

Мікросистеми та фізична електроніка

УДК 621.382

DOI: [10.20535/2523-4455.2018.23.6.141435](https://doi.org/10.20535/2523-4455.2018.23.6.141435)

Критерій вибору діелектрика для кремнієвих МДН-структур

Королевич Л. М., ORCID [0000-0002-4006-280X](https://orcid.org/0000-0002-4006-280X)e-mail korolevych.lyubomyr@gmail.comБорисов О. В., к.т.н. проф., ORCID [0000-0003-4553-3591](https://orcid.org/0000-0003-4553-3591)e-mail a.borisov@kpi.ua

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна

Анотація—Розглядаються питання загального підходу до пошуку діелектрика для кремнієвих МДН-структур як альтернативного діоксиду кремнію (SiO_2).

Показано, що на основі класичної теорії опису кристалічної решітки (вузловий аспект) неможливо одержати критерій вибору діелектрика для МДН-структур. Тому запропоновано новий – міжвузловий аспект – опису кристалічної решітки, на основі якого одержано загальний критерій вибору діелектрика для будь-якої напівпровідникової підкладки. Завдяки введенню нового характеристичного параметру кристалічної речовини – середньої довжини зв'язку – одержано аналітичний вираз для роботи виходу електрона з кристалу.

Встановлено, що найбільш придатним для кремнієвих МДН-структур є діоксид церію CeO_2 .

Бібл. 10, рис. 9.

Ключові слова — МДН-структура; вузловий аспект; міжвузловий аспект; середня довжина зв'язку; критерій вибору; робота виходу.

І. ВСТУП

Основу сучасної мікро- та наноелектроніки становлять кремнієві структури «метал-діелектрик-напівпровідник» (МДН-структури). Вони є невід'ємною складовою інтегральних мікросхем, дискретних МДН-транзисторів, приладів з зарядовим зв'язком, варакторів і визначають їх експлуатаційні та надійнісні параметри і характеристики.

На властивості МДН-структур впливають різні фактори: щільність дефектів у вихідному кремнії, концентрація неконтрольованих домішок, якість омичних контактів, високотемпературні технологічні режими та ін. Але особливу роль відіграють властивості діелектрика і межі розділу діелектрик-напівпровідник.

На сьогодні найбільшого поширення набули МДН-структури на основі плівок діоксиду кремнію – SiO_2 . Використання SiO_2 в МДН приладах до тепер (багато років) залишалося непорушним, так як він майже повністю задовольняв технологічним і експлуатаційним вимогам. Однак прагнення до зменшення довжини каналу і перехід до нанотранзисторної електроніки показали, що SiO_2 , з ряду причин, не може забезпечити задані параметри і характеристики приладів. Масштабування МДН-приладів до нанометрових розмірів неминуче пов'язано зі зменшенням

товщини плівки SiO_2 . Надтонкі плівки SiO_2 стають тунельно-прозорими і не можуть використовуватись через високий тунельний струм. Окрім того, в нанорозмірних структурах посилюється вплив якості межі розділу діелектрик-напівпровідник і високотемпературних технологічних режимів на експлуатаційні параметри приладів, що виготовляються. Виникає проблема надтонкого діелектрика [1], [2]. Ця «проблема» може бути вирішена шляхом заміни SiO_2 на інший діелектрик, який відповідав би наступним вимогам:

- технологія отримання тонких плівок такого діелектрика сумісна з класичною технологією виготовлення кремнієвих МДН-приладів;
- температура технологічного процесу нижче, ніж температура окислення кремнію в сухому кисні;
- електрофізичні параметри межі розділу кремній-діелектрик не гірше ніж на межі Si-SiO_2 ;
- відносна діелектрична проникність більше, ніж у SiO_2 $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9$ (так звані high-k діелектрики).



В даній роботі розглядаються питання загального підходу до пошуку і вибору діелектрика альтернативного діоксиду кремнію який би відповідав вказаним вимогам.

II. КРИТЕРІЙ ВИБОРУ ДІЕЛЕКТРИКА ДЛЯ МДН СТРУКТУР

Як показано в роботах [3], [4] перспективними діелектриками, для заміни діоксиду кремнію у кремнієвих МДН-структурах та приладах на їх основі, є оксиди перехідних і рідкоземельних металів. Ці матеріали задовольняють сформульованим вище вимогам за технологією одержання і діелектричної проникності (8-30). Але залишається відкритим принципове питання сумісництва діелектрика і напівпровідника для забезпечення якості межі між ними.

