

ОБРОБКА ВИМІРЮВАЛЬНОЇ ІНФОРМАЦІЇ

УДК 551.568.85

АВТОМАТИЗОВАНИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЕЛЕКТРОАКТИВНИХ ЦЕНТРІВ У ТВЕРДИХ ТІЛАХ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДИКИ ТЕРМОСТИМУЛЬОВАНОЇ ДЕПОЛЯРИЗАЦІЇ

Б. П. Коман

Львівський національний університет імені Івана Франка

E-mail: sonce_28@ukr.net

На базі персонального комп'ютера розроблено автоматизований комплекс для дослідження параметрів електроактивних центрів у високоомних напівпровідниках та діелектриках з використанням методики термостимульованої деполаризації (ТСД). Розроблене оригінальне програмне забезпечення дає змогу повністю автоматизувати поляризацію та деполаризацію зразка у встановленому температурному діапазоні, його нагрів зі заданою швидкістю, вимірювання з високою точністю струмів ТСД та здійснювати кількісну оцінку параметрів центрів: частотного фактора, енергію активації та густину електронних станів, зумовлених дефектами структури.

Ключові слова: *термостимульована деполаризація, параметри центрів, терморегулятор, елементарний пік, рівняння Фредгольма.*

AUTOMATED COMPLEX FOR RESEARCH OF ELECTROACTIVE CENTERS IN SOLIDS USING THE TECHNIQUE OF THERMALLY STIMULATED DEPOLARIZATION

B. P. Koman

Ivan Franko National University of Lviv

The PC-based automated measuring system is developed for the study of thermostimulated depolarization processes in semiconductors and high-resistivity structures that can automate the process of measurement; record currents caused by the nonequilibrium relaxation in the current range of $10^{-4} \dots 10^{-13}$ A; maintain the constant temperature in the sample polarization or change it for a specific law; obtain experimental results and quantitative information on the energy centers of the parameters responsible for TSD processes. The energy spectrum of defects quantitatively analyzed the function of the density of states $g(E, \omega)$, derived from experimental curves of current TSD $j(T)$ route from the solutions of Fredholm integral equation of the 1st kind, describing the process in disordered dielectrics with quasi-continuous energy spectrum electrically-active defects. This problem is incorrect by Adamar. So to solve this problem the approach developed by Tikhonov for problems of this class are used. The program for the integrated treatment of experimental curves of thermal stimulated depolarization currents is implemented in the system of visual object-oriented programming C++ Builder 5. It allows us to develop a flexible and fast algorithm with dynamic allocation memorization that is necessary for the implementation of iterative methods. To determine the activation energy as a basis, the original recovery method (Garlick–Gibson) is used, because it provides a relatively small error (about 2.3%).

Keywords: *thermoinduced depolarization, parameters centers, thermostat, elementary peak, Fredholm equation.*

Методика термостимульованої деполаризації (ТСД) зарекомендувала себе як ефективний та відносно простий метод аналізу дефектної структури високоомних матеріалів. Її сутністю є поляризація зразка на першій стадії процесу за певної тем-

© Б. П. Коман, 2016

ператури прикладеним зовнішнім електричним полем, завдяки чому в його межах створюється просторово-неоднорідний розподіл носіїв заряду або анізотропна орієнтація полярних молекул чи квазідиполів. Електричне поле призводить до простого зміщення вільних носіїв заряду та їх локалізації в енергетичних пастках. У цьому випадку весь об'єкт або окремі його області утворюють макроскопічну потенціальну яму для носіїв заряду. Різке охолодження зразка спричиняє “заморожування” поляризованого стану, тобто його час релаксації різко збільшується. Відімкнення електричного поля в такому стані та закорочення електродів не призводить до помітної деполізації об'єкта, оскільки нерівноважний стан є метастабільним. На другій стадії експерименту – нагрівання “замороженого” поляризованого об'єкта у закороченому стані за певним часовим законом реалізує явище ТСД, наслідком якого є протікання у колі струму деполізації (СД), що за фізичною природою є струмом зміщення [1].

