04

Влияние поверхностных ловушек на релаксацию инжектированного заряда в диэлектрических пленках

© А.А. Барыбин, А.В. Завьялов, В.И. Шаповалов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ),
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: VIShapovalov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 8 июня 2011 г.)

Аналитически решена задача релаксации заряда, инжектированного в диэлектрическую пленку, с учетом ее проводимости и захвата носителей как объемными, так и поверхностными глубокими ловушками с быстрой (практически мгновенной) зарядкой, имеющими конечные скорости разрядки. Выполнен анализ поведения заряда в однозонном и двухзонном режимах релаксации. Общие аналитические выражения дают в частных случаях ранее опубликованные результаты. Численные расчеты и анализ экспериментальных данных для пленок оксида титана, осажденных на металлические подложки, подтвердили применимость разработанной модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-03-00845-а).

1. Введение

Настоящая публикация развивает ранее разработанную теорию объемной релаксации заряда в диэлектрических пленках [1]. Сложность теории вызвана нелинейностью процесса транспорта инжектированного заряда в диэлектриках и разнообразием свойств объемных ловушек, а также возможных условий практической реализации процесса. Это объясняет многообразие физических моделей разной степени сложности, встречающихся в литературе [2–15]. Для аналитического решения задачи релаксации заряда авторы указанных работ использовали следующие упрощающие предположения: 1) пренебрежение как проводимостью диэлектрика ($\sigma = 0$), так и наличием объемных ловушек (концентрация $N_t = 0$) (модель идеального диэлектрика) [3–5,14]; 2) пренебрежние только влиянием объмных ловушек ($N_t = 0$, $\sigma \neq 0$) [10,11]; 3) пренебрежение только проводимостью диэлектрика ($\sigma = 0$, $N_t \neq 0$) [6–9,12,13,15].

Здесь и далее обознчения соответствуют принятым в [1] [1]. При дальнейшем изложении в ссылках на формулы из работы [1] их номерам будет предшествовать единица с дефисом, например (1-5) для формулы (5).

Одновременное влияние проводимости и объемных ловушек на процесс релаксации инжектированного заряда было рассмотрено отдельными авторами [2,14,15] на основе численного расчета, однако они не могли дать общую физическую картину процесса. Аналитическое решение такой задачи (при $\sigma \neq 0$ и $N_t \neq 0$) впервые было достигнуто в работе [1] для глубоких объемных ловушек с быстрым (практически мгновенным) захватом зарядов, имеющих конечное время жизни на ловушках характеризуемое частотой разрядки $\nu \neq 0$. При этом мелкие объемные ловушки были учтены обычным образом [2,12] как вклад в так называемые квазисвободные носители заряда, что понижает их дрейфовую подвижность [1].

Однако ни в одной из указанных выше работ не были рассмотрены поверхностные ловушки, учет которых представляет несомненный практический интерес. Действительно, именно в приповерхностной области имеется наибольшая концентрация дефектов, способных захватывать инжектированный заряд и отличающихся своими свойствами (концентрацией N_s и частотой разрядки ν_s) от глубоких ловушек внутри диэлектрика (для которых соответственно имели N_t и ν [1]). Основной целью настоящей работы является вывод дифференциального уравнения, описывающего релаксацию инжектированного заряда с одновременным учетом проводимости диэлектрика, объемных и поверхностных ловушек, а также аналитическое решение этого уравнения с применением его результатов для анализа экспериментальных данных.

2. Обоснование модели и вывод дифференциального уравнения

Как и в предыдущей модели [1], объектом исследования является диэлектрическая пленка (с диэлектрической проницаемостью ε, проводимостью σ и подвижностью зарядов μ) толщиной L, расположенная на металлической подложке с нулевым потенциалом ($V = 0$ при $x = L$). Ранее (в отсутствие поверхностных ловушек) считали, что по всей толщине пленки ($0 < x < L$) однородно распределены глубокие ловушки с объемной плотностью N_t. Со стороны свободной поверхности (при

[1] Отметим ошибки в [1], возникшие при наборе: 1) в строке 5 после формулы (3) для ее обоснования вместо приведенного там неравенства нужно использовать следующее: $\tau_p/\tau_e \sim (v/v_T)^2 \ll 1$; 2) в строке 3 перед формулой (10) вместо приведенного там неравенства должно быть $n_t \approx N_t$; 3) в формулах (16) и (20) верхний предел интегрирования равен t, а не единице.

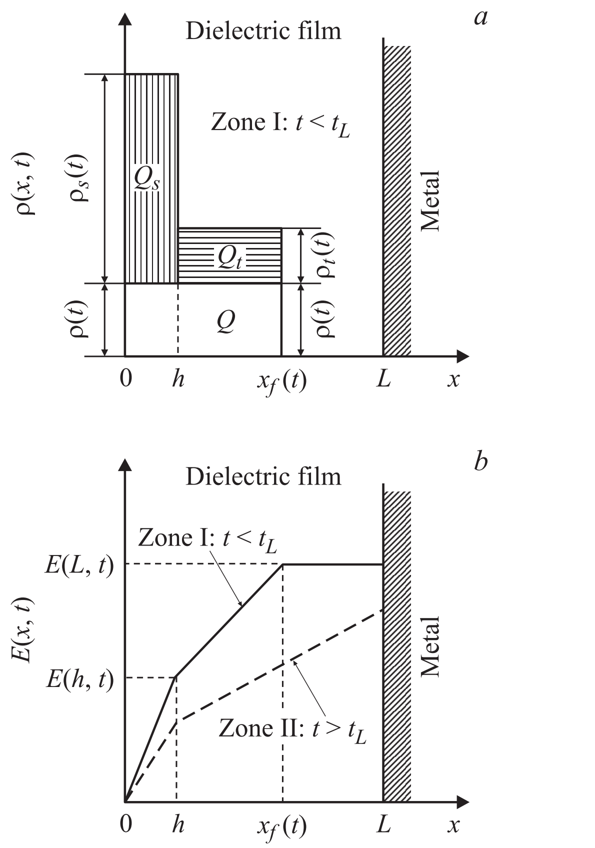

Рис. 1. Распределение зарядов для временнóй зоны I $(0 < t < t_L)$ (a) и электрического поля для зон I и II (в зоне II $t_L < t < \infty$) (b) по толщине диэлектрической пленки.

