

Б.П. Коман

## Особливості спектрів термостимульованої деполяризації рентгеноопромінених структур Si-SiO<sub>2</sub>

*Львівський національний університет імені Івана Франка, факультет електроніки,  
79005, вул. Драгоманова 50 Львів; bogdan\_28@mail.ru*

Досліджено закономірності спектрів термостимульованої деполяризації (ТСД) вихідних та рентгеноопромінених структур Si - SiO<sub>2</sub>. Експериментальні криві  $j(T)$  демонструють два характерних максимуми в області 360 (НТ-) та 450 К (ВТ- максимум).

На основі розв'язків інтегрального рівняння Фредгольма I-го роду, що описує експериментальні спектри ТСД, розраховано енергетичний спектр густини станів дефектів, які формують електретний стан в області характерних максимумів  $j(T)$ . Оцінено енергії активації та частотні фактори відповідних дефектів.

Інтерпретацію результатів виконано з використанням моделі класичних іонних пасток на міжфазній границі Si - SiO<sub>2</sub> та враховуючи механізми об'ємного транспорту іонів (H<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>) в структурній сітці SiO<sub>2</sub>.

**Ключові слова:** термостимульована деполяризація, густина станів, спектр, пастки, іони, опромінення.

*Стаття поступила до редакції 24.10.2011; прийнята до друку 15.06.2012.*

### Вступ

Методика термостимульованої деполяризації (ТСД) зарекомендувала себе як ефективний спосіб дослідження енергетичного спектру дефектів діелектричних та високоомних напівпровідникових матеріалів [1 - 5], а також поведінки мобільних іонів. Однак дослідження структур Si - SiO<sub>2</sub> цією методикою є достатньо обмежені. Частково це обумовлено складністю інтерпретації експериментальних спектрів, оскільки в процесах переполіризації приймає участь низка складних дефектів: від двомірних до нульмірних різної електричної активності.

Незважаючи на широке практичне використання в мікроелектронних пристроях та багатопланові дослідження цих структур, природа додатного вбудованого заряду в під- затворному діелектрику SiO<sub>2</sub> МДН-приладів та механізм формування міжфазних електронних станів на границі Si-SiO<sub>2</sub> залишаються не встановленими. Однак, показано, що радіаційне опромінення приводить до зміни зарядового стану дефектів в об'ємі SiO<sub>2</sub> та на міжфазній межі Si - SiO<sub>2</sub> [6, 7, 8]. Це, зокрема, дозволяє використовувати такі впливи для планомірного керування параметрами МДН-транзисторів, наприклад, порогової напруги [9, 10].

Крім того, факт локалізації мобільних іонів Na<sup>+</sup> в шарі SiO<sub>2</sub> біля поверхні Si, що приймають участь в об'ємно-зарядовій поляризації підзатворного діелектрика польових приладів, дозволяє

прогнозувати створення радіаційно-стійких еліонних приладів.

Метою даної роботи було дослідження закономірностей спектрів термостимульованої деполяризації рентгеноопромінених структур Si - SiO<sub>2</sub> та встановлення на їх основі енергетичного спектру дефектів, що приймають участь у поляризаційних процесах.

### I. Об'єкти та методика досліджень

В роботі досліджувалися структури ( $p$  - Si) - SiO<sub>2</sub>, сформовані промисловою технологією шляхом комбінованого окислення пластин  $p$  - Si в сухому і вологому кисні при температурі 1150° С. Товщина шару SiO<sub>2</sub> складала 0,26 мкм. Зразки для вимірювань, площею 1 см<sup>2</sup> отримували шляхом скрайбування окисленої пластини.

ТСД дослідження проводилися за стандартною методикою [3, 4] і включали наступне. Поляризацію структур виконували в електричному полі між двома плоскими електродами конденсаторної комірки, розміщеної у вакуумному кріостаті, при температурах ~ 360 і ~ 450 К, відповідно.

Величина поля поляризації складала 2·10<sup>4</sup> В/см. "Фіксування" електретного стану здійснювалося шляхом різкого охолодження поляризованої структури до кімнатної температури за допомогою продування парів рідкого азоту крізь канали нагрівача комірки. після охолодження структуру

нагрівали в лінійному режимі зміни температури зі швидкістю  $0,06 \pm 0,1$  К/с з синхронним записом струму деполяризації. Для вимірювань струмів ТСД використовувався електрометр типу В7-30 з автоматичним їх записом на ПК через АЦП. Діапазон температур при розгортанні спектру  $j(T)$  складав 293 – 500 К.

В ролі джерела рентгенівського випромінювання використано апарат РУП-120 з W-трубкою ( $I = 2$  мА,  $U = 100$  кВ).

## II. Результати експериментів та їх обговорення

На рис. 1 представлено типові спектри ТСД в інтервалі температур 293 – 480 К вихідної та опроміненої структур Si - SiO<sub>2</sub>, отриманих за описаною вище методикою. Як видно, спектри досліджуваних структур володіють двома характерними максимумами: умовно-низькотемпературним (НТ) в області ~ 360 К та високотемпературним (ВТ) ~ 450 К. Дія рентгенівського випромінювання не змінює загального вигляду експериментальних залежностей  $j(T)$ , але зменшує електретний заряд, нагромаджений в процесі поляризації. Характерною рисою є зростання величини НТ-максимуму з часом опромінення та синхронне зменшення ВТ-максимуму з одночасним його зсувом в область вищих температур. Певних трансформацій НТ- максимум зазнає після великих часів опромінення структур (180 – 240 хв.) з одночасним зміщенням відносно положення цього екстремуму у вихідному зразку. Загалом, рентгенівське опромінення структур Si - SiO<sub>2</sub> супроводжується трансформацією НТ-максимуму з вузькоенергетичного в більш “розмитий”.

Таким чином, згідно приведених результатів,

струм деполяризації досліджуваних структур Si - SiO<sub>2</sub> в інтервалі температур 293 – 480 К формується двома типами носіїв: низько енергетичними, звільненими тепловим збудженням з низько енергетичних пасток (НТ-максимум,  $E_1 \pm \Delta$ ) та умовно високоенергетичними, звільненими з високоенергетичних пасток (ВТ-максимум,  $E_2 \pm \Delta$ ).