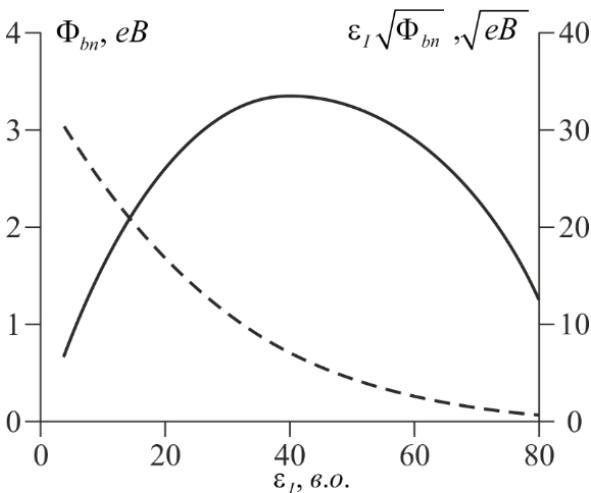


Рис. 1 Експериментальна залежність висоти потенційного бар'єру на межі розділу напівпровідник-діелектрик для електронів (пунктирна лінія) і показника якості (суцільна лінія) від відносної діелектричної проникності діелектрика [2].

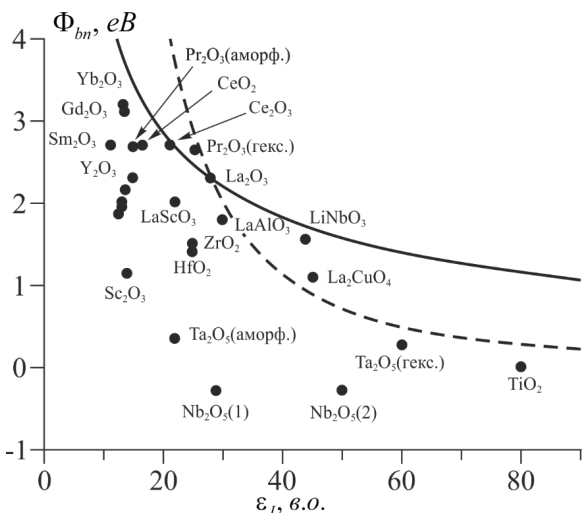


Рис. 2. Взаємозв'язок між висотою потенційного бар'єру на межі розділу діелектрик-кремній в МДН-структурі та відносною діелектричною проникністю діелектрика. Суцільна лінія відповідає тунелюванню за механізмом Фаулера-Нордгейма, а пунктирна – за механізмом прямого тунелювання [6].

Вирішення цього питання є дуже складним в силу відсутності адекватної моделі для аналізу межі розділу діелектрик-напівпровідник [2] (навіть для випадку $\text{SiO}_2\text{-Si}$ [5]), яка б дозволила виробити загальний критерій вибору необхідного діелектрика для будь-якої напівпровідникової підкладки.

Існуючі критерії є частковими випадками і не вирішують питання в цілому. Так, один з критеріїв вибору, заснований на оптимальному співвідношенні між значенням діелектричної проникності діелектрика та його ізоляційними властивостями [2]. Цей критерій надає можливість звзвити ряд матеріалів-претендентів. Тож, діелектрики з відносною діелектричною проникністю, що перевищує 40 (рис. 1), не підходять для заміни діоксиду кремнію в класичній МДН-технології, оскільки ширина їх забороненої зони відносно мала, а надбар'єрний струм через діелектрик стає істотним. Інший підхід [6], заснований на чисельному моделюванні процесу тунелювання носіїв заряду через діелектрик. Він полягає у побудові функціональних залежностей висоти потенційного бар'єру на межі розділу напівпровідник-діелектрик від відносної діелектричної проникності діелектрика (рис. 2). Вибір діелектрика здійснюється за умов його розміщення вище однієї і, в той же час, нижче іншої з теоретичних кривих. Цей критерій на відміну від попереднього дає змогу більш істотно зменшити кількість матеріалів-претендентів, але він може потребувати використання різних матеріалів, в залежності від вихідних параметрів МДН-приладу, що проектується.

Інші критерії вибору діелектрика так чи інакше пов'язані з наведеними, але спрямовані на пошук конкретного матеріалу (напр. [2], [7]). Однак, вони ґрунтуються на порівнянні параметрів шуканого діелектрика з параметрами деякого гіпотетичного діелектрика. Тож незважаючи на їх загальність і феноменологічність, ці підходи до вибору діелектрика не позбавлені суб'єктивності.

Головним показником якості межі розділу напівпровідник-діелектрик в МДН-структурах є щільність електричного заряду на ній. Чим менша щільність заряду на межі розділу напівпровідник-діелектрик, тим вища якість цієї межі, оскільки, за таких умов зменшується вплив цього заряду на значення порогової напруги та підвищується її стабільність.