На перших етапах використання ТСД-методики дослідники обмежувалися лише констанцією наявності чи відсутності певних немонотонностей на спектрах ТСД, а висновки мали лише описовий характер [2, 3]. Запропонована єдина для досліджень такого типу стандартна установка MERA [4] володіє обмеженими апаратними можливостями, а що головне – не дозволяє автоматизувати вимірювання та здійснювати комп'ютерну обробку експериментальних результатів з кількісною оцінкою параметрів електроактивних центрів. Однак ситуація у вимірювальній техніці, як відомо, суттєво змінилася з часу використання комп'ютерних засобів обробки результатів та спеціальних програмних ресурсів. В експериментальних дослідженнях ТСД це дає змогу не лише автоматизувати вимірювання, але й значно підвищити інформативність отриманих експериментальних кривих. Завдяки використанню аналітичних виразів для термостимульованих струмів провідності, поляризації, розрядки і деполізації можна встановити зв'язок між параметрами електроактивних дефектів і положенням, розміром, а також формою відповідного піка термостимульованого струму.

Мета роботи – розробити на базі персонального комп'ютера (ПК) оригінальний автоматизований комплекс, що дозволяє в автоматичному режимі здійснювати поляризацію та деполізацію структури зі заданою швидкістю, записувати з високою точністю спектр струму ТСД, обробляти експериментальні спектри ТСД та оцінювати з отриманих залежностей параметри електроактивних центрів (частотний фактор, енергію активації, густину електронних станів).

Експериментальний вимірювальний комплекс. Суть методики та функціональна схема. З часу виходу першої праці [5] з дослідження ТСД в структурах Si-SiO₂ ця методика зазнала суттєвих змін, зокрема, завдяки впровадженню ПК та програмних засобів для керування вимірюванням.

На базі ПК змонтовано автоматизований вимірювальний комплекс для дослідження термостимульованих деполізаційних процесів у високоомних напівпровідниках та структурах, що дає змогу автоматизувати вимірювання; фіксувати струми, зумовлені нерівноважною електричною релаксацією в діапазоні 10^{-4} ... 10^{-13} А; підтримувати температуру зразка сталою під час поляризації або змінювати її за певним законом; здійснювати програмну обробку експериментальних результатів та отримувати кількісну інформацію про енергетичні параметри центрів, відповідальних за ТСД-процеси.

Функціональна схема вимірювального дослідного комплексу подана на рис. 1. Він включає: ПК; кріостат з конденсаторною коміркою; терморегулятор; аналого-цифровий перетворювач (АЦП); цифро-аналоговий перетворювач (ЦАП); вольтметр-електрометр універсальний В7-30; узгоджувальний пристрій; джерело напруги Б5-50 для поляризації зразка. ПК записує результати вимірювань струмів деполізації, керує зміною температури, згідно з програмою обробляє экс-

периментальні піки та розраховує енергетичні параметри центрів, видає результати обчислень у вигляді графіків та файлів. Для забезпечення цих завдань ПК структурно зв'язаний з іншими функціональними блоками схеми через узгоджувальний пристрій. Призначення цих функціональних блоків (рис. 1) загальноприйняте.

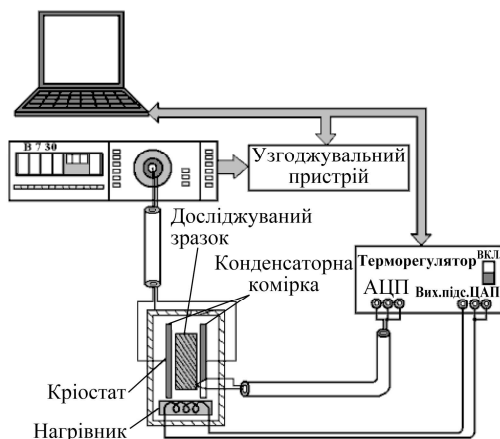


Рис. 1. Функціональна схема автоматизованого вимірювального комплексу для дослідження термостимульованих деполаризаційних процесів у твердих тілах та структурах.

Важливі чинники, що впливають на термостимульовані деполаризаційні процеси, такі: напруженість електричного поля (напруга) та температура поляризації об'єкта; температурний діапазон розігріву та його швидкість.

Температуру поляризації вибирають з умови, за якої забезпечується ефективне вивільнення чи заповнення пасток носіями струму. Такими температурами, згідно з спектром ТСД структур Si-SiO₂, є ~360 та 430...450 К [6, 7].

Експериментально встановлено, що оптимальними швидкостями нагріву для дослідження спектрів струмів ТСД є відносно невеликі швидкості в інтервалі 0,03...0,06 К/с. Використовувати менші швидкості розігріву не виправдано, оскільки за таких умов відбувається суттєве розтікання електричного заряду по елементах конденсаторної комірки і струм, що реєструється, не відображає реально-го енергетичного спектра досліджуваного зразка.