$x = 0$) в пленку инжектирован заряд Q_0 (на единицу площади), рассматриваемый как однородно распределенный в приповерхностном слое малой толщины $h \ll L$ (в пределе $h \to 0$). Именно этот слой содержит поверхностные ловушки, которые практически мгновенно захватывают заряд Q_{s0} (на единицу площади), что характеризуем параметром поверхностного захвата

$$\eta_s = \frac{Q_{s0}}{Q_0}. \tag{1}$$

Полагая ловушки однородно распределенными в слое h с плотностью N_s, записываем объемную плотность захваченного заряда при $t = 0$ в следующем виде:

$$\rho_s(x,0) \equiv qN_s = Q_{s0}\Pi_h(x) \xrightarrow[h\to 0]{} Q_{s0}\delta_+(x). \tag{2}$$

Здесь введен прямоугольный импульс единичной площади $\Pi_h(x)$, дающий в пределе $h \to 0$ асимметричную (одностороннюю) дельта-функцию $\delta_+(x)$ (С. 681 в [16]),

$$\Pi_h(x) = \begin{cases} 1/h, & 0 \le x \le h \\ 0, & x < 0 \text{ и } x > h \end{cases} \xrightarrow[h\to 0]{} \delta_+(x). \tag{3}$$

Заряд Q_0 наводит на металлическом электроде (при $x = L$) заряд противоположного знака, что создает электрическое поле, однородное по толщине пленки (при $h \to 0$),

$$E(x,0) \equiv E_0 = \frac{Q_0}{\varepsilon}. \tag{4}$$

Это поле заставляет заряд $Q(0) = Q_0 - Q_{s0} = Q_0(1 - \eta_s)$, оставшийся при $t = 0$ не захваченным ловушками (свободный заряд или квазисвободный при наличии мелких ловушек [1,2]), дрейфовать по направлению к металлическому электроду. В процессе дрейфа (при $t > 0$) часть этого заряда захватывается объемными ловушками, однородно распределенными с плотностью N_t в области $h < x < L$. Как показал анализ [1], в пренебрежении диффузионным током (справедливость этого допущения обоснована неравенством (1-3) с учетом приведенной выше сноски) фронты движения свободных зарядов и зарядов, захваченных объемными ловушками, совпадают и описываются функцией $x_f(t)$. Описанная выше картина распределения зарядов качественно показана на рис. 1, a и соответствует временнóй зоне I (при $t < t_L$, где $x_f(t_L) = L$), в которой фронт носителей заряда еще не достиг металлического электрода [1]. Заряды, захваченые ловушками, выделены на рис. 1, a штриховкой (вертикальной для поверхностного заряда Q_s и горизонтальной для объемного заряда Q_t), подвижный заряд Q изображен без штриховки.

Плотности заряда $\rho_t(t)$ и $\rho_s(t)$, захвеченного объемными и поверхностными ловушками, изменяются во времени по экспоненциальному закону в соответствии с присущими этим ловушкам частотам разрядки ν и ν_s (ср. с уравнением (1-11)):

$$\rho_t(t) = qN_t \exp(-\nu t), \quad \rho_s(t) = qN_s \exp(-\nu_s t). \tag{5}$$

Разрядка ловушек подпитывает свободные электроны, увеличивая их заряд $Q(t)$. Однако процесс диэлектрической (максвелловской) релаксации в проводящих пленках, характеризуемый постоянной времени $\tau_d = \varepsilon/\sigma$, уменьшает величину $Q(t)$ (в сумме с зарядом на объемных и поверхностных ловушках). Для обоснования этого факта рассмотрим распределение электрического поля на рис. 1, b для временнóй зоны I (при $t < t_L$). Как и ранее [1], анализируем случай разомкнутой внешней цепи в отсутствие полного тока $(J(t) = 0)$, состоящего из тока смещения $J_d = \varepsilon\partial E/\partial t$ и суммарного тока проводимости $J_c^{\text{ohm}} + J_c^{\text{inj}} = \sigma E + \mu\rho E$. Область перед движущимся фронтом зарядового пакета (при $x_f(t) < x < L$) электронейтральна ($\rho_t = 0$ и $\rho = 0$), так что $J_c^{\text{inj}} = 0$. Здесь омический ток j_c^{ohm} компенсирует ток смещения J_d, отсюда (см. уравнение (1-23))

$$E(x,t) = E_0 \exp(-t/\tau_d) \text{ при } x_f(t) \le x \le L. \tag{6}$$

Из равенства (6) с учетом (4) можно найти заряд, наведенный на металле (при $x = L$),

$$-Q_m(t) = \varepsilon E(L,t) = \varepsilon E_0 \exp(-t/\tau_d)$$
$$= Q_0 \exp(-t/\tau_d). \tag{7}$$

Такой же суммарный заряд противоположного знака распределен по толщине пленки

$$Q_s(t) + Q_t(t) + Q(t) = Q_0 \exp(-t/\tau_d). \tag{8}$$

Поскольку при $x = h$ электрическое поле $E(h, t)$ непрерывно (рис. $1, b$), из непрерывности суммарного тока проводимости $J_c^{\text{ohm}} + J_c^{\text{inj}} = (\sigma + \mu\rho)E(h, t)$ следует также непрерывность плотности свободного заряда: $\rho(h - 0, t) = \rho(h + 0, t)$. Это отображено на рис. $1, a$ в форме единого светлого прямоугольника высотой $\rho(t)$ и длиной $x_f(t)$.

В предыдущей работе [1] исследование процесса релаксации инжектированного заряда начиналось с вывода и аналитического решения нестационарного уравнения, описывающего распределние электрического поля $E(x, t)$ в различных областях диэлектрической пленки с движущимся зарядовым пакетом прямоугольной формы (см. рис. $1, a$ в работе [1]). В данном случае (при наличии поверхностных ловушек) форма пакета сохраняется (рис. $1, a$). Это позволяет упростить постановку задачи и вместо уравнения в частных производных для поля $E(x, t)$ искать обыкновенное дифференциальное уравнение для нахождения временно́го положения $x_f(t)$ фронта зарядового пакета.