З метою встановлення взаємозв'язку між носіями, що відповідають за формування електретного заряду в області НТ- та ВТ-максимумів експериментальних  $j(T)$ , в роботі проведено експерименти по переполяризації структур Si-SiO<sub>2</sub> в області характерних температурних максимумів: ~360 та ~ 450 К. Досліджувані структури попередньо опромінювали рентгенівським випромінюванням при  $T = 293$  К, а потім проводили 2 - 3 цикли поляризація-деполяризація (2, 3 цикли) в області ВТ-максимуму ( $T = 450$  К). Як видно з рисунку, отриманий спектр ТСД зазнає суттєвих змін, в порівнянні з вихідним. Зокрема, значно зростає величина НТ-максимуму з одночасним повним зникненням в досліджуваному інтервалі температур ВТ-максимуму. Крім того, положення НТ-максимуму зміщується в область нижчих температур на  $\Delta T = 20$  К відносно аналогічного максимуму вихідної структури. Описані закономірності виконуються також для інших структур цього типу з часом попереднього рентгенівського опромінення до 180 хв.

Суттєво відмінними є спектри  $j(T)$  структур, попередньо переполяризованих в області НТ максимуму (рис. 2,б). Зокрема, після двократної переполяризації зростає НТ-максимум з одночасним зменшенням величини ВТ-екстремуму. Виконані три цикли “поляризація-деполяризація” приводять до кардинально відмінного результату, а саме до суттєвого зменшення НТ-максимуму та зростання

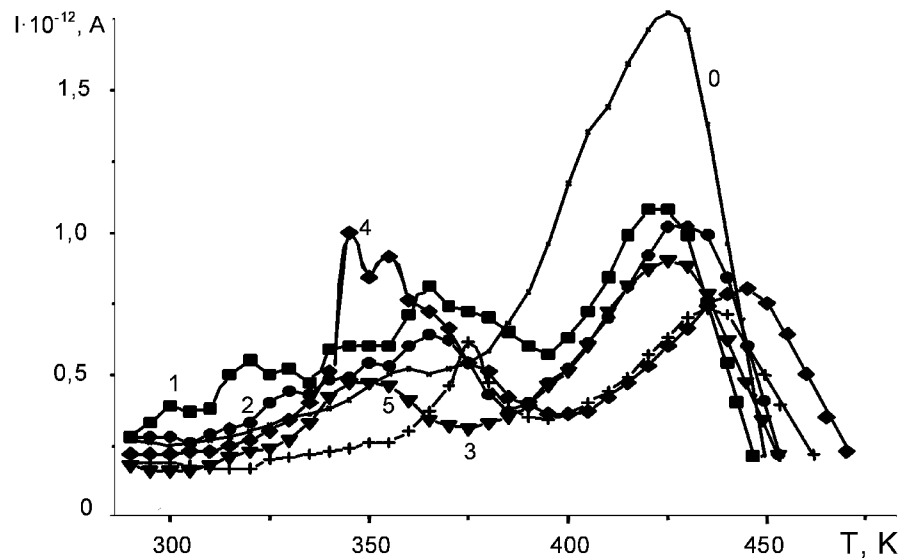
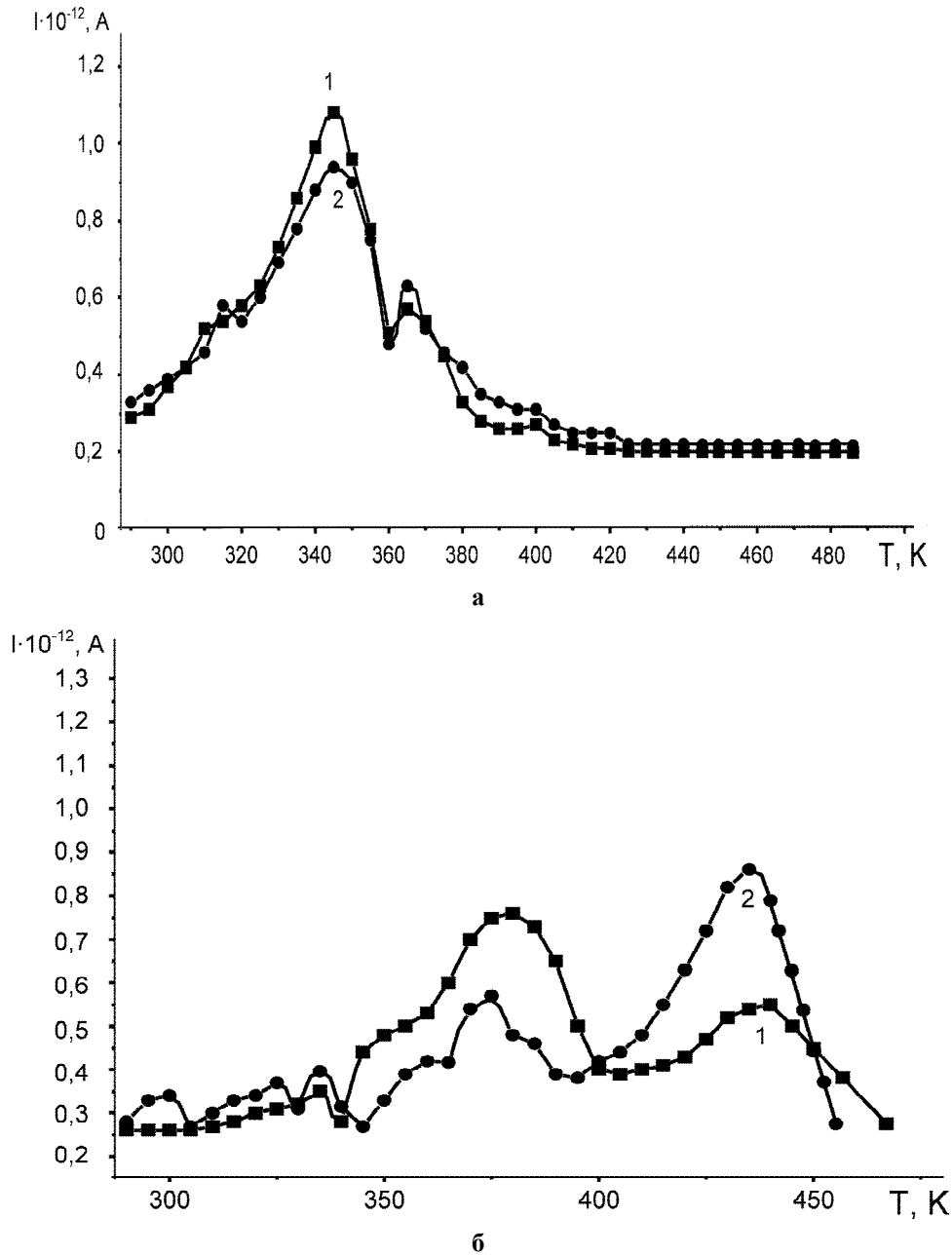