Зазвичай під час експериментів реалізують постійний та гіперболічний нагрів. Вибір таких законів зміни температури зразка диктується теорією ефектів термостимульованої релаксації [1, 6]. Під час розрахунку теоретичних кривих ТСД для багатьох розглянутих моделей з'являється інтеграл виду [6]

$$I = \int_{T_0}^T \left[v_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right] \left(\frac{dT}{dt}\right)^{-1} dT .$$

Коли $dT/dt = \text{const}$, ця величина не залежить від температури, тому її можна винести за знак інтегралу, а саму підінтегральну функцію записати у вигляді показникової функції, яку можна розкласти в ряд, обмежуючись першими членами. За зміни температури за гіперболічним законом рівняння

$$I = \int_{T_0}^T \left\{ \left[v_0 \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) \right] / \alpha T^2 \right\} dT$$

легко розв'язується, якщо частотний фактор не залежить від температури.

Розроблений терморегулятор включає три блоки: ЦАП, транзисторний підсилювач та АЦП. Структурна схема терморегулятора показана на рис. 2.

Температура зразка безпосередньо вимірюється мідь-констатановою термопарою, термо-ЕРС з якої фіксує перший вхід мікросхеми АЦП. Результати вимірювань у цифровій формі передаються на ПК, який переводить їх у значення температури.

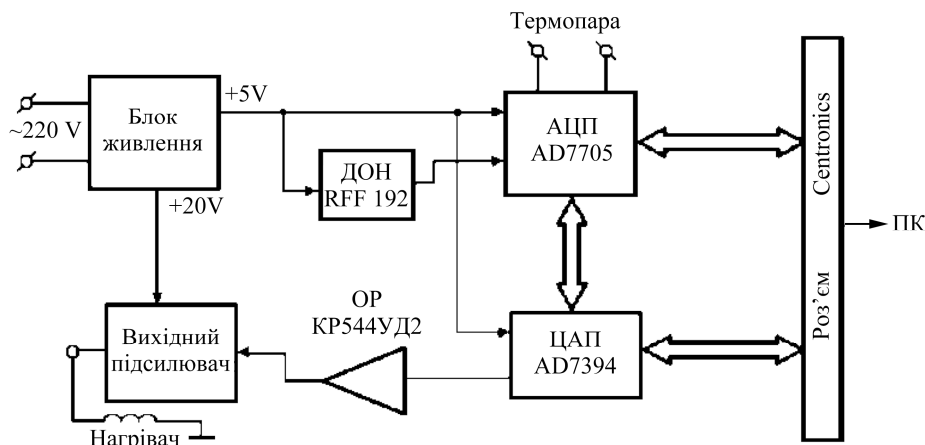


Рис. 2. Структурна схема терморегулятора та транзисторного підсилювача.

Вимірювач температури виконаний на мікросхемі аналого-цифрового перетворювача AD7705, яка є двоканальним 16-бітним сигма-дельта АЦП з повністю диференціальними входами.

Методика обробки експериментальних результатів. Реальні спектри ТСД напівпровідникових структур, як правило, володіють складними функціональними залежностями, що графічно відображається наявністю низки екстремумів. Останні, як відомо, вказують на збудження та захоплення носіїв в енергетичних пастках, локалізованих у певному енергетичному діапазоні. Тому, застосовуючи математичну обробку кривих, можна отримати кількісну інформацію про параметри центрів, відповідальних за спостережувані явища.

Наочним прикладом є обробка елементарного піка термостимульованого струму, що дає змогу визначити енергію активації та частотний фактор центра, відповідального за цю особливість спектра. На сьогодні найчастіше застосовують два методи [1, 6]: початковий підйом (Гарліка–Гібсона) та температурна півширина піка.

Метод початкового підйому ґрунтується на теоретично встановленому факті, що незалежно від механізму і порядку кінетики неізотермічної релаксації заряду початкова ділянка термостимульованого струму в координатах Арреніуса

$\ln I \left(\frac{1}{kT} \right)$ лінеаризується.