Умовно ці заряди можна поділити на ті, що визначаються якістю технології, і тому завжди можуть бути усунуті, та на ті, що залежать від природи напівпровідника і діелектрика. Саме тому за основу, для розробки критерію вибору діелектрика, прийнято заряд другого типу, який в подальшому називається зарядом поверхневих станів, а його щільність, відповідно, щільністю поверхневих станів. У першому наближенні, щільність поверхневих станів тотожно дорівнює щільності обірваних зв'язків на межі розділу напівпровідник-діелектрик.

Ідеалізуючи межу розділу напівпровідник діелектрик, а саме вважаючи, що обидва матеріали є абсолютно твердими тілами і на межі з вакуумом будь-

якого з них є сітка вузлів (атомів або іонів і т.д.) найпростішої форми (квадратна), та використовуючи, окремо для кожного з матеріалів, класичну теорію просторової решітки (вузловий аспект), отримано такий вираз для критерію вибору діелектрика:

$$K = \min_{i=1..n} \left\{ \left| \frac{1}{S} - \frac{1}{S_i} \right| \right\} = \min_{i=1..n} \left\{ \left| \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a_i^2} \right| \right\}, \quad (1)$$

де S – площа петлі пласкої сітки на межі розділу напівпровідник-вакуум; S_i – площа петлі пласкої сітки на межі розділу i -тий діелектрик-вакуум; n – загальне число розглянутих діелектриків; a – параметр пласкої сітки на межі розділу напівпровідник-вакуум; a_i – параметр пласкої сітки на межі розділу i -тий діелектрик-вакуум.

Але практичному застосуванню виразу (1), перешкоджають такі фактори:

- 1) Класична теорія просторової кристалічної решітки вимагає наявності нескінченної трансляції, інакше кажучи, кристалу нескінченного розміру. Ця вимога не дозволяє розглядати яку завгодно межу розділу, як наприклад, кристал-вакуум або кристал-кристал. Так, побудова межі розділу кристал-кристал на основі класичної теорії приводить до отримання абсурдного результату, оскільки центри двох матеріальних вузлів різних класичних решіток не можуть мати однакові координати. Це наочно ілюструє рис. 3, де показана спроба поєднання двох різних кристалів ідентичних за параметрами решітки.
- 2) Вихідні положення критерію вимагають наявності на межі розділу напівпровідник-діелектрик сітки вузлів квадратної форми, що на практиці не завжди здійснимо. Інакше кажучи, вираз (1) не враховує реальну морфологію поверхні кристалу.

Для подолання першої із зазначених труднощів запропоновано новий спосіб опису кристалічної решітки (міжвузловий аспект). Суть цього аспекту полягає в зсуві початку координат таким чином, що всі вузли, що припадають на одну комірку початкової (класичної) решітки знаходяться виключно всередині нової комірки, при цьому її об'єм і форма залишаються незмінними. При цьому, межі комірки у міжвузловому аспекті ототожнюються з місцями, де немає будь-якої матерії. Перехід від вузлового (класичного) аспекту просторової кристалічної решітки до міжвузлового аспекту показано на рис. 4.

Використання міжвузлового аспекту кристалічної решітки дозволяє несуперечливо побудувати межу розділу кристал-кристал, так, як це показано на рис. 5, де здійснено побудову цієї межі в тих же умовах, що для класичного аспекту (рис. 3).

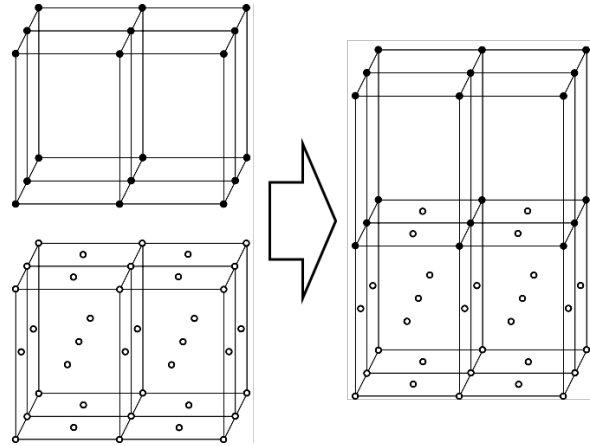


Рис. 3. Межа розділу двох речовин в класичному аспекті

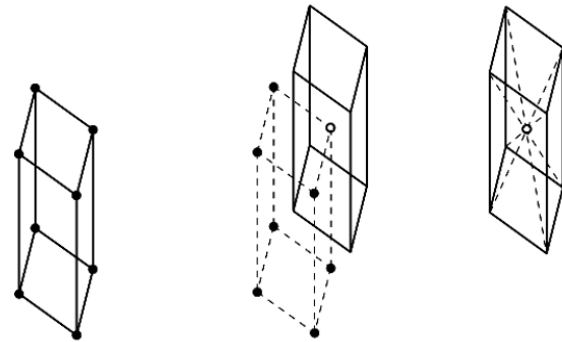


Рис. 4. Перехід від класичного аспекту просторової кристалічної решітки до міжвузлового аспекту