На основании формулы (8) с учетом выражений (1) и (5) записываем суммарный заряд Q_Σ, состоящий из свободных (подвижных) зарядов Q и зарядов Q_t, захваченных объемными ловушками (в области $h < x < x_f(t)$),

$$Q_\Sigma \equiv Q + Q_t = Q_0 \exp(-t/\tau_d) - Q_s(t)$$
$$= [\exp(-t/\tau_d) - \eta_s \exp(-\nu_s t)]Q_0. \tag{9}$$

Дифференцированием равенства (9) по времени получаем

$$\frac{dQ_\Sigma}{dt} = -\sigma E_0 \exp(-t/\tau_d) + \nu_s \eta_s Q_0 \exp(-\nu_s t). \tag{10}$$

Найдем производную (10) другим способом, используя уравнения непрерывности:

1) в приповерхностном слое (при $0 < x < h$, рис. $1, a$)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho + \rho_s) = -\frac{\partial}{\partial x}(\sigma E + \mu\rho E); \tag{11}$$

2) в дижущемся зарядовом пакете (при $h < x < x_f(t)$, рис. $1, a$)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho + \rho_t) = -\frac{\partial}{\partial x}(\sigma E + \mu\rho E). \tag{12}$$

Из уравнения (11) с учетом равенства (5) при $0 < x < h$ получаем

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\sigma E + \mu\rho E) + \nu_s\rho_s. \tag{13}$$

В соответствии с рис. $1, a$ записываем искомую производную в следующим виде:

$$\frac{dQ_\Sigma}{dt} \equiv \frac{dQ}{dt} + \frac{dQ_t}{dt} = \frac{d}{dt}\int_0^h \rho(x, t)dx$$
$$+ \frac{d}{dx}\int_h^{x_f(t)} [\rho(x, t) + \rho_t(x, t)]dx = \int_0^h \frac{\partial\rho}{\partial t}dx$$
$$+ \int_h^{x_f(t)} \frac{\partial}{\partial t}(\rho + \rho_t)dx + \frac{dx_f}{dt}\left[\rho\bigl(x_f(t)\bigr) + \rho_t\bigl(x_f(t)\bigr)\right]. \tag{14}$$

Здесь во второй строке при дифференцировании интеграла с переменным верхним пределом использовано правило Лейбница (С. 112 в [16]).

После последнего знака равенства в (14) для первого интеграла применяем уравнение (13), а для второго интеграла — уравнение (12). В результате вычисления получаем

$$\frac{dQ_\Sigma}{dt} = -\sigma E_0 \exp(-t/\tau_d) + \nu_s\rho_s(t)h - \mu\rho\bigl(x_f(t)\bigr)$$
$$\times E_0 \exp(-t/\tau_d) + \frac{dx_f}{dt}\left[\rho\bigl(x_f(t)\bigr) + \rho_t\bigl(x_f(t)\bigr)\right]. \tag{15}$$

Здесь использованы следующие граничные условия: $E(0, t) = 0$ (см. формулу (1-5)) и $E\bigl(x_f(t), t\bigr) = E_0 \exp(t/\tau_d)$ (см. формулу (6)).

Приравниваем (10) и (15) с учетом того, что $Q_s(t) \equiv \rho_s(t)h = \eta_s Q_0 \exp(-\nu_s t)$, тогда

$$\frac{dx_f(t)}{dt} = \frac{\rho\bigl(x_f(t)\bigr)}{\rho\bigl(x_f(t)\bigr) + \rho_t\bigl(x_f(t)\bigr)}\mu E_0 \exp(-t/\tau_d). \tag{16}$$

Дробь, стоящую в правой части (16), с учетом выражения (9) и того факта, что $Q_t(t) = qN_t x_f(t)\exp(-\nu t)$, можно преобразовать к следующему виду:

$$\frac{\rho\bigl(x_f(t)\bigr)}{\rho\bigl(x_f(t)\bigr) + \rho_t\bigl(x_f(t)\bigr)} = \frac{Q(t)}{Q_\Sigma(t)} = 1 - \frac{Q_t(t)}{Q_\Sigma(t)}$$
$$= 1 - \frac{\tau_0}{\tau_t}\frac{x_f(t)}{L}\frac{\exp(-\nu t)\exp(t/\tau_d)}{1 - \eta_s \exp(-\tilde{\nu}_s t)}. \tag{17}$$

Здесь использованы ранее введенные постоянные времени [1]

$$\tau_0 = \frac{L}{\mu E_0}, \quad \tau_t = \frac{\varepsilon}{qN_t\mu}, \tag{18}$$

а также введена эффективная частота разрядки поверхностных ловушек

$$\tilde{\nu}_s = \nu_s - 1/\tau_d, \tag{19}$$

учитывающая влияние диэлектрической (максвелловской) релаксации.

Подставляя (17) в исходное уравнение (16) и вводя безразмерную длину зарядового пакета $a(t)$, такую что (ср. с формулой (1-19))

$$x_f(t) = La(t), \tag{20}$$

приходим к искомому дифференциальному уравнению для нахождения универсальной функции $a(t)$ с учетом поверхностных ловушек, имеющему следующий вид:

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{1}{\tau_0}\exp(-t/\tau_d) - \frac{1}{\tau_t}\frac{a(t)\exp(-\nu t)}{1-\eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t)}. \tag{21}$$

Нетрудно видеть, что в отсутствие поверхностных ловушек ($\eta_s = 0$) уравнение (21) принимает ранее полученную форму (1-33). Аналитическое решение уравнения (21) выполнено в Приложении.

3. Анализ поведения инжектированного заряда во времени

На основании выражений (П1) и (П8)–(П10) записываем общее решение уравнения (21) в следующем виде:

$$a(t) = \frac{1/\tau_0}{f(t)f_s(t)}\int_0^t f(t')f_s(t')\exp(-t'/\tau_d)dt', \tag{22}$$

$$f(t) = \exp\left(\frac{1-\exp(-\nu t)}{\nu\tau_t}\right), \tag{23}$$

$$f_s(t) = \exp\left(\frac{\eta_s}{\tau_t}\int_0^t \frac{\exp[-(\nu+\tilde{\nu}_s)t]}{1-\eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t)}dt\right). \tag{24}$$

Как видно из (22), поверхностные ловушки, учитываемые функцией $f_s(t)$, вносят вклад в величину $a(t)$ мультипликативно с объемными ловушками, описываемыми функцией $f(t)$. Поскольку $f_s(t) = 1$ при $\eta_s = 0$, в отсутствие поверхностных ловушек формула (22) принимает ранее полученный вид (1-20). Упрощенные выражения для $f_s(t)$ в случае малого коэффициента поверхностного захвата ($\eta_s \ll 1$) и в отсутствие разрядки объемных ловушек ($\nu = 0$) приведены в Приложении (см. формулы (П11) и (П12)).