Під час побудови початкової ділянки піка термостимульованого струму в координатах Арреніуса, енергію активації можна розрахувати так:

$$\frac{d \ln I(T)}{d(1/kT)} \approx -W \quad \text{при } T > T_0.$$

Перевагою цього способу є його незалежність від порядку кінетики релаксаційного процесу. Область початкової ділянки піка, в межах якої метод початкового підйому можна застосувати з достатньою точністю, становить $(I(T) < 0,3I_m)$. Похибка цього методу залежить як від інструментального оснащення, так і від параметрів об'єкта дослідження, однак зазвичай не перевищує 2...3%.

Суть другого методу – температурної півширини піка, полягає в наступному. За кривою термостимульованого струму визначають температуру максимуму, низько- та високотемпературну півширину піка, тобто інтервал температур, в межах яких термостимульований струм більший або рівний половині свого максимального значення.

Важливим параметром, що характеризує електроактивні дефекти або неізотермічну релаксацію заряду, є частотний фактор ω_e . За кривою ТСД частотний фактор можна визначити за формулою [6]

$$\omega_e = \frac{W^2 \beta}{2k^2 T_m^3} \exp\left(\frac{W}{kT_m}\right).$$

Енергетичний спектр дефектів (функція розподілу). Енергетичний спектр дефектів кількісно аналізують функцією густини станів $g(E, \omega)$, отриманої з експериментальних кривих струмів ТСД $j(T)$ шляхом розв'язку інтегрального рівняння Фредгольма 1-го роду, що описує цей процес у неупорядкованих діелектриках з квазінеперервним енергетичним спектром електроактивних дефектів [1]:

$$j(T) = \frac{\omega}{\beta} \int_0^{E_m} g(E) \exp\left[-\frac{E}{kT} - \int_{T_0}^T \frac{\omega_e}{\beta} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dT\right] dE,$$

ω , E – частотний фактор та енергія активації електроактивних дефектів, відповідно; T – температура об'єкта; β – швидкість розігріву зразка; $g(E, \omega)$ – функція розподілу електроактивних дефектів; ω_e – ефективний частотний фактор.

Математичною особливістю цієї задачі є її некоректність за Адамаром [8] (проявляється в тому, що незначним відхиленням вимірюваної функції $j(T)$ можуть відповідати великі відхилення функцій $g(E, \omega)$ або $g(E)$, а також в тому, що для будь-якої залежності $j(T)$ розв'язку може взагалі не існувати). Тому, щоб розв'язати задачу, використовували підхід, розроблений Тихоновим і названий методом регуляризації [9]. В його основі лежить ідея відбору можливих розв'язків та поняття регулятора.

Програма для комплексної обробки експериментальних кривих струмів термостимульованої деполяризації реалізована в системі візуального об'єктно-орієнтованого програмування C++ Builder 5. Вона дає змогу розробити гнучкий та швидкий алгоритм з динамічним розподілом пам'яті, що необхідно при реалізації ітераційних методів. Блок-схема роботи програми показана на рис. 3.

Спочатку вводяться експериментальні дані. Завантажують їх з файлу, вибравши пункт меню файл/відкрити дані. В результаті дані завантажуються у блок "Експер. дані", після чого вони готові до опрацювання. Експериментальну залежність $j(T)$ можна ввести також з клавіатури. Далі в полі під експериментальними даними необхідно вказати швидкість нагрівання і активувати кнопку **Load**. Експериментальні дані будуть відображені на графіку відповідними точками. Перейшовши до блоку "**Апроксимація**", підбираємо степінь апроксимувального полінома. Дані апроксимуються методом найменших квадратів поліномом вигляду

$$j(T) = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + \dots + a_n T^n.$$

Під час написання програми можливість вибору даних має саме оператор, а всі ітераційні та обчислювальні операції робить програма. Якщо степінь апроксимувального полінома підібраний, то потрібно вказати температурні межі елементарного піка, навівши курсор на графік, вибрати T_{\min} та клікнути лівою кнопкою. T_{\max} вибирається аналогічно, лише потрібно клікнути правою кнопкою. У результаті в нижньому лівому куті графічної залежності відобразяться значення

вибраних параметрів. Якщо ці значення не підходять, то операцію можна повторити. Коли всі параметри вказані, переходять до визначення частотного фактора та енергії активації. Для цього потрібно перейти на сторінку “елементарний пік” (рис. 4).

