

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛЬТСТАТИЧЕСКОГО РЕЖИМА ОКИСЛЕНИЯ

Авдеев Н.А. Кириенко Д.А. Гуртов В.А.
Петрозаводский государственный университет

В вольтстатическом (ВС) режиме окисления поддерживается постоянное значение напряжения на электрохимической ячейке. При этом наблюдается уменьшение ионных токов, формирующих окисный слой [1]. В чистом виде этот режим используется достаточно редко из-за невозможности контролировать процесс в момент резкого включения напряжения при отсутствии окисной пленки. Обычно применяют смешанный режим окисления, когда пленку выращивают до некоторой толщины в гальваностатическом или потенциодинамическом режиме, а затем включают ВС режим. При этом согласно теоретическим расчетам закон изменения ионного тока имеет следующий вид [2]

$$\frac{1}{j} - \frac{1}{j_0} = B \cdot g \cdot \frac{U}{L_0^2} \cdot t \quad (1)$$

где U – напряжение, L_0 – толщина, до которой был выращен окисный слой в ГС режиме, j_0 – плотность тока в гальваностатическом режиме.

С помощью системы уравнений (1- 5) [3] можно рассчитать динамику изменения концентрации подвижных носителей заряда по толщине анодной окисной пленки в процессе ВС режима. Граничные условия приобретают следующий вид с $(L, 0) U(t) = \text{const}$.

$$j = D \cdot \frac{\partial c(0,t)}{\partial x} + m(E - E_u) \cdot c(0,t) = \text{const} \quad (1)$$

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} + m(E - E_i) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} - \gamma \cdot c(x,t) \cdot c_0 \quad (2)$$

$$D \cdot \frac{\partial c(L,t)}{\partial x} + m(E - E_u) \cdot c(L,t) = k \cdot c(L,t) \quad (3)$$

$$\frac{dL}{dt} = \frac{1}{S} \frac{M_{ox}}{n \cdot r_{ox} \cdot N_A} \cdot k_0 A \ln j \cdot c(L,t) \quad (4)$$

$$\frac{\partial E_u}{\partial x} = - \frac{q \cdot (c(x,t) - c_0)}{e_s e_0} \quad (5)$$

где $c(x,t)$ - концентрация подвижных ионов, $c_0(x)$ - концентрация неподвижных дефектов решетки, D , μ , - соответственно коэффициент диффузии, подвижность ионов, а E - напряженность электрического поля, k_0 – константа скорости роста окисла, M_{ox} – молярная масса образующегося окисла, ρ_{ox} - плотность окисла, N_A – число Авогадро, n_{ox} – валентность реакции образования окисла, $c(x,t)$ – концентрация подвижных ионов в окисле, E_u – поле заряда подвижных частиц, γ - сечение рекомбинации.

В уравнениях учитывается логарифмическая зависимость скорости реакции на границе металл-окисел от плотности тока и взаимодействие подвижных частиц с дефектами решетки. Результаты решения приведены на рис.1. Как видно из приведенных

зависимостей в окисле после ВС режима остается часть подвижных частиц, не вступивших во взаимодействие с решеткой окисла и не успевших дойти до границы, где образуются новые слои окисла за время 300 с (кривая 4).

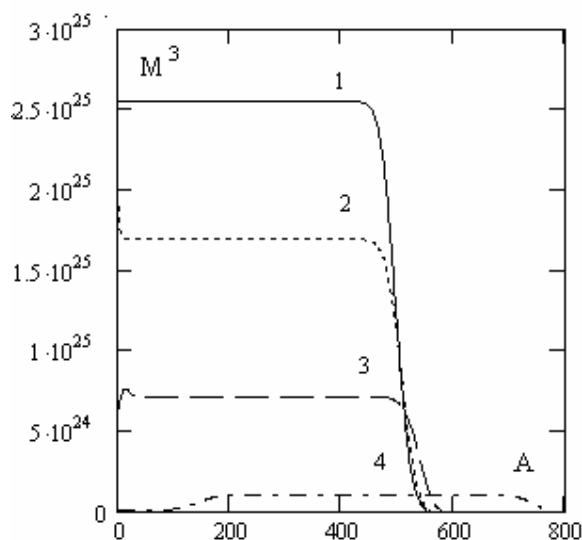


Рис. 1. Распределение концентрации носителей по толщине окисла после перехода системы в ВС режим за интервалы времени: 1 - 1с; 2 - 2с; 3 - 10с; 4 - 300с

Данная модель позволяет находить распределение остаточной концентрации катионов металла по толщине окисной пленки. Эти частицы образуют заряд, который является причиной отсутствия модуляции емкости МДП структур сразу после анодного окисления. При меньших токах формирования окисла в ГС система быстрее приходит в равновесное состояние после выдержки при постоянном напряжении.

В вольтстатическом режиме уменьшение тока и соответственно скорости химической реакции приводит к меньшему числу дефектов на межфазной границе Si – Ta₂O₅, таким образом, снижается начальная плотность поверхностных состояний, которая проявляется в измерениях C-V характеристик после отжига МДП структур (200⁰С, 10 мин).

Представленные расчеты позволяют получить качественную картину, объясняющую снижение встроенного заряда и плотности поверхностных состояний в системе полупроводник анодный окисел металла.

Список литературы:

1. Л. Юнг. "Анодные окисные пленки" //Л.:Энергия, 1967
2. Л. Л. Одынец, В.М. Орлов. "Анодные окисные пленки", Ленинград, "Наука", 1990.
3. Н.А. Авдеев, Г.С. Сиговцев. "О математических моделях процессов анодного окисления"// Труды Петрозаводского государственного университета: сер. Прикладная математика и информатика. Вып.9./ Под.науч. ред. Проф. В. И. Чернецкого // ПетрГУ. Петрозаводск, 2000, с 57.