (1989).
- 5 FALSTER, R. J. Appl. Phys., Vol. 66 (7), p.3355 (1989).
- 6 HONDA, K.; OHSAWA, A.; NAKANISHI, T. J. Electrochem. Soc., Vol.142 (10) (1995).

- 7 HONDA, K.; et al. Appl. Phys. Lett., Vol.45 (3), p.270 (1984).
- 8 FARMER, K.R. et al. Appl. Phys. Lett., Vol.58 (23), p.2666 (1991).
- 9 FISHETTI, M.V. et al. Phys. Rev. B., Vol.35, p.4404 (1987).
- 10 WOLTERS, D.R.; VERWEY, J.F. Springer Series in Electrophysics, Eds. SCHULZ, M; PENSL, G. p.180 (1981).
- 11 VAPAILLE, A. and BORBOTTIN, G. Instabilities in Silicon devices, North Holland, Amsterdam (1986)

Capítulo XIII

Conclusões Finais

1. Medida da rugosidade da interface Si/SiO₂

A rugosidade da interface Si/SiO₂ depende da posição e da escala em que ela é medida. Existe uma escala crítica, definida pela área de análise L_c×L_c, tal que para áreas maiores a rugosidade fica praticamente constante ($\bar{\sigma}_{cte}$). Por outro lado, para áreas de análises menores que L_c×L_c, a medida da rugosidade dependerá tanto da posição como do tamanho da área de análise em que a medida for feita.

Para áreas de análises menores que L_c×L_c, o valor da rugosidade medida através do parâmetro $\bar{\sigma}_z$ terá uma dependência exponencial em relação ao tamanho da área de análise, que é expressa como:

$$\bar{\sigma}_z = k L^\alpha \quad \text{[XIII-1]}$$

onde L é o lado do quadrado que define a área de análise, e α dependerá dos parâmetros utilizados no processo de oxidação, assim como da orientação da superfície do silício.

2. Simulações de capacitores MOS com um defeito estrutural

A simulação de capacitores MOS com defeitos estruturais, contribuiu para classificar os diferentes defeitos observados experimentalmente na estruturas MOS e a estudar isoladamente seus efeitos na distribuição do campo elétrico local e na ruptura do SiO₂.

Uma das estruturas mais comuns encontradas na interface Si/SiO₂ é a rugosidade positiva, que causa um afinamento local na espessura do SiO₂. A ponta positiva provoca um

aumento dos campos elétricos locais de aproximadamente 80%, quando comparado ao campo elétrico estimado macroscopicamente ($\mathcal{E} = V_p/d_{ox}$).

A ponta negativa, que causa um aumento local da espessura do SiO₂, também causa um incremento no campo elétrico local, porém muito pequeno.

A presença de pontas, positivas ou negativas, também causa um incremento do campo elétrico local no lado do silício, que em alguns casos pode chegar a 2 MV/cm. Este valor é superior ao campo de ruptura do silício em uma junção P-N, que é de apenas 0,3 MV/cm. Neste caso, a ruptura não ocorre porque a região em que o campo elétrico é elevado, é extremamente pequena, ao longo de aproximadamente 3 nm da interface Si/SiO₂, não permitindo que o elétron ganhe energia do campo elétrico.

O raio de curvatura da ponta, também é um elemento importante na intensidade do incremento do campo elétrico local e no tamanho da área perturbada. Para pontas mais “agudas”, com menores raios de curvaturas, o incremento do campo elétrico local é maior, porém o tamanho da área perturbada é menor. Por outro lado, para pontas mais “obtusas”, com raios de curvaturas maiores, o incremento do campo elétrico local é menor, mas o tamanho da área perturbada é maior.