Рис. 1. ТСД-спектри вихідної (0) структури Si-SiO<sub>2</sub> та опроміненої рентгенівськими квантами за різних часових експозицій: 1 – 20 хв; 2 – 40; 3 – 120; 4 – 180; 5 – 240.



**Рис. 2.** ТСД-спектри структури Si-SiO<sub>2</sub> після двох (1) та трьох (2) циклів “поляризація-деполяризація” за відмінних температур поляризації: **а** -  $T_{\text{пол}} = 450$  К; **б** - 360 К (час попереднього рентгенівського опромінення – 20 хв).

ВТ-максимуму на експериментальних залежностях  $j(T)$ . Однак ВТ-максимум не зникає. Слід відмітити, що описані зміни в спектрах ТСД не виявлені при переполізації структур Si - SiO<sub>2</sub> в області кімнатних температур, а також без попередньої радіаційної обробки. Окрім того, збільшення кількості етапів “поляризація-переполізація” більше трьох циклів не змінює загального вигляду спектру  $j(T)$  в дослідженому інтервалі температур.

Приведені результати свідчать про мобільний характер носіїв, здатних мігрувати в аморфній сітці SiO<sub>2</sub> та заповнювати (вивільняти) низько- та високоенергетичні пастки. Врахування ролі міжфазної межі Si - SiO<sub>2</sub> у поляризаційних процесах приводить до висновку про можливість “електричної” перебудови її рельєфу у циклах

“поляризація-деполяризація” за рахунок трансформації структури воднево-вмісних та дефектно-домішкових комплексів [12, 13], а також заряду додатніх локалізованих іонів в шарі SiO<sub>2</sub> біля межі Si-SiO<sub>2</sub> [14].

Для планомірного керування параметрами приладних структур на основі Si-SiO<sub>2</sub> необхідно знати природу пасток для носіїв струму та їхні параметри. Деякі кількісні значення, зокрема густину станів та їхній енергетичний розподіл можна отримати з аналізу експериментальних спектрів струмів ТСД [3].

Згідно феноменологічної теорії струмів ТСД в неупорядкованих діелектриках з квазінеперервним енергетичним спектром електроактивних дефектів густина термостимульованого струму може бути

описана інтегральним рівнянням Фредгольма першого роду [3]. В межах двовимірної задачі це рівняння має вигляд:

$$j(T) = \iint g(E, \omega) \xi(E, \omega, T) dE d\omega,$$

а в одновимірному випадку:

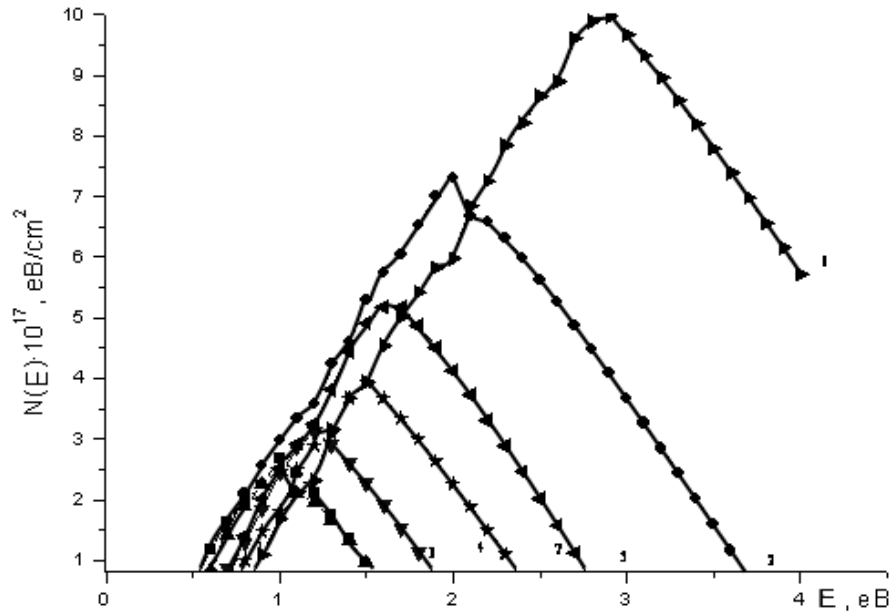
$$j(T) = \int g(E) \xi(E, T) dE,$$

де  $\xi$  – ядро інтегрального рівняння (2), що визначається виразом:

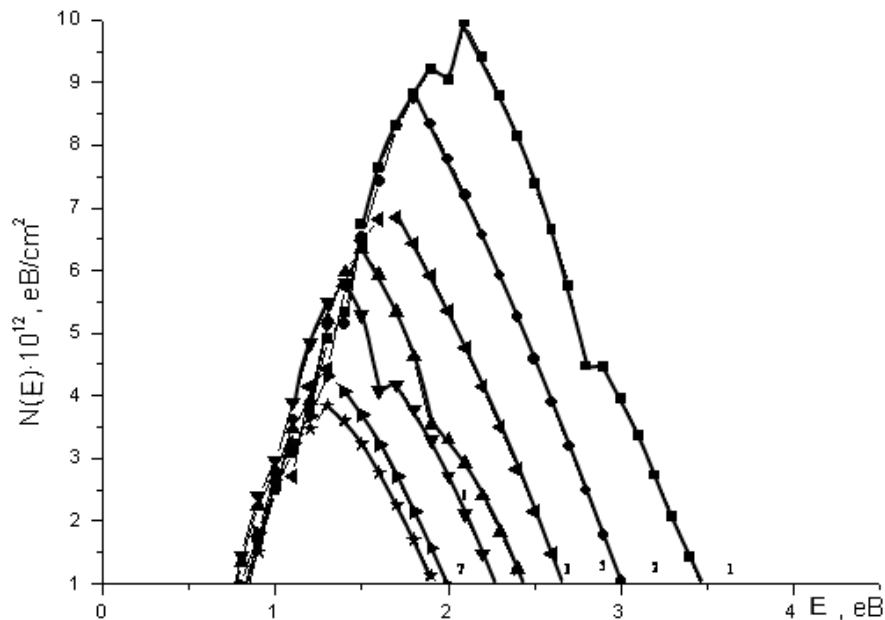
$$\xi(E, \omega, T) = \omega \exp \left[ -\frac{E}{kT} - \int_{t_0}^T \frac{\omega}{\beta} \exp \left( -\frac{E}{kT} \right) dT \right],$$

а  $g(E)$  – густина енергетичних станів,  $E$  – енергія активації,  $\omega$  – частотний фактор.

Загальна властивість рівнянь даного класу –



а



б

**Рис. 3.** Енергетичний спектр густини станів в структурі Si - SiO<sub>2</sub> після рентгенівського опромінення: **а** - (низькотемпературний максимум): 1-енергія активації  $W = 0,52$  eV, частотний фактор  $\omega = 2,37$  Гц; 2 -  $W = 1,19$  eV,  $\omega = 13,1 \cdot 10^3$  Гц; 3 -  $W = 0,63$  eV,  $\omega = 7$  Гц; 4 -  $W = 0,34$  eV,  $\omega = 0,1$  Гц; 5 -  $W = 1,02$  eV,  $\omega = 4,1 \cdot 10^3$  Гц; 6 -  $W = 2,06$  eV,  $\omega = 5,6 \cdot 10^8$  Гц; 6 -  $W = 1,30$  eV,  $\omega = 53,1 \cdot 10^3$  Гц.; **б** - (високотемпературний максимум): 1-енергія активації  $W = 1,29$  eV, частотний фактор  $\omega = 7,5$  кГц; 2-  $W = 1,22$  eV,  $\omega = 3,3$  кГц; 3 -  $W = 1,02$  eV,  $\omega = 250$  Гц; 4 -  $W = 0,98$  eV,  $\omega = 170$  Гц; 5 -  $W = 0,73$  eV,  $\omega = 6,85$  Гц; 6 -  $W = 0,88$  eV,  $\omega = 32,03$  Гц; 6 -  $W = 0,92$  eV,  $\omega = 68,63$  Гц.

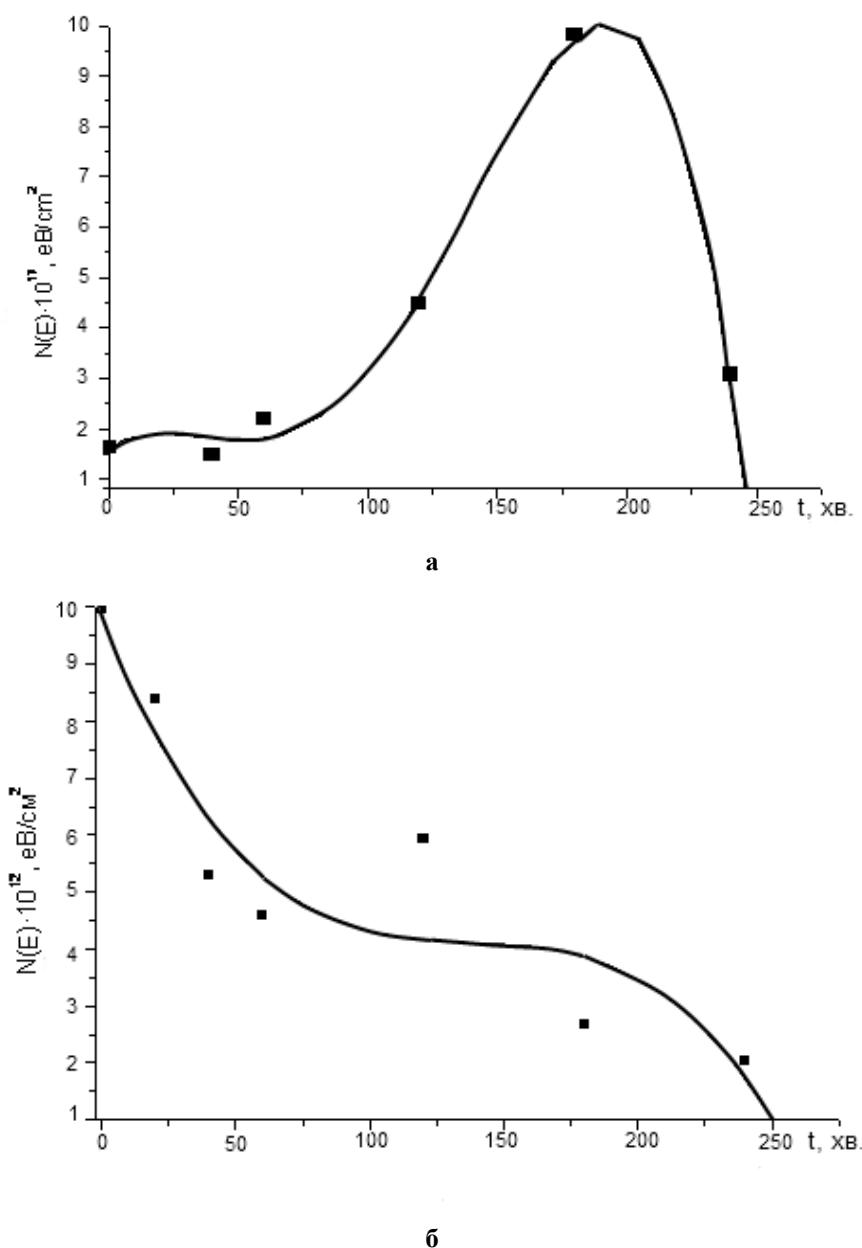
некоректність по Адамару (незначним відхиленням вимірювальної функції  $j(T)$ ) можуть відповідати великі відхилення функцій  $g(E, \omega)$  або  $g(E)$ ; або для даної залежності  $j(T)$  розв'язок може взагалі не існувати. Нами встановлено, що для отримання експериментальних залежностей  $j(T)$  застосування методу регуляризації Тихонова дає достатню збіжність та дозволяє контролювати розкид похибки [15].