Для численного расчета по формулам (22)–(24) удобно ввести безрамерные (нормированные на величину $\tau_0 = L/\mu E_0$) релаксационные параметры (в том числе и нормированное время $\tau = t/\tau_0$), подобно тому как сделано в работе [1] (см. формулы (1-50)),

$$\alpha_t = \frac{\tau_0}{\tau_t}, \quad \alpha_d = \frac{\tau_0}{\tau_d}, \quad \alpha_\nu = \nu\tau_0, \quad \alpha_s = \nu_s\tau_0. \tag{25}$$

Тогда выражения (22)–(24) принимают следующий вид (ср. формулы (1-53) и (1-60)):

$$a(\tau) = \frac{1}{f(\tau)f_s(\tau)}\int_0^\tau f(\tau')f_s(\tau')\exp(-\alpha_d\tau')d\tau', \tag{26}$$

$$f(\tau) = \exp\left(\frac{\alpha_t}{\alpha_\nu}\big(1-\exp(-\alpha_\nu\tau)\big)\right), \tag{27}$$

$$f_s(\tau) = \exp\left(\eta_s\alpha_t\int_0^\tau \frac{\exp[-(\alpha_\nu+\alpha_s)\tau]}{\exp(-\alpha_d\tau)-\eta_s\exp(-\alpha_s\tau)}d\tau\right). \tag{28}$$

Вычисления по формулам (26)–(28) были проведены для отдельных наиболее характерных случаев. На рис. 2, *a* и *b* показано влияние параметра поверхностного захвата ($\eta_s = Q_{S0}/Q_0$) и нормированной частоты разрядки поверхностных ловушек ($\alpha_s = \nu_s\tau_0$) на функцию $a(\tau)$. Из кривых $a(\tau)$ видно, что они принципиально не меняют своего вида при изменении параметров η_s и α_s: в обоих случаях наблюдается максимум, изначально имевший место при $\eta_s = 0$ (рис. 2, *a*) и $\alpha_s = 0$ (рис. 2, *b*).

Как известно из предыдущего анализа [1], кроме кривых с максимумом возможны также зависимости $a(\tau)$ с

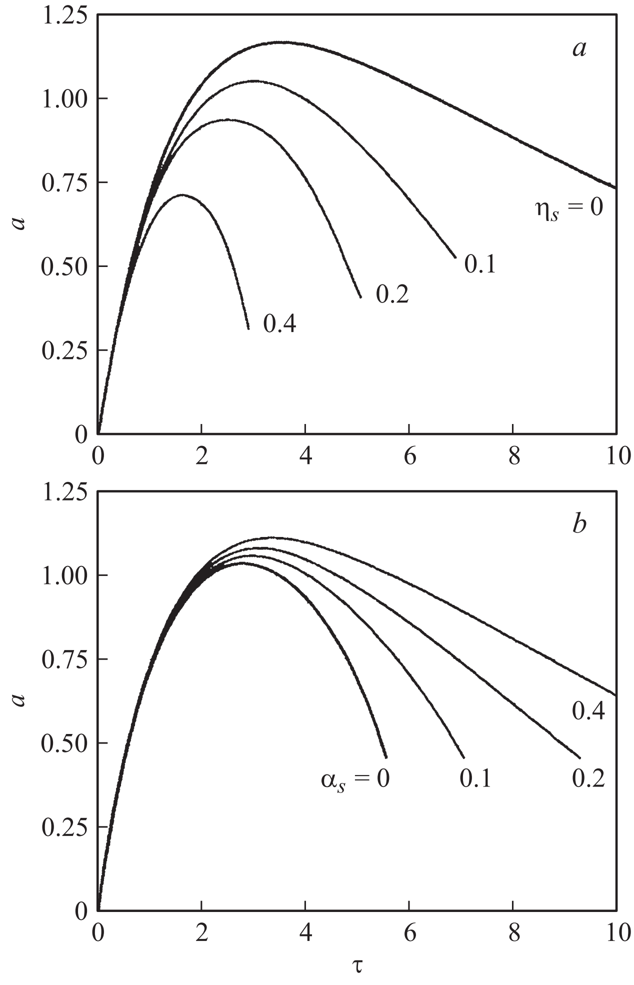

Рис. 2. Влияние параметра поверхностного захвата η_s (*a*) и нормированной частоты поверхностной разрядки α_s (*b*) на функцию $a(\tau)$, вычисленную по формулам (26)–(28) при $\alpha_d = 0.4$, $\alpha_t = 0.3$, $\alpha_\nu = 0.1$, $\alpha_s = 0.1$ (*a*) и $\alpha_d = 0.4$, $\alpha_t = 0.3$, $\alpha_\nu = 0.1$, $\eta_s = 0.1$ (*b*).

насыщением (см. кривые на рис. 2 в работе [1]). В том и другом случае (и с максимумом, и с насыщением), если кривая пересекает единичный уровень ($a = 1$), то процесс релаксации является двухзонным: a) при $a < 1$ расположена зона I (где движущийся фронт заряда еще не достиг металлического контакта при $x = L$); b) при $a > 1$ расположена зона II (в которой свободный заряд достигает металла и стекает в него). Следовательно, момент времени t_L, разделяющий зоны I и II находится из равенства $a(t_L) = 1$. Если же максимальное значение $a_{\max} < 1$, то фронт заряда никогда не достигает металлического электрода по причине исчезновения подвижного заряда вследствие максвелловской релаксации. Это означает, что процесс релаксации в целом является однозонным, т. е. протекает полностью в зоне I, а зона II при этом недостижима.