A dispersão dos valores dos campos elétricos locais ($\sigma_{\mathcal{E}}$), perturbados por uma ponta positiva, cresceu linearmente com o campo elétrico macroscópico. Isto, em outras palavras, significa que a razão $\sigma_{\mathcal{E}}/\mathcal{E}_M$ é uma constante e pode ser uma maneira de medir a rugosidade eletrônica. O tamanho da área em que os campos elétricos locais foram perturbados pela presença da ponta não variou com a variação da intensidade do campo macroscópico.

Das estruturas MOS simuladas, o com precipitado metálico foi o mais prejudicial, elevando o campo elétrico local em até 100%. Isto explica os baixos campos elétricos de ruptura em capacitores contaminados com metais.

As estruturas MOS com precipitados de Al₂O₃ nas vizinhanças da interface

Al/SiO₂, ocasionou um aumento do campo elétrico local. É interessante observar que o incremento do campo elétrico local por um precipitados de Al₂O₃ não é tão intenso como o causado pela ponta positiva, com as mesmas dimensões, na interface Si/SiO₂.

O precipitado de SiO_x cria uma perturbação desprezível nos campos elétricos locais. Os precipitados de SiO_x podem se tornar bastante nocivos ao dispositivo quando existir contaminação metálica, pois tenderão a servir de centro de precipitação destes metais, passando a apresentar características metálicas, o que recairá no caso do precipitado metálico: extremamente prejudicial.

Nas simulações, a presença de cargas na interface Si/SiO₂ tende a ser danoso somente a partir de concentrações superiores 10¹³ C/cm².

3. Dois tipos de amostras: "rugosa" e "suave"

Experimentalmente, a amostra "rugosa" (PTP) apresentou campos de rupturas menores que os da amostra "suave" (RRL). Este resultado foi explicado pelas simulações dos capacitores virtuais, construídos a partir das estruturas de interface das duas amostras, que indicavam um incremento maior no campo elétrico local na amostra mais rugosa.

Ou seja, apesar de macroscopicamente os dois capacitores estarem submetidos a um mesmo campo médio ($\mathcal{E} = V_p/d_{ox}$), localmente a amostra mais rugosa apresentava regiões onde o campo elétrico local era 70% superior ao do campo médio estimado. Isso fez com que a ejeção de elétrons do catodo para o dielétrico fosse mais intensa nestas regiões com campos elétricos locais maiores. O fluxo maior de elétrons nestas regiões produziu uma maior erosão, acarretando na ruptura do dielétrico a campos médios menores.

Apêndice A

Usando a função seno para interpretar os gráficos de Yoshinobu

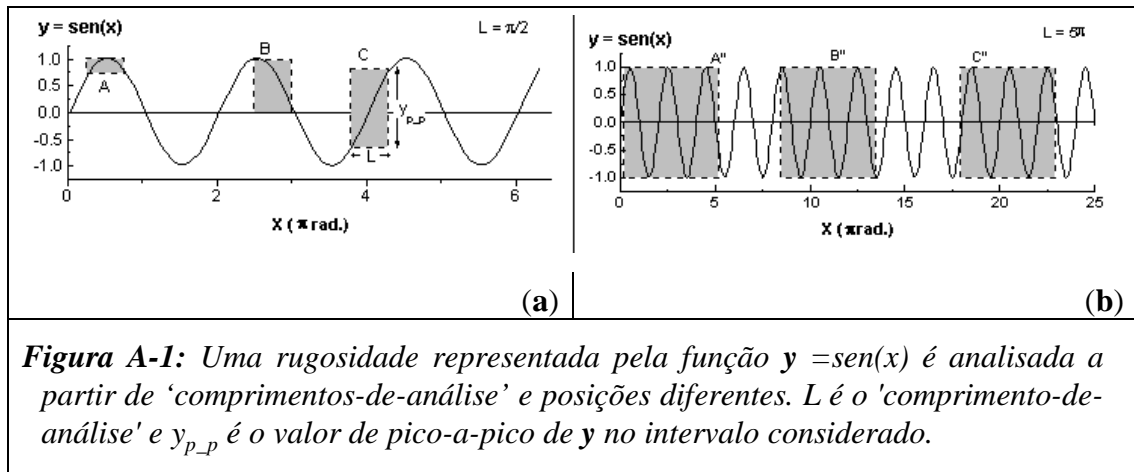
Com o objetivo de entender melhor as implicações dos resultados obtidos a partir da determinação da rugosidade em diferentes áreas de análise, será analisada uma função periódica, $y = \text{sen}(x)$, de onde serão quantificadas as rugosidades a partir do desvio padrão (σ_y), do valor médio e do valor de pico-a-pico de y . Esta determinação será feita a partir de diferentes "comprimentos de análises" definidos por:

$$L = L_f - L_o \quad [A-1]$$

onde L_o e L_f são o início e o final do intervalo de análise contido na abscissa x . Veja na Figura A-1 os retângulos hachurados que encerram porções da curva a serem observadas a partir de 'janelas', definidas pelo comprimento de análise L e pelo valor de L_o , que posicionará o intervalo $[L_o; L_f]$ em relação ao período da função y . Estes retângulos terão larguras iguais ao 'comprimentos-de-análise' (L) e alturas dadas pelo valor do pico-a-pico de y dentro de região analisada. Veja na Figura A-1a o caso em que o comprimento de análise é menor que o período da função seno ($L < 2\pi$), o que faz com que as dimensões dos retângulos sejam muito sensíveis aos valores assumidos por L_o . Por outro lado, quando o comprimento de análise é maior que o período da função ($L > 2\pi$), veja Figura A-1b, as dimensões dos retângulos ficam invariáveis.

A Figura A-1 mostra a função $y = \text{sen}(x)$, sendo analisada por dois "comprimentos-de-análise" (L): $\pi/2$ e 5π . Para cada valor de L foram tomados três intervalos $[L_o; L_f]$ posicionados diferentemente em relação ao período da função y , a partir da escolha

de três valores diferentes para L_0 : 0 , $\pi/2$ e $7\pi/4$.



Na Figura A-1a, onde L é igual a $\pi/2$, foi obtido, na posição A (intervalo de $\pi/4$ a $3\pi/4$), o valor médio de 0,900316, o desvio padrão 0,0879796 e o valor de pico-a-pico de 0,292893. Para a posição B [$\pi/2$; π] o valor médio foi de 0,63662, o desvio padrão 0,307758 e o pico-a-pico de 1,0; para a posição C [$7\pi/4$; $9\pi/4$], o valor médio foi de 0, o desvio padrão 0,426251 e o valor do pico-a-pico 1,41421. Pode-se constatar que existe uma grande dependência dos valores médios, pico-a-pico e nos desvios padrões do valor de L_0 quando o comprimento de análise é igual a $\pi/2$. O desvio padrão teve uma variação bastante grande, quando são comparados os obtidos nas posições A e C: $\approx 100\%$. A variação do pico-a-pico foi ainda mais significativa que a do desvio padrão: entre A e B há uma diferença de um fator multiplicativo de aproximadamente 5. Quanto aos valores médios os valores obtidos estão entre 1 e 0.

Para a região de análise de comprimento 5π , mostrada na Figura A-1b, pode-se observar que para a posição A' [$\pi/4$; $21\pi/4$] o valor médio foi de 0,0900316, o σ_y 0,701352. Para a posição B' [$\pi/2$; $11\pi/2$] o valor médio foi de 0 e o σ_y de 0,707107. Para C' [$7\pi/4$; $27\pi/4$] o valor médio foi de 0,0900316 e o σ_y de 0,701352. O valor do pico a pico é igual a 2 para quaisquer valores de L_0 . Isto ocorre porque y é uma função de período 2π , e para

comprimentos de análises maiores ou iguais a 2π o valor do pico-a-pico ficara sendo sempre igual a 2.