Для програмних розрахунків обрана система візуального об'єктно-орієнтованого програмування C++ Builder 5. Це дозволило розробити гнучкий та швидкий алгоритм з динамічним розподілом пам'яті, що необхідно при реалізації ітераційних методів.

Розраховані за даною методикою енергетичні

спектри густини станів, що відповідають експериментальним максимумам  $j(T)$  ТСД досліджених структур Si-SiO<sub>2</sub>, приведено на рис. 3, а, б. Як бачимо, дія рентгенівського опромінення змінює максимальне значення густини станів  $N_{\max}$  в області обидвох максимумів, а також здійснює їх енергетичний перерозподіл. Вплив опромінення супроводжується також значною зміною частотних факторів центрів (пасток), відповідальних за спостережувані зміни, що свідчить про їх суттєві структурні зміни.

Кінетика  $N_{\max}$  в процесі опромінення для обидвох типів максимумів  $j(T)$  приведена на рис. 4, а, б. Як бачимо, радіаційна обробка приводить до суттєво відмінної поведінки  $N_{\max}$  з часом опромінення, що



**Рис. 4.** Залежність максимального значення густини станів від часу рентгенівського опромінення: **а**- низькотемпературний максимум (360К); **б**- високотемпературний максимум (450 К). Точки на графіках – експериментальні значення, лінії – апроксимовані залежності.

пояснюється різною природою радіаційно-індукованих процесів в НТ- і ВТ-пастках. Зокрема, в області НТ-максимуму  $N_{\max}$  майже не змінюється на першій стадії опромінення (до 75 хв), а потім плавно наростає до максимального значення за час опромінення 100 хв (друга стадія). В цілому опромінення до часів (240 хв) супроводжується зменшенням  $N_{\max}$  аж до значень, що відповідають вихідній структурі. Даний факт свідчить про структурне заліковування індукованих радіаційних дефектів або їх нейтралізацію.

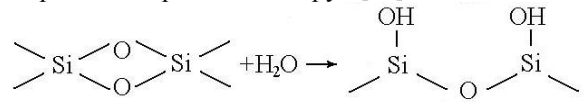
Тристадійна залежність  $N_{\max}$  від часу опромінення спостерігається і для ВТ-максимуму  $j(T)$  (рис. 4,б). Однак характер такої залежності суттєво відмінний від описаної для НТ максимуму. Зокрема, протягом усього часу опромінення спостерігається монотонне зменшення величини  $N_{\max}$ . Причому, на першій стадії (~ 100 хв) відбувається різке зменшення  $N_{\max}$ . Друга стадія характеризується незмінністю  $N_{\max}$  з часом опромінення тривалістю ~ 100 хв. Для третьої стадії характерним є подальше монотонне зменшення  $N_{\max}$  з часом опромінення. Отримані залежності свідчать про “накопичувальний” характер рентгеноіндукованих змін внаслідок складних механізмів трансформації дефектів та дії взаємновиключаючих чинників. Такими, зокрема, є генерація та відпал рентгеноіндукованих дефектів, їх заліковування та перебудова до термодинамічно рівноважних, нейтралізація електрично-активних дефектів на межі Si - SiO<sub>2</sub> носіями протилежного знаку з утворенням нейтральних асоціатів.

При обговоренні природи термоактиваційних процесів в літературі акцентується увага головним чином на двох факторах: участь водню та іонів лужних металів (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>). Експериментальні дані [12, 16] свідчать про багатопланову участь водню у формуванні властивостей Si та SiO<sub>2</sub>. Однак, якщо для монокристалічного Si ситуація вважається в достатніх межах зрозумілою [16], то участь водню у явищах переносу в SiO<sub>2</sub>, а також у формуванні електронних станів межі Si - SiO<sub>2</sub> є далека від розуміння.

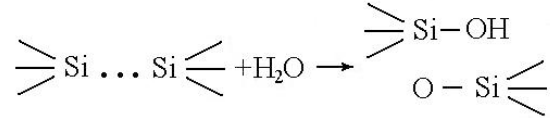
Існуючі на сьогодні багатоманітність та різнобій у “водневих” моделях відображає не стільки наукові погляди (моделі), як насамперед багатоманітність можливого входження H в аморфну сітку SiO<sub>2</sub> та вплив технологічних факторів – а, отже, і проблематичність керування властивостями SiO<sub>2</sub> [2, 4, 17]. Низьке значення енергії активації водню (~ 0,1 eВ) затрудняє проведення однозначних експериментів по ідентифікації механізмів протонного переносу в Si - SiO<sub>2</sub>.

Багаточисельні експериментальні результати однозначно стверджують про присутність в об’ємі та на поверхні шарів SiO<sub>2</sub> значної кількості протонвмісних угруповань [16-18]. Доведено, що молекули H<sub>2</sub>O, які дифундують крізь шар SiO<sub>2</sub> в процесі окислення, взаємодіють з сіткою кремній-кисневих тетраедрів. На поверхні SiO<sub>2</sub> реальними є реакції гідратації, що супроводжуються розривом перенапружених силаноксонових зв’язків і

утворенням гідроксильних груп [21]:



При взаємодії молекул H<sub>2</sub>O з кисневими вакансіями в оксидній плівці можливе утворення гідроксильних та гідридних груп:



Гідридні групи приводять до значного спотворення структури SiO<sub>2</sub> внаслідок зміни кутів і довжин зв’язків в кремній-кисневих тетраедах.