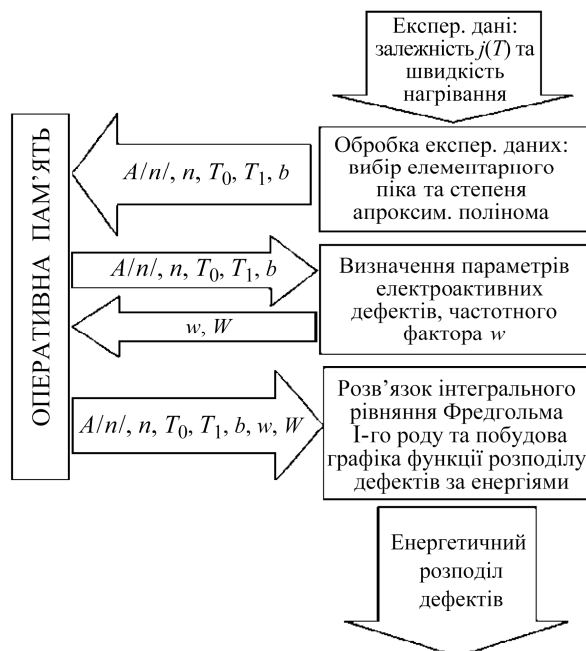


Рис. 3. Блок-схема програми обробки експериментальних результатів (n -ступінь апроксимувального полінома; $A[n+1]$ – масив з коефіцієнтами апроксимувального полінома; T_1, T_0 – температурні межі піка; b – швидкість нагрівання; ω – частотний фактор; W – енергія активації електроактивних дефектів.

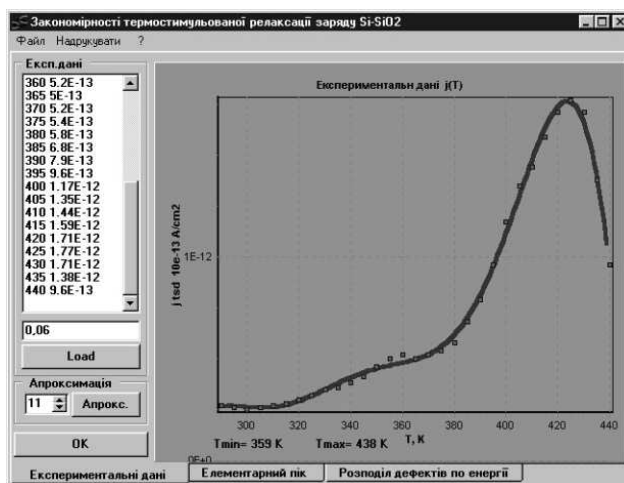


Рис. 4. Інтерфейс програми.

Для визначення енергії активації використано як базовий метод початкового підйому (Гарліка–Гібсона), оскільки його похибка відносно невелика і становить 2...3%.

На графіку (рис. 5) відображена типова залежність $\ln(1/kT)$. Підбирають температурні межі, в яких ця залежність лінеаризується. Після натискання кнопки **OK** будуть розраховані енергія активації та частотний фактор.

У полі “Примітка” можна внести будь-яку інформацію, що може в подальшому допомогти трактувати отримані результати.

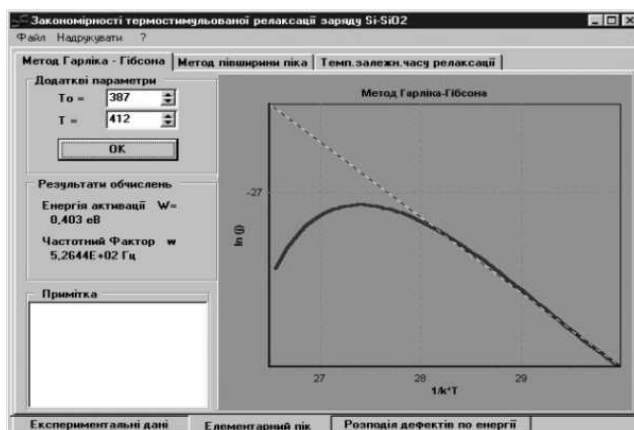


Рис. 5. Визначення енергії активації та частотного фактора методом початкового підйому.

Далі переходять до визначення функції розподілу дефектів за енергіями. Для цього необхідно перейти на відповідну сторінку (рис. 6).