Tabela A-1: Valores estatísticos obtidos para uma rugosidade representada pela função $y = \text{sen}(x)$ para dois comprimentos de análise ($\pi/2$ e 5π) posicionados em diferentes locais em relação ao período da função y .

Posição	$[L_o; L_f]$	Valor médio	Desvio padrão	Pico-a-pico
A	$[\pi/4; 3\pi/4]$	0,900316	0,0879796	0,292893
B	$[\pi/2; \pi]$	0,63662	0,307758	1
C	$[7\pi/4; 9\pi/4]$	0	0,426251	1,41421
A'	$[\pi/4; 21\pi/4]$	0,0900316	0,701352	2
B'	$[\pi/2; 11\pi/2]$	0	0,707107	2
C'	$[7\pi/4; 27\pi/4]$	0,0900316	0,701352	2

A Figura A-2 mostra o resultado de uma generalização dos dois casos supramencionados, onde o desvio padrão é determinado para diferentes valores de comprimento-de-análise (L). A origem do intervalo de análise (L_o) é posicionado em seis pontos diferentes: $0, \pi/4, \pi/2, 3\pi/4, \pi$ e $5\pi/4$, resultando em seis curvas. Das curvas mostradas na Figura A-2 pode-se observar que:

- Para comprimentos de análises *menores* que o período da função que descreve a rugosidade ($L < 2\pi$) o valor do desvio padrão é bastante sensível à posição do intervalo de análise (ou seja, aos valores de L_o e L_f), podendo resultar em valores de σ_y bastante diferentes.
- Para comprimentos de análise maiores que um período da função ($L > 2\pi$) o valor do σ_y tende a flutuar assintoticamente em torno do valor $2^{-1/2}$, que é o valor de σ_y quando L é igual a 2π .

c) Há uma sobreposição das curvas com L_0 igual a 0 e π , e para curvas com L_0 igual a $\pi/4$ e $5\pi/4$. Isto mostra que σ_y é periódico (π) em relação a L_0 .

Conforme a área de análise aumenta o valor médio tende a zero e o de σ_y para $2^{-0.5}$. Quando o comprimento de análise é maior que 10π (cinco períodos) o valor do σ_y é bastante próximo de $2^{-0.5}$ e o valor médio de 0, para qualquer valor de L_0 .

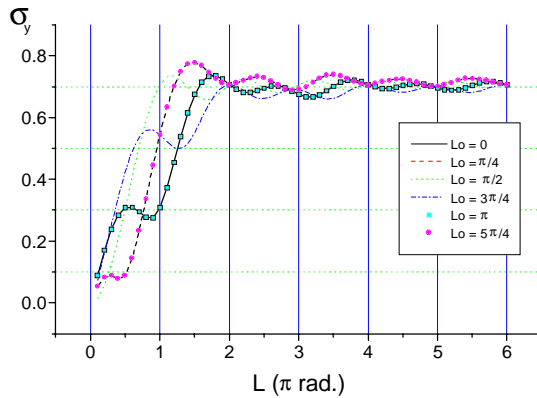


Figura A-2: Gráfico do desvio padrão de y em função do comprimento de análise (L). As diferentes curvas correspondem a diferentes escolhas de L_0 .

As generalizações mostrados nos itens **a**, **b** e **c** foram testadas e confirmadas para várias funções periódicas. No entanto, superfícies como as da interface Si/SiO₂ são extremamente complexas, não havendo uma periodicidade óbvia.

Pode-se afirmar que há uma mudança qualitativa da rugosidade quando a área de análise diminui para valores menores que o período, no caso de uma rugosidade representada por uma função periódica. No caso da rugosidade da interface Si/SiO₂, o que ocorre é que há uma coexistência entre várias rugosidades, qualitativamente diferentes, em uma mesma área de análise; o que contribui para um aumento da complexidade na quantificação da rugosidade.