Електрофізичні дослідження свідчать про важливу роль цих угруповань в захопленні зарядів, що переносяться крізь МДН-структуру. Крім того, додатній вбудований заряд суттєво відрізняється в шарах SiO<sub>2</sub>, отриманих “мокрим” і “сухим” окисленням кремнію. В цілому, протонні процеси впливають на весь комплекс електрофізичних властивостей [12, 19, 20]. Інтенсивно вивчається роль протонів у формуванні додатнього рухомого заряду в окислі, що відповідає за нестабільність характеристик МДН структур [21].

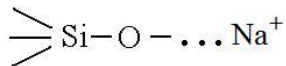
Дискусійним залишається питання і про джерело протонів в МДН-структурах. В ролі таких об’єктів довгий час вважали комплекси Si - OH та Si - H, концентрація яких може досягати ~ 10<sup>20</sup> см<sup>-3</sup> [16]. Однак, експериментальні результати свідчать, що найбільшою протонною активністю володіють координатно-зв’язані молекули води (H<sub>2</sub>O)<sub>к</sub> [12]. В МДН-структурах вони дисоціюватимуть на межах Si-SiO<sub>2</sub> та SiO<sub>2</sub>-метал. При прикладанні електричного поля генерація H<sup>+</sup> проходитиме по електропольовому механізму [20]. В цілому окисні плівки сильно насичені молекулярною водою, гідроксильними та гідридними групами, які різноманітними способами входять до їх складу. Крім того, наявні молекули води пов’язані з гідратованими поверхнями α - Si водневими зв’язками [22]. Як показують Оже-дослідження, внаслідок поверхневої активності при наявності адсорбентів відбувається зміна хімічного складу аж до утворення складних комплексів.

З позицій такої “водневої” ситуації наявність в Si - SiO<sub>2</sub> протонного дрейфового заряду приводить під дією електричного поля до заповнення пасток (наприклад, зв’язаних з НТ- максимумом) з наступним їх опустошенням під дією зовнішніх факторів (теплого збудження, електричного поля, опромінення та ін.). Причому локалізація іонів H<sup>+</sup> на зв’язках може приводити до їх напруження та зміни просторової координації аж до утворення несиметричних диполів. Останні приймають участь у поляризаційних процесах.

Важливу групу дефектів, що суттєво впливають на функціонування МДН-приладів складають додатні іони лужних металів Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Li<sup>+</sup>, які при експлуатаційних режимах приладів стають мобільними [4, 23]. Зокрема, концентрація іонів Na<sup>+</sup> в

шарах  $\text{SiO}_2$ , отриманих термічним окисленням досягає величини  $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Тому рухомий заряд саме цих іонів в структурах  $\text{Si} - \text{SiO}_2$  є причиною нестабільності електрофізичних параметрів польових приладів [21].

Частина іонів  $\text{Na}^+$  утворює іонні сполуки з немістковим киснем:



і є нерухомими. Причому співвідношення концентрації нерухомих іонів до концентрації рухомих складає  $\sim 10^3$  [16]. Зі зростанням іонного радіуса рухливість іонів зменшується згідно ряду:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Cs}^+$  і т.д. Всі лужні метали є джерелом додатнього заряду в окислі. Розподіл іонів  $\text{Na}^+$  по товщині плівки  $\text{SiO}_2$  в МДН-структурі має U-подібний характер. Максимальна концентрація іонів  $\text{Na}^+$  спостерігається на межах метал-кремній і кремній-оксид.

На відміну від об'єму  $\text{SiO}_2$ , де  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  створюють високий відносно дна зони провідності кремнію донорний рівень [9], локалізовані біля межі розділу іони модифікують спектр ПС в інтервалі енергій, який відповідає забороненій зоні кремнію.

Отож, сучасну інтерпретацію викладених експериментальних результатів струмів ТСД в структурах  $\text{Si} - \text{SiO}_2$  можна виконати, ґрунтуючись на механізмах об'ємного транспорту іонів крізь діелектричний шар та на основі представлень про існування на межі поділу кремній-двоокис кремнію "класичних" іонних пасток, для яких захоплення іонів не змінює електронну підсистему напівпровідника.

Крім того, в таких процесах слід враховувати ефекти нейтралізації іонів та іонних пасток на міжфазній межі  $\text{Si} - \text{SiO}_2$ , що характерні для таких структур [24]. Особливістю таких пасток є наявність в них далекодіючого кулонівського і (або) дипольного потенціалів, що приводить до польової залежності темпу емісії захоплених на них частинок  $\sim \exp(\alpha \epsilon \gamma / kT)$ , де  $\epsilon$  - зовнішнє поле,  $1/2 < \gamma < 2/3$ . В [25] показано, що ефективними пастками для додатніх мобільних іонів можуть бути неоднорідності межі розділу типу дипольних (заряджених) "плям".

Наявність іонів біля межі поділу суттєво модифікує спектр ПС. Зокрема, як встановлено в [25], крім збільшення густини станів, на хвості спектру за рахунок флуктуаційного потенціалу реалізується пік, локалізований в області енергій  $\approx 260$  меВ. При цьому число станів в ньому  $N_s \approx 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ , що приблизно рівне кількості нейтральних частинок  $N_0$ .

Тому, імовірно вважати, що мобільні іони лужних металів та водню, локалізовані на межі поділу в процесі радіаційного опромінення, а також зміщені в поляризаційних процесах, будуть частково нейтралізуватися через захоплення електронів з напівпровідникової підкладки засобом їх тунелювання. Кількість таких пасток та степінь їх

нейтралізації і буде визначати величину  $N_{\text{max}}$  в області ВТ-максимуму. Причому, велика ширина експериментального спектру, пов'язаного з ВТ-максимумом, зумовлена локалізацією на межі поділу іонів лужних металів в іонізованому та нейтральному станах, а також існуванням декількох типів таких іонів і водневовмісних комплексів.