Возвращаясь к рис. 2, можно заметить, что исходные кривые, построенные соотвественно при $\eta_s = 0$ (рис. 2, a) и $a_s = 0$ (рис. 2, b), по-разному расположены на этих рисунках относительно других кривых, соответствующих $\eta_s \neq 0$ и $\alpha_s \neq 0$. Увеличение η_s на рис. 2, a приводит к опусканию максимума, а увеличение α_s на рис. 2, b — к его подъему относительно кривых $\eta_s = 0$ и $\alpha_s = 0$ соответственно. Обе эти кривые пересекают единичный уровень ($a = 1$), т. е. изначально соответствуют двухзонному режиму. По этой причине увеличение $\eta_s = Q_{s0}/Q_0$ на рис. 2, a переводит двухзонный режим ($a_{\max} > 1$) в однозонный ($a_{\max} < 1$), а увеличение $\alpha_s = \nu_s \tau_0$ на рис. 2, b сохраняет двухзонный режим (при условии выбора его при $\alpha_s = 0$ в качестве исходного, так что $a_{\max} > 1$).

Полученный результат находит объяснение в рамках разработанной модели. Действительно, с увеличением параметра поверхностного захвата η_s остается меньшим заряд $Q = Q_0 - Q_{s0} = Q_0(1 - \eta_s)$, изначально (при $t = 0$) подвижный и способный достичь металлического электрода, что снижает вероятность реализации двухзонного режима. Наоборот, увеличение скорости разрядки поверхностных ловушек α_s подпитывает подвижный заряд (при $t > 0$), увеличивая его концентрацию и повышая возможность реализации двухзонного режима.

Используем вновь полученные выражения (26)–(28) для расчета пограничных линий, разделяющих однозонный и двухзонный режимы релаксации, подобно аналогичным линиям, приведенным на рис. 3, a в работе [1]. Эти линии были построены на плоскости α_t–α_d релаксационных параметров. Удобство выбора величин $\alpha_t = \tau_0/\tau_t \equiv Q_t/Q_0$ и $\alpha_d = \tau_0/\tau_d \equiv Q_d/Q_0$ в качестве координатных осей обусловлено тем обстоятельством, что $Q_t = qN_tL$ представляет собой максимальный заряд, который может быть захвачен объемными ловушками, а $Q_d = qn_0L$ — максимальный заряд подвижных носителей, который может быть удален из образца в металлический контакт с помощью тока проводимости, обеспечивающего максвелловскую релаксацию.

Отсюда понятно, что при $Q_0 \gg Q_d$ и $Q_0 \gg Q_t$ инжектированный заряд в процессе дрейфа в условиях максвелловской релаксации и захвата на ловушки полностью не исчезает и достигает металлического электрода (двухзонный режим). При $Q_d \leq Q_0$ или $Q_t \leq Q_0$ весь заряд Q_0 будет полностью израсходован на максвелловскую релаксацию или зарядку объемных ловушек, поэтому зона II не возникает (однозонный режим). Наличие заряда Q_s, захваченого поверхностными ловушками, способствует реализации однозонного режима, конечно, с учетом работающего в обратном направлении процесса разрядки как поверхностных, так и объемных ловушек.

Результаты расчета и построения пограничных линий на плоскости α_t–α_d приведены на рис. 3, a и b. При этом решалось уравнение $a(t_L) = 1$, вещественные корни которого соответствовали двухзонному режиму, а появление корней в области комплексных чисел ха-

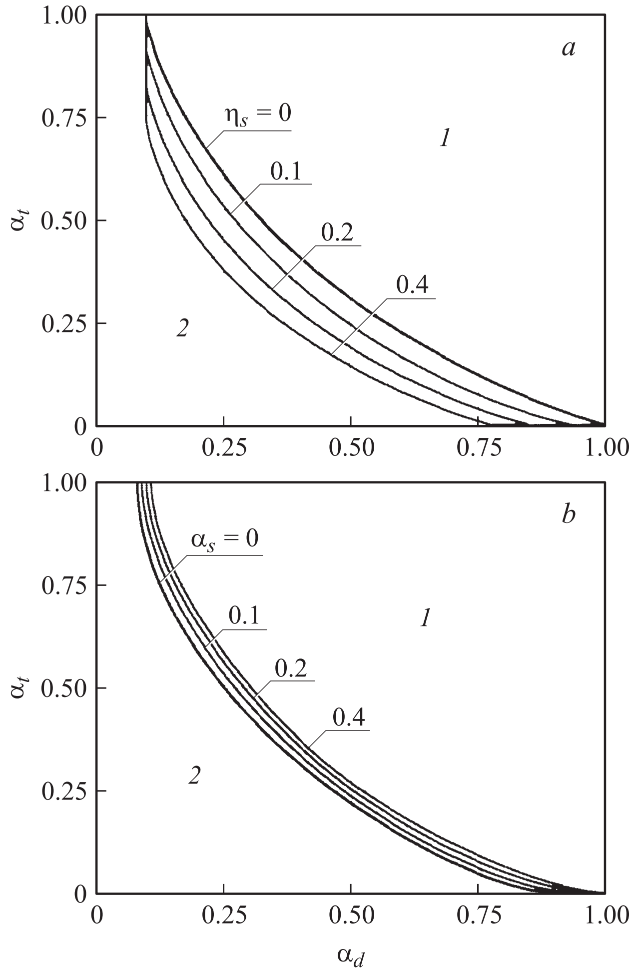

Рис. 3. Влияние параметра поверхностного захвата η_s (a) и нормированной частоты поверхностной разрядки α_s (b) на положение пограничной линии, разделяющей однозонный (область *1*) и двухзонный (область *2*) режимы релаксации, вычисленной по формулам (26)–(28) при $\alpha_\nu = 0.1$, $\alpha_s = 0.1$ (a) и $\alpha_\nu = 0.1$, $\eta_s = 0.1$ (b).

рактеризовало переход к однозонному режиму. Рис. 3 содержит кривые, каждая из которых представляет собой совокупность точек (в виде значений параметров α_d и α_t, полученных при $\alpha_v = \text{const}$, $\alpha_s = \text{const}$, $\eta_s = \text{const}$), соответствующих критическим условиям, при которых решение перемещается из действительной области в комплексную.

Как и на рис. 2, увеличение доли заряда, захваченного поверхностными ловушками (рост параметра η_s), и уменьшение скорости их разрядки (снижение параметра α_s) уменьшает концентрацию свободного заряда, приводя к исчезновению зоны II. Все кривые на рис. 3, *a* и *b* (см. также рис. 3, *a* в работе [1]) лежат внутри квадрата со сторонами единичной длины ($\alpha_t \equiv Q_t/Q_0 = 1$ и $\alpha_d \equiv Q_d/Q_0 = 1$). За пределами этого квадрата (выше горизонтальной линии $\alpha_t = 1$, где $Q_t > Q_0$, и правее вертикальной линии $\alpha_d = 1$, где $Q_d > Q_0$) всегда реализуется однозонный режим релаксации. Такой же режим имеет место и внутри квадрата для области, лежащей правее соответствующей пограничной кривой. Область, лежащая левее каждой кривой (когда $Q_t < Q_0$ и $Q_d < Q_0$), отвечает условиям при которых возникает двухзонный режим релаксации.