Apêndice B

Exemplo de um arquivo de entrada do programa simulador

MEDICI

```
TITLE   Amostra c/ Interface c/ precipitado metálico

COMMENT   criando um mesh inicial

MESH   RECTANGU   DIAG.FLI
$SMOOTH.K=2
X.MESH  NODE=1      LOCATION=0.0000
X.MESH  NODE=9      LOCATION=4.00e-3  RATIO=0.80  SUMMARY
X.MESH  NODE=13     LOCATION=4.60e-3  RATIO=1.00  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
X.MESH  NODE=21     LOCATION=5.40e-3  RATIO=1.00  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
X.MESH  NODE=25     LOCATION=6.00e-3  RATIO=1.00  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
X.MESH  NODE=33     LOCATION=1.00e-2  RATIO=1.25  SUMMARY

Y.MESH  NODE=1      LOCATION=0.000
Y.MESH  NODE=11     LOCATION=0.0170  RATIO=0.80  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
Y.MESH  NODE=20     LOCATION=0.0201  RATIO=1.00  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
Y.MESH  NODE=25     LOCATION=0.0250  RATIO=1.25  SUMMARY
+ MIN.SPAC=1E-5
```

Y.MESH NODE=33 LOCATION=1.0000 RATIO=1.25 SUMMARY

BOUNDARY INFILE=prec_i.bnd ASCII.IN OUTFILE=BOUN

+ X.TOLER=.00005 Y.TOLER=.00005 SHARP ANGLE.CR=45

+ ASPECT LOW.ASP=0.005 HIGH.ASP=2000

\$SPREAD LEFT WID=0.0001 UP=10 LOW=16 THICK=0.5 VOL.RAT=0.5

COMMENT REGION & ELECTRODE

REGION NUM=1 X=0.002 Y=0.05 SILICON

REGION NUM=2 X=0.00 Y=0.001 OXIDE

REGION NUM=3 X=0.005 Y=0.02 INSULATO

ELECTR NUM=1 X.MIN=0.0 X.MAX=0.01 Y.MIN=0.0 Y.MAX=0.0

ELECTR NUM=2 X.MIN=0.0 X.MAX=0.01 Y.MIN=1.0 Y.MAX=1.

COMMENT Especificação do perfil de dopagem

PROFILE P-TYPE REGION=1 N.PEAK=1E15 UNIFORM

PLOT.2D GRID X.MIN=0. X.MAX=0.01 Y.MIN=0.0

+ Y.MAX=1.

+ TITLE="GRID" FILL

+ DEVICE=POSTSCRIPT PLOT.OUT=PREC_i.PS

COMMENT PLOT.2D GRID TITLE="Exemple 3 - Simulation - Mesh" SCALE FILL

COMMENT Conecta um resistência parasitária no contato P+

MATERIAL REGION=3 PERMITTI=900 EG300=0.05

```
CONTACTALL NEUTRAL
COMMENT CONTACT ALL ALUMINUM
INTERFACE QF=1E10 X.MIN=0.0 X.MAX=0.01 Y.MIN=0.015
+ Y.MAX=0.021
```

```
COMMENT Especificação do modelo físico utilizado
MODELS SRH AUGER CONMOB BGN FLDMOB SRFMOB2
+ BOLTZMAN TEMPERAT=350 FN.CUR
```

```
COMMENT Fatorização simbólica
SYMB NEWTON CARRIERS=2
```

```
COMMENT Parametros para estabelecer a convergencia...
METHOD ITLIMIT=40 EXTRAPOL
```

```
COMMENT Realiza uma simulação a zero volts, em estado de equilíbrio, para
+ utilizar a solução como ponto de início para simulação fora do
+ equilíbrio.
$LOG OUT.FILE=PREC_i.IV
```

```
$SOLVE INITIAL
$SOLVE V1=0.5 V2=0 OUTF=SOL_R_A
$SOLVE PROJ V1=1. V2=0 ELECTRODE=1 VSTEP=1
+ NSTEP=3 OUTF=SOL_R_B
```

```
$SOLVE V1=-24 OUTF=PREC_i24 FN.CUR
$SOLVE V1=-24 ELEC=1 VSTEP=0.5 NSTEP=96 FN.CUR
+ AC.ANAL FREQ=1E6 TERM=1
LOAD INFILE=PREC_i24
```