Деполаризаційний процес структур  $\text{Si} - \text{SiO}_2$ , отже, лімітуватиметься процесами звільнення іонів з пасток, утворенням нейтральних асоціатів (НА), їх розпадом та локалізацією мобільних іонів на більш низькоенергетичних пастках. Причому, синхронна зміна НТ- та ВТ- максимумів струмів ТСД в процесі опромінення та переполаризації свідчить про спільну природу процесів опустошення (делокалізації) та наступної локалізації носіїв в пастках, що відповідають спостережуваним експериментальним максимумам.

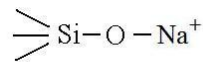
Тристадійний характер зміни  $N_{\text{max}}$  з часом опромінення для НТ- та ВТ-максимумів струмів ТСД свідчить про домінування на конкретній стадії певного механізму дефектоутворення. Зокрема, різке зменшення  $N_{\text{max}}$  з часом опромінення на першій стадії ВТ-максимуму супроводжується насамперед структурною перебудовою водневовмісних комплексів в аморфній сітці  $\text{SiO}_2$ . А саме: замість слабих зв'язків типу  $\text{SiH}$  та  $\text{SiOH}$  утворюються більш сильні  $-\text{Si} - \text{O}$ . Останнє приводить до суттєвого зменшення густини станів (стадія I) та підвищення радіаційної стійкості структури  $\text{Si} - \text{SiO}_2$  в цілому (стадія II). Остання третя стадія характеризується значним накопиченням радіаційних пошкоджень і як наслідок – координаційними змінами аморфної сітки  $\text{SiO}_2$ , перебудовою дефектно-домішкових комплексів міжфазної межі  $\text{Si} - \text{SiO}_2$  та можливою трансформацією структурного тетраедру  $\text{SiO}_4$  (з формуванням нових структурних типів, наприклад  $\text{Si} - \text{SiO}_4\text{H}_4$  [16]).

Експериментально в даній роботі встановлено, що висота НТ-максимуму струму в спектрі ТСД прямо пропорційна напрузі поляризації. Тому, згідно [26], домінуючим механізмом формування електретного стану в даному інтервалі температур є дипольний механізм. Імовірним механізмом формування таких диполів є наступний. Звільнення та подальша міграція іонів  $\text{H}^+$  в структурній сітці  $\text{SiO}_2$  супроводжується їх локалізацією на зв'язках комплексів  $\text{Si} - \text{OH}$  і  $\text{Si} - \text{O}$  та порушенням їх симетрії з утворенням диполів  $\text{Si}^+ - \text{OH}$ ,  $\text{Si}^+ - \text{O}$ . Диполі цього типу є елементами структурної сітки  $\text{SiO}_2$  і тому володіють великою жорсткістю. Тому вони не вноситимуть суттєвого вкладу у поляризаційні процеси, що підтверджується експериментально для поляризації в області НТ-максимуму струму ТСД.

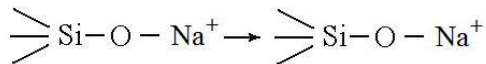
Досліди по переполаризації свідчать про те, що звільнені з пасток іони намагаються зайняти нижчі енергетичні пастки ( $\sim 0,8$  еВ) шляхом їх міграції після термодольового збудження з більш високоенергетичних пасток ( $\sim 1,0$  еВ). Наслідком цього є зростання НТ-максимуму в ТСД-спектрі з одночасним зменшенням ВТ-максимуму. Тому в області ВТ-максимуму структура  $\text{Si} - \text{SiO}_2$

характеризується об'ємно-зарядовим механізмом поляризації з участю іонів лужних металів та водню. Механізми міграції іонів водню структурній сітці SiO<sub>2</sub> детально проаналізовані в [4]. Як видно з рис. 2, а, для досліджуваних структур Si-SiO<sub>2</sub> необхідно два цикли "поляризація-реполяризація" з метою повного переведення додатніх іонів, локалізованих на межі поділу, крізь діелектрик до польового електрода на SiO<sub>2</sub>.

Міграція іонів лужних металів в область НТ-пасток, де локалізовані іони водню, приводить до утворення різноманітних водневомісних комплексів з участю кремнію, кисню та лужного металу, які володіють дипольними властивостями. Одним із варіантів дипольних утворень, які можуть приймати участь у поляризаційних процесах в області НТ-максимуму є комплекси зі зв'язаним Na у формі :

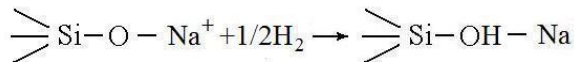


Причому таке утворення під дією опромінення є джерелом іонів Na<sup>+</sup> за реакцією:

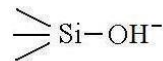


які мігрують в область НТ-пасток.

Крім того, імовірна реакція заміщення Na → H з участю молекулярного водню:



та утворенням диполя



та виділенням міжвузлового Na. Останній легко іонізується, оскільки його рівень лежить від дна зони провідності SiO<sub>2</sub> на відстані 1,7 еВ [3].

## Висновки

Експериментально досліджено закономірності

спектрів струмів ТСД вихідних та рентгеноопромінених структур Si - SiO<sub>2</sub>. Виявлено два характерних максимуми на залежностях  $j(T)$  в області 360 (НТ-максимум) та 450 К (ВТ-максимум), величини яких синхронно змінюються в процесі опромінення. Встановлено, що проведення циклів "поляризація-деполяризація", попередньо опромінених структур Si - SiO<sub>2</sub>, повністю видозмінює спектр  $j(T)$ . Причому, характер спектру ТСД визначається температурою циклу. Зокрема, ВТ-реполяризація (не більше двох циклів) приводить до ліквідації ВТ-максимуму, спостережуваного у вихідних та опромінених структурах Si - SiO<sub>2</sub>, при синхронному зростанні НТ-максимуму.

Використовуючи рівняння Фредгольма першого роду, які описують експериментальні залежності  $j(T)$ , розраховані енергетичні розподіли густин станів пасток, що формують спостережувані максимуми. Оцінено енергії активації відповідних центрів та їхні частотні фактори.