С увеличением η_s (т.е. при большем заряде, захваченном поверхностными ловушками) уменьшается концентрация свободных носителей заряда, а это сужает область значений других параметров среды, при которых возникает двухзонный режим релаксации. С увеличением скорости разрядки поверхностных ловушек (т.е. с ростом α_s) возникает противоположный эффект: из-за увеличения концентрации свободных носителей расширяется область значений параметров среды, доступных для возникновения двухзонного режима. Из сравнения кривых на рис. 3, *a* и *b* видно, что рост параметра η_s приводит к сдвигу пограничной линии в область меньших значений α_d существенно заметнее, чем сдвиг в область бóльших значений α_d, вызванный увеличением параметра α_s.

4. Аналитические выражения и численные расчеты в сравнении с результатами эксперимента

Запишем суммарную плотность заряда $\rho_\Sigma(t)$, состоящего из свободного (ρ) и захваченного объемными ловушками (ρ_t) зарядов, общий движущийся фронт которых в момент времени t располагается при $x_f(t)$ в виде (20). Из формулы (9) для $Q_\Sigma(t) = \rho_\Sigma(t)x_f(t)$ с учетом предельного перехода (3) следует выражение (ср. формулы (1-26) и (1-30))

$$\rho_\Sigma(t) = \frac{Q_0}{L}\,\frac{\exp(-t/\tau_d)}{a_s(t)}. \tag{29}$$

Здесь вместо функции $a(t)$ в форме (22) введена результирующая функция

$$a_s(t) = \frac{a(t)}{1 - \eta_s \exp(-\tilde{\nu}_s t)}, \tag{30}$$

учитывающая захват электронов поверхностными ловушками и их разрядку с эффективной частотой (19).

Однородное распределение заряда в форме (29) (рис. 1, *a*) позволяет решить уравнение $\partial E(x,t)/\partial x = \rho_\Sigma(t)/\varepsilon$, используя граничное условие (рис. 1, *b*),

$$E_s(t) \equiv \lim_{h\to 0} E(h,t) = \frac{Q_s(t)}{\varepsilon} = \frac{Q_{s0}}{\varepsilon}\exp(-\nu_s t)$$
$$= E_0\eta_s\exp(-\nu_s t). \tag{31}$$

Результат такого решения имеет следующий вид (ср. формулы (1-25) и (1-29)):

$$E(x,t) = \left(\eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t) + \frac{x}{La_s(t)}\right)E_0\exp(-t/\tau_d). \tag{32}$$

Следует отметить, что формулы (29) и (32) справедливы не только для временнóй зоны I (когда $t < t_L$), но и для зоны II (когда $t > t_L$). Различие между ними состоит в том, что в первом случае $a(t) < 1$, а во втором случае $a(t) > 1$.

На основе распределения электрического поля (32), графически изображенного на рис. 1, *b* (сплошной линией для зоны I и штриховой линией для зоны II), легко найти поверхностный потенциал пленки как площадь под указанными выше ломанными линиями для предельного случая (31) (ср. формулы (1-27) и (1-31))

$$V(t) = \begin{cases} V_0\left(1 - \frac{a(t)}{2}\left[1 - \eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t)\right]\right) \\ \qquad\qquad \times\exp(-t/\tau_d) \text{ для зоны I}, \\ V_0\left(\eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t) + \frac{1-\eta_s\exp(-\tilde{\nu}_s t)}{2a(t)}\right) \\ \qquad\qquad \times\exp(-t/\tau_d) \text{ для зоны II}. \end{cases} \tag{33}$$

Для численных расчетов используем выражения (33), переписанные через нормированные релаксационные параметры (25) в следующем виде (ср. с формулой (1-59)):

$$\frac{V(\tau)}{V_0} = \begin{cases} \left(1 - \frac{a(\tau)}{2}\left[1 - \eta_s\exp\big((\alpha_d-\alpha_s)\tau\big)\right]\right) \\ \qquad\qquad \times\exp(-\alpha_d\tau) \text{ для зоны I}, \\ \left(\eta_s\exp\big((\alpha_d-\alpha_s)\tau\big) + \frac{1-\eta_s\exp((\alpha_d-\alpha_s)\tau)}{2a(\tau)}\right) \\ \qquad\qquad \times\exp(-\alpha_a\tau) \text{ для зоны II}. \end{cases} \tag{34}$$

Следует обратить внимание на тот факт, что в формулах (33) и (34) вместо функции (30) использованы функции $a(t)$ и $a(\tau)$ (без нижнего инденкса s), при этом $V_0 = E_0L$ — поверхностный потенциал пленки при $t = 0$.

Нетрудно убедиться в том, что формулы (29) и (32)–(34), полученные в рамках новой модели с поверхностными ловушками, превращаются при $\eta_s \to 0$, когда $a_s(t) \to a(t)$, в указанные выше формулы работы [1].

Результаты численных расчетов по формулам (34) приведены на рис. 4, *a* и *b*. Они показывают влияние параметра поверхностного захвата η_s (рис. 4, *a*) и нормированной частоты поверхностной разрядки α_s (рис. 4, *b*) на релаксацию поверхностного потенциала $V(\tau)$. Как и следовало ожидать, увеличение η_s (рост доли заряда, захваченного поверхностными ловушками) уменьшает подвижный (свободный) заряд и снижает скорость релаксации, а увеличение α_s (рост скорости разрядки поверхностных ловушек) дает противоположный эффект. Это объясняется тем, что величина электрического поля (а значит, и поверхностный потенциал) определяется полным зарядом в пленке (свободным и захваченным), а процесс релаксации вызван движением свободного заряда. Поэтому захват заряда (рост η_s) и его удержание (уменьшение α_s) поверхностными ловушками снижают темп релаксации, что и демонстрируют кривые на рис. 4, *a* и *b*.