COMMENT LOAD INFILE=SOL_2_3 IN2FILE=SOL_2_4

PLOT.1D IN.FILE=PREC_i.IV Y.LOG X.AXIS=V1 Y.AXIS=FE(1)
+ LINE=2 SYMBOL=2 COLOR=2
+ TITLE="FE1-V1" OUT.FILE=i_v/pos_i.fe1
\$X.OFFSET=3 X.LENGTH=10 Y.OFFSET=3 Y.LENGTH=10

PLOT.1D IN.FILE=PREC_i.IV Y.LOG X.AXIS=V2 Y.AXIS=FE(2)
+ LINE=2 SYMBOL=2 COLOR=2
+ TITLE="FE2-V1" OUT.FILE=i_v/pos_i.fe2
\$+ X.OFFSET=3 X.LENGTH=10 Y.OFFSET=3 Y.LENGTH=10

\$PLOT.1D IN.FILE=PREC_i.IV Y.LOG X.AXIS=V1 Y.AXIS=C(1,1)
+ LINE=2 SYMBOL=2 COLOR=2
+ TITLE="C(1,1)-V1" OUT.FILE=i_v/pos_i.c11
\$+ X.OFFSET=3 X.LENGTH=10 Y.OFFSET=3 Y.LENGTH=10

PLOT.2D X.MIN=0.0 X.MAX=0.01 Y.MIN=0.015 Y.MAX=.025
+ TITLE="Distribuicao Espacial do Vetor Campo Eletrico" FILL
VECTOR E.FIELD

PLOT.2D X.MIN=0.00 X.MAX=0.01 Y.MIN=0.010 Y.MAX=.025
+ TITLE="Densidade de Eletrons " FILL
CONTOUR ELECTRON
\$VECTORE.FIELD

COMMENT GRAFICOS E SAIDAS

\$\$\$\$ PLOT 1D

```
$PLOT.1D E.FIELD      X.START=0.049      X.END=0.049  Y.START=0.0
+ Y.END=.040
+ UNCHANGE  LABELS      SYMBOL=3
+ COLOR=3
$TOP=35E6
```

```
$$$$ INTENSIDADE DO CAMPO ELETRICO
```

```
PLOT.3D ELECTRON  X.MIN=0.0    X.MAX=0.01    Y.MIN=0.01    Y.MAX=.025
+ X.LINES=40    Y.LINES=40    Z.MIN=0
+ TITLE="Densidade de Eletrons"
```

```
3D.SURFACE  VISIBLE      C.AUTO
```

```
PLOT.3D E.FIELD      X.MIN=0.004  X.MAX=0.006  Y.MIN=0.015  Y.MAX=.025
+ X.LINES=40    Y.LINES=40    Z.MIN=0
+ TITLE="INTENSIDADE DO CAMPO ELETRICO"
```

```
$Z.MAX=40E6
```

```
3D.SURFACE  VISIBLE      C.AUTO
```

```
$$$$ POTENCIAL
```

```
PLOT.3D POTENTIA  X.MIN=0.0    X.MAX=0.01    Y.MIN=0.000
+ Y.MAX=.025    X.LINES=20    Y.LINES=20
+ TITLE="DIFERENCA DE POTENCIAL"
```

```
PLOT.3D POTENTIA  X.MIN=0.004  X.MAX=0.006  Y.MIN=0.015
+ Y.MAX=.025    X.LINES=20    Y.LINES=20
+ TITLE="DIFERENCA DE POTENCIAL"
```

```
PRINT  E.FIELD      X.MIN=0.0    X.MAX=0.01    Y.MIN=0.0
+ Y.MAX=.025
```