Досліджено кінетику зміни  $N_{\text{max}}$  – максимального значення густини станів в області характерних максимумів з часом опромінення. Виявлено суттєво відмінний характер поведінки  $N_{\text{max}}$  для НТ- та ВТ-максимумів. Аналізуються можливі механізми такої поведінки.

Інтерпретація експериментальних закономірностей  $j(T)$  кривих ТСД виконано на основі моделі класичних іонних пасток на міжфазній межі Si-SiO<sub>2</sub> та механізму об'ємного транспорту іонів H<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup> крізь структурну сітку діелектричного шару SiO<sub>2</sub>.

На основі експериментальних результатів та сучасних модельних представлень про головні типи структурних дефектів в об'ємі SiO<sub>2</sub> та на межі Si-SiO<sub>2</sub> зроблено висновок про домінування дипольного механізму поляризації структури Si-SiO<sub>2</sub> в області НТ-максимуму та об'ємно-зарядового в області ВТ-максимуму. Обговорюється природа диполів, що зумовлюють поляризаційний стан в межах НТ-максимуму.

- [1] V.V. Rusakov. JeT, ser. Materialy 159 (1972).
- [2] V.N. Vertoprahov, B.M. Kuchumov, V.G. Sal'man. Stroenie i svojstva struktur Si-SiO<sub>2</sub> (Nauka, Novosibirsk, 1981).
- [3] Ju.A. Gorohovatskij, G.A. Bordovskij. Termoaktivacionnaja tokovaja spektroskopija vysokoomnyh poluprovodnikov i dijelektrikov (Nauka, Moskva, 1991).
- [4] V.N. Vertoprahov, E.G. Sal'man. Termostimulirovannye toki v neorganicheskikh veshhestvah (Nauka, Novosibirsk, 1981).
- [5] V.V. Batavin, Ju.A. Koncevoj, Ju.V. Fedorovich. Izmerenie parametrov poluprovodnikovyh materialov i struktur (Radio i svjaz', Moskva, 1985).
- [6] B.J. Mrstik, R.W. Rendell. IEEE Trans. Nucl. Phys. 38(6), 1101 (1991).
- [7] E.N. Bormontov, M.N. Levin, G.I. Kadmenskij. Pis'ma v ZhTF 30(9), 73 (2004).
- [8] B.P. Koman. UFZh 32(12), 143 (2000).
- [9] B.P. Koman, L.M. Morozov. Sposib otrimannja kremnicvogo tranzistora. Patent Ukraїni №77961 vid 15.02.2007 r.
- [10] V.S. Vavilov, B.M. Gorin, N.S. Danilin. Radiacionnye metody v tverdotel'noj jelektronike (Radio i svjaz', Moskva, 1990).
- [11] B.P. Koman, O.V. Galchynskyy, R.O. Kovalyuk. NIM B 116, 389 (1996).



- [12] V.G. Litovchenko, A.P. Gorban'. Osnovy fiziki mikroelektronnyh sistem metall-dielektrik-poluprovodnik (Naukova dumka, Kiev, 1978).
- [13] D. Vuillaume. Appl. Phys. Lett. 59(24), 3118 (1991).
- [14] E.I. Gol'dman. FTP 34(8), 984 (2000).
- [15] A.N. Tihonov, V.Ja. Arsenin. Metody reshenija nekorrektnykh zadach (Nauka, Moskva, 1979).
- [16] V.S. Vavilov, V.F. Kiselev, B.N. Mukashev. Defekty v kremnii i na ego poverhnosti (Nauka, Moskva, 2010).
- [17] V.S. Pershenkov, V.D. Popov, A.V. Shal'nov. Poverhnostnye radiacionnye jeffekty v jelementah integral'nyh mikroshem (Jenergoatomizdat, Moskva, 1988).
- [18] D.L. Griscom. J. Appl. Phys. 58(7), 2524 (1988).
- [19] J.R. Swank. IEEE Trans. Nucl. Phys. 34(26), 1152 (1987).
- [20] I.P. Lisovskij, V.G. Litovchenko, G.F. Romanova i dr. UFZh 38(10), 1532 (1993).
- [21] V.M. Gontar', M.G. Sultanov. Jelektronnaja tehnik 5, 48 (1991).
- [22] V.F. Kiselev, O.G. Krylov. Adsorbcionnye processy na poverhnosti poluprovodnikov i dijelektrikov (Nauka, Moskva, 1978).
- [23] A.P. Baraban, V.V. Balavinov, P.P. Konorov. Jelektronika sloev SiO<sub>2</sub> na kremnii (LGU, Leningrad, 1988).
- [24] S.G. Dmitriev, Ju.V. Markin. FTP 32(12), 1445 (1998).
- [25] S.G. Dmitriev, Ju.V. Markin. FTP 30(7), 1231 (1996).
- [26] G. Sljeter. Jelektrety (Mir, Moskva, 1983).

B.P. Koman

## **The Peculiarities of Spectars of Thermostimulated Depolarization of X-Rayted Irradiations Structures Si - SiO<sub>2</sub>**

*Ivan Franko Lviv National University, department of electronics,  
50, Dragomanova Str., Lviv, 79005, bogdan\_28@mail.ru*

The patterns of spectars of thermostimulated depolarization (TSD) of the presource and x-rayted irradiations structures Si-SiO<sub>2</sub> has been researched. The experimental curves  $j(T)$  are demonstrating two specifical maximums in the area of 360 (LT-) and 450 K (HT-maximum)/ on the base of solution Fredholm integral equation of the 1st stage which describes experimental spectras TSD, the energetic spectra density of the states defects has been calculated, which form electretic state in the area peculiar maximums  $j(T)$ . The energy of the activation and frequency factors of the appropriate defects had been valued/

The interpretation of the results had been done with the use of the model of the classic ion's traps, on the interphase border Si-SiO<sub>2</sub> also including the mechanisms of the volumed transport of the ions (H<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>) in the structural network SiO<sub>2</sub>.