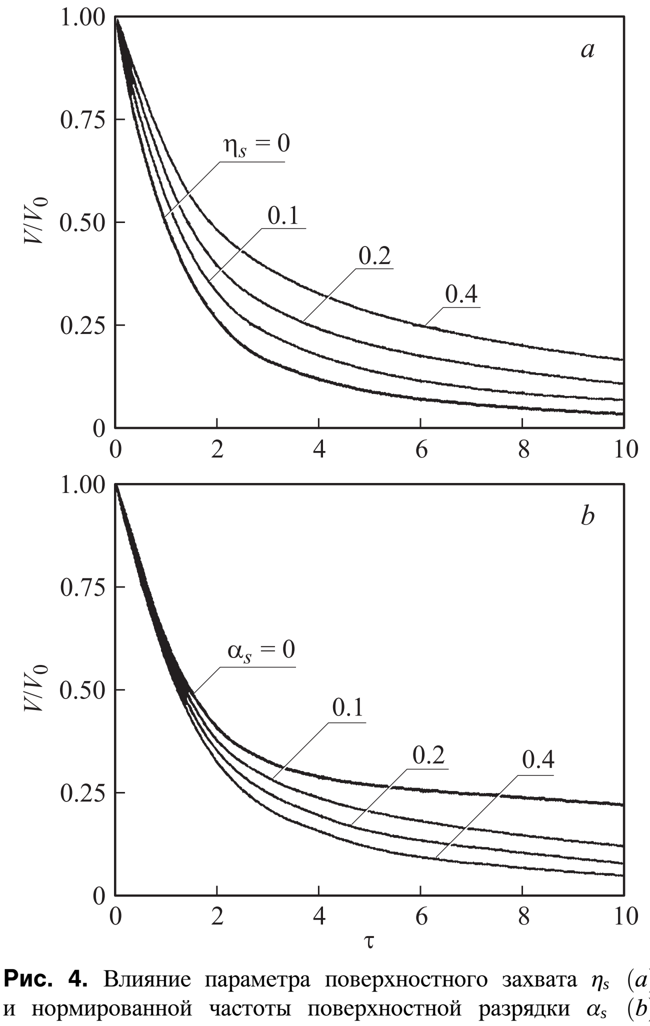

Рис. 4. Влияние параметра поверхностного захвата η_s (*a*) и нормированной частоты поверхностной разрядки α_s (*b*) на релаксацию нормированного поверхностного потенциала V/V_0, вычисленного по формуле (34) при $\alpha_d = 0.1$, $\alpha_t = 0.1$, $\alpha_v = 0.1$, $\alpha_s = 0.1$ (*a*) и $\alpha_d = 0.1$, $\alpha_t = 0.1$, $\alpha_v = 0.1$, $\eta_s = 0.2$ (*b*).

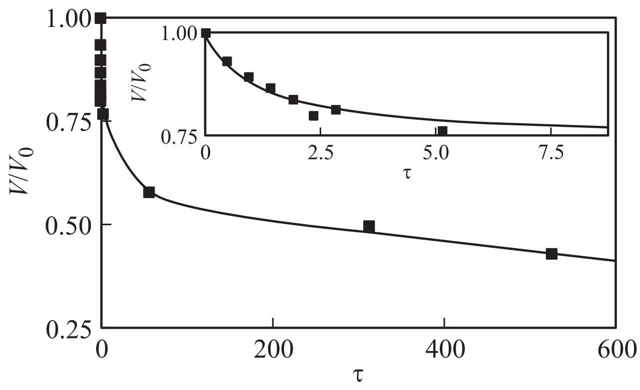

Рис. 5. Зависимость относительной величины поверхностного потенциала V/V_0 от нормированного времени $\tau = t/\tau_0$, построенная по формуле (34), и экспериментальные точки, полученные для оксида титана.

Разработанная модель, учитывающая как объемные, так и поверхностные ловушки, была использована нами для обработки экспериментальных результатов, полученных на пленках оксида титана, с целью определения релаксационных параметров структуры. Наблюдение за релаксацией инжектированного заряда проводили, измеряя значения поверхностного потенциала $V^*(t_i)$ в моменты времени t_i $(i = 0, 1, 2, \ldots)$ и отмечая их звездочкой, чтобы отличить от теоретической кривой $V(t)$.

Задача состоит в определении релаксационных параметров пленки, которые обеспечивают наилучшее приближение теоретической кривой $V(t)$ к экспериментальным результатам $V^*(t_i)$ в рамках выбранного критерия. В качестве меры близости функций $V(t)$ и $V^*(t_i)$ принимаем их суммарное квадратическое отклонение по всем значениям t_i, а в качестве критерия выбираем глобальный минимум этой меры в пространстве независимых факторов, а именно релаксационных параметров модели $(\tau_0, \tau_t, \tau_d, \nu, \nu_s, \eta_s)$:

$$\Delta^2 = \sum_i [V(\tau_0, \tau_t, \tau_d, \nu, \nu_s, \eta_s; t_i) - V^*(t_i)]^2 = \min .$$

Таким образом, задача сведена к типовой процедуре оптимизации, которую обычно решают градиентным методом [17]. Результаты экпериментальных измерений приведены на рис. 5 (где вставка показывает начальные моменты времени с сохранением масштаба по вертикальной оси). Их математическая обработка по описанной методике дает набор релаксационных параметров пленки, приведенный в таблице.

Релаксационные параметры пленки TiO_2

τ_0, 10^3 s	τ_t, 10^3 s	τ_d, 10^6 s	ν, $10^{-4}\,s^{-1}$	ν_s, $10^{-7}\,s^{-1}$	η_s
1.28	3.2	1.28	3.1	4.5	0.58

5. Заключение

Разработана модель релаксации заряда, инжектированного в диэлектрическую пленку, которая базируется на общеизвестных транспортных уравнениях с учетом проводящих свойств среды и влияния как объемных, так и поверхностных ловушек. Для ловушек использована модель быстрой (практически мгновенной) зарядки и медленной разрядки, характеризуемой частотами ν и ν_s для объема и поверхности.

Новая поверхностная модель релаксации обобщает результаты работы [1]. В частности, вновь полученные соотношения принципиально сохраняют старую структуру объемной модели с заменой универсальной функции $a(t)$, подчиняющейся уравнениям (22)–(24), на новую функцию $a_s(t)$ в форме (30).