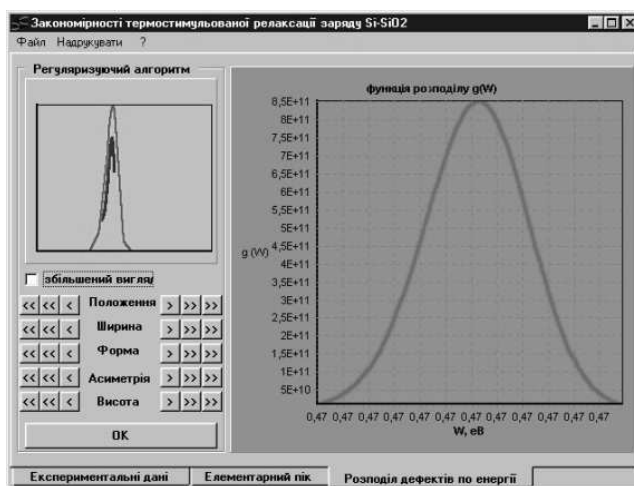


Рис. 6. Визначення функції розподілу дефектів за енергіями.

У полі “Регуляризуєчий алгоритм”, користуючись кнопками “**положення; ширина; форма; асиметрія; висота**” досягають максимального збігу двох графіків. Під час цієї операції задають функцію розподілу $g(W)$ у вигляді двох гаусіанів. Розв’язують пряму задачу: знаходять експериментальну залежність $j(T)$, після чого в отримані результати вносять похибку і шукають розв’язок $g^a(W)$. Для цього створюють систему лінійних рівнянь, яка подається у вигляді матриці, і розв’язують методом Гауса. За отриманим розв’язком знову шукають експериментальні значення $j^a(T)$, підбирають параметри a і задають оптимальну сітку W , T . Далі знову створюють матрицю вже з вибраною оптимальною сіткою W , T та з врахуванням параметрів a . Методом Гауса знову розв’язують матрицю, після чого отримані результати апроксимують і виводять у вигляді графіка.

Розроблений автоматизований комплекс результативно використаний під час дослідження енергетичного спектра дефектів та їхніх параметрів в структурах Si-SiO₂, підданих альфа- [7] та X-опроміненню [10].

ВИСНОВКИ

На базі ПК розроблений вимірювальний комплекс для дослідження термо-стимульованих деполяризаційних процесів у високоомних напівпровідниках та структурах. Він дає змогу автоматизувати вимірювання; фіксувати струми, зумовлені нерівноважною електричною релаксацією в діапазоні $10^{-4} \dots 10^{-13}$ А; підтримувати температуру зразка сталою під час поляризації або змінювати її за певним законом; здійснювати програмну обробку експериментальних результатів та оцінювати шляхом розв'язку рівняння Фредгольма 1-го роду параметри електроактивних центрів (енергію активації, густину станів та частотний фактор), відповідальних за ТСД-процеси.

Розроблений комплекс апробований для термоактиваційного аналізу структур Si-SiO₂, підданих різним видам радіаційного опромінення. Отримані числові значення деяких енергетичних параметрів центрів добре узгоджуються з результатами інших незалежних вимірювань.

1. *Гороховатский Ю. А.* Основы термодеполяризаационного анализа. – М.: Наука, 1981. – 176 с.
2. *Вертопрахов В. Н., Сальман Е. Г.* Термостимулированные токи в неорганических веществах. – Новосибирск: Наука, 1981. – 224 с.
3. *Сэслер Г.* Электреты / Пер. с англ. – М.: Наука, 1983. – 386 с.
4. *Панченко Т. В., Потапович Ю. Н., Снежной Г. Г.* Методика исследований термостимулированных процессов // Измерительная техника. – 1992. – № 7. – С. 54–56.
5. *Русаков В. В.* Исследование МОП – структур методом термостимулированной деполяризации // Электронная техника. – 1972. – 6, Вып. 5. – С. 159–160.
6. *Гороховатский Ю. А., Бордовский Г. А.* Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. – 386 с.
7. *Koman B. P., Gal'chynskyy O. V., Kovalyuk R. O.* Alfa-particle irradiation induced defect in SiO₂ films of Si-SiO₂ structures // NIM B. – 1996. – 116. – P. 389–392.
8. *Демидович Б. П., Марон М. А., Шувалова Э. З.* Методы численного анализа. – М.: Наука, 1976. – 288 с.
9. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 388 с.
10. *Коман Б. П.* Особливості спектрів термостимульованої деполяризації рентгенопроміненних структур Si-SiO₂ // Фіз. і хім. тверд. тіла. – 2012. – 13, № 3. – С. 1281–1290.

Одержано 29.12.2015