Полученное решение описывает процесс релаксации во времени в виде двух последовательно смещающихся зон, когда движущийся фронт заряда достигает металлического контакта (зона I) и подвижный заряд начинает стекать в него (зона II). Наряду с двухзонным режимом релаксации возможен однозонный режим, при котором подвижные носители будут полностью израсходованы за счет максвелловской релаксации и зарядки ловушек, не доходя до металла. Влияние параметра поверхностного захвата η_s и нормированной частоты поверхностной разрядки α_s на пограничные линии, разделяющие однозонный и двухзонный режимы, находит корректное физическое объяснение.

Аналитические выражения для поверхностного потенцила (33) и (34) позволяют выполнить численный анализ различных физических ситуаций, связанных с поведением инжектированных зарядов в диэлектрической пленке. В частности, они принимают упрощенные формы, ранее полученные другими авторами в пренебрежении вкладом проводимости или глубоких объемных ловушек. Применение выражения для поверхностного потенциала с учетом вклада поверхностных ловушек к анализу экспериментальных данных для пленок оксида титана позволило оценить их релаксационные параметры.

6. Приложение. Решение дифференциального уравнения (21)

Вводим новую функцию времени $\tilde{a}(t)$, такую что

$$a(t) = \tilde{a}(t)\exp(-t/\tau_d), \tag{П1}$$

для которой исходное уравнение (21) принимает следующий вид:

$$\frac{d\tilde{a}(t)}{dt} + p(t)\tilde{a}(t) - \frac{1}{\tau_0} = 0, \tag{П2}$$

где (см. формулы (18) и (19))

$$p(t) = -\frac{1}{\tau_d} + \frac{\exp(-\nu t)}{\tau_t} + \frac{\eta_s}{\tau_t}\frac{\exp(-\nu t)}{\exp(\tilde{\nu}_s t) - \eta_s}. \tag{П3}$$

Нетрудно убедиться в том, что решение уравнения (П2) имеет вид

$$\tilde{a}(t) = \frac{\exp[-u(t)]}{\tau_0}\int_0^t \exp[u(t')]dt', \tag{П4}$$

где

$$u(t) = \int_0^t p(t)dt. \tag{П5}$$

Постоянная интегрирования в выражении (П4), найденная из начального условия $x_f(0) = h$, при предельном переходе (3) обращается в нуль.

Подстановка (П3) под интеграл (П5) приводит к следующему выражению:

$$u(t) = -\frac{t}{\tau_d} + \frac{1-\exp(-\nu t)}{\nu\tau_t} + \frac{\eta_s}{\tau_t}\int_0^t \frac{\exp(-\nu t)dt}{\exp(\tilde{\nu}_s t) - \eta_s}. \tag{П6}$$

Отсюда

$$\exp[u(t)] = \exp(-t/\tau_d) f(t) f_s(t), \tag{П7}$$

где введены обозначения

$$f(t) = \exp\left(\frac{1-\exp(-\nu t)}{\nu\tau_t}\right), \tag{П8}$$

$$f_s(t) = \exp\left(\frac{\eta_s}{\tau_t}\int_0^t \frac{\exp(-\nu t)dt}{\exp(\tilde{\nu}_s t) - \eta_s}\right). \tag{П9}$$

Подставляя (П7) в (П4), получаем искомое решение уравнения (П2)

$$\tilde{a}(t) = \frac{\exp(t/\tau_d)}{\tau_0}\frac{1}{f(t)f_s(t)}\int_0^t f(t')f_s(t')\exp(-t'/\tau_d)dt'. \tag{П10}$$

Величины τ_0, τ_t и $\tilde{\nu}_s$ определены формулами (18) и (19), при этом $\tau_d = \varepsilon/\sigma$.

Интеграл, входящий в формулу (П9), в общем случае не может быть вычислен, но выражается через элементарные функции в двух частных случаях.

1. Малый коэффициент поверхностного захвата ($\eta_s \ll \exp(\tilde{\nu}_s t)$):

$$f_s(t) = \exp\left(\frac{\eta_s}{\tau_t}\frac{1-\exp[-(\nu+\tilde{\nu}_s)t]}{\nu+\tilde{\nu}_s}\right). \tag{П11}$$

2. Отсутствие разрядки объемных ловушек ($\nu = 0$ и $f(t) = \exp(t/\tau_t)$):

$$f_s(t) = \exp(-t/\tau_t)\left(\frac{\exp(\tilde{\nu}_s t) - \eta_s}{1-\eta_s}\right)^{1/\tilde{\nu}_s\tau_t}, \tag{П12}$$

при этом для вычисления интеграла в (П9) была использована формула 2.313.1 из [18].

Список литературы

[1] А.А. Барыбин, В.И. Шаповалов. ФТТ **50**, 781 (2008).
[2] A. Many, G. Rakavy. Phys. Rev. **126**, 1980 (1962).
[3] H.J. Wintle. J. Appl. Phys. **41**, 4004 (1970).
[4] I.P. Batra, K.K. Kanazawa, H. Seki. J. Appl. Phys. **41**, 3416 (1970).
[5] I.P. Batra, K.K. Kanazawa, B.H. Schechtman, H. Seki. J. Appl. Phys. **42**, 1124 (1971).
[6] H. Seki, I.P. Batra. J. Appl. Phys. **42**, 2407 (1971).
[7] H.J. Wintle. J. Appl. Phys. **42**, 4724 (1971).
[8] А.И. Руденко. ФТП **5**, 2383 (1971).
[9] H.J. Wintle. J. Appl. Phys. **43**, 2927 (1972).
[10] K.K. Kanazawa, I.P. Batra, H.J. Wintle. J. Appl. Phys. **43**, 719 (1972).
[11] H.J. Wintle. Thin Solid Films **21**, 83 (1974).
[12] P.W. Chudleigh. Appl. Phys. Lett. **48**, 4591 (1977).
[13] В.И. Архипов, А.И. Руденко. ФТП **16**, 1798 (1982).
[14] В.В. Брыскин, Л.И. Коровин, Ю.И. Кузьмин. ФТТ **28**, 148 (1986).
[15] В.В. Брыскин, Л.И. Коровин, Ю.И. Кузьмин. ФТТ **29**, 1323 (1987).
[16] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике для научных работников и инженеров. Наука, М. (1968). 720 с.
[17] Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. Наука, М. (1976). 220 с.
[18] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Наука, М. (1971). С. 106.