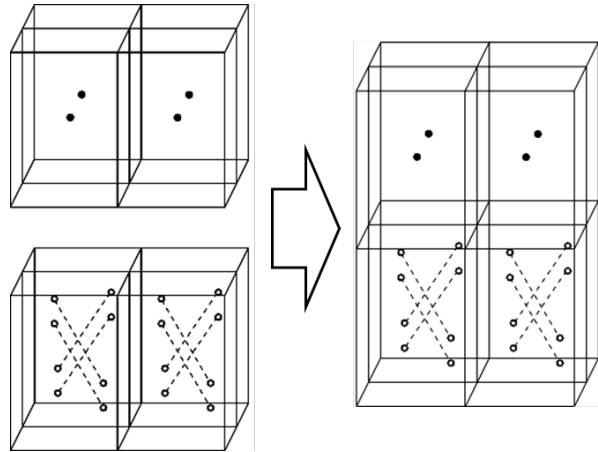


Рис. 5. Межа розділу двох речовин у міжвузловому аспекті

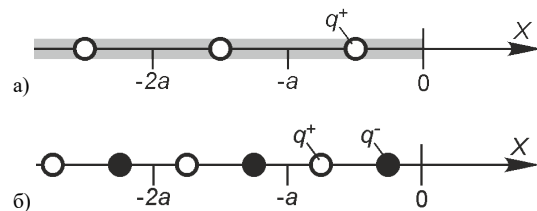


Рис. 6. Моделі одновимірних (а) «ковалентного» і (б) «іонного» кристалів. Білі точки – позитивні іони; чорні точки – негативні іони; сіра область – електронна хмара (газ); точки з координатою $X = 0$ відповідає межа розділу кристал-вакуум, ліворуч від якої знаходиться кристал, а праворуч – вакуум.

Подальші дослідження [8], [9] показали, що міжвузловий аспект ϵ , з погляду опису кристалічної решітки, повним аналогом класичного (вузлового) підходу, і може бути покладений в основу побудови ідеалізованої моделі меж розділу кристал-вакуум, кристал-кристал тощо.

Для подолання другої із зазначених труднощів, необхідно визначити розміри петлі плоскої сітки на межі розділу матеріал-вакуум. Оскільки, кристали відрізняються не тільки симетрією, а й кристалографічною орієнтацією їх межі розділу з вакуумом, для кожної пари матеріалів ϵ нескінченна кількість рішень. Запропоновано використовувати в ролі параметра петлі квадратної плоскої сітки середню відстань між одиницями речовини (середню довжину зв'язку) і наведено метод його розрахунку. З урахуванням цього критерій (1) трансформується до наступного:

$$K = \min_{i=1..n} \left\{ \left| \frac{1}{\bar{a}^2} - \frac{1}{\bar{a}_i^2} \right| \right\}, \quad (2)$$

де \bar{a} і \bar{a}_i – середні довжини зв'язку відповідних матеріалів.

Визначити фізичний зміст і практичну важливість параметра середньої довжини зв'язку можна за допомогою деякої фізичної величини, яка безпосередньо залежить від періодичності розташування одиниць речовини в об'ємі кристалу.

Для цього запропоновано використовувати роботу виходу, оскільки:

- роботу виходу електрона з кристалу можна розрахувати, знаючи розподіл поля сил, що діють на електрон, на межі розділу кристал-вакуум та поза межами кристалу;
- розподіл поля сил, що діють на електрон, за межами кристалу, так само як і всередині нього залежить від періодичності розташування заряджених частинок в його об'ємі.

Розглядаючи рух електрона вздовж деякого ряду матеріальних частинок перпендикулярного межі розділу кристал-вакуум, можна показати, що сили, які діють з боку цього ряду будуть значно більші за сили, що діють з боку всіх інших рядів. Це дозволяє обмежитися розглядом одновимірного випадку. Так, на основі міжвузлового аспекту кристалічної решітки, побудовано одновимірні моделі обмеженого кристалу для двох крайніх випадків хімічного зв'язку всередині кристалу: ковалентного і іонного, за таких обмежень: температура абсолютного нуля, кристал є абсолютно твердим тілом, іони є точковими зарядами. Відповідні моделі одновимірного кристалу показані на рис. 6. Виходячи із зазначених обмежень, розподіл поля сил, що діють на електрон всередині і поза кристалом, буде визначатися лише силами електростатичної взаємодії.

На основі розроблених моделей, визначено взаємозв'язок між роботою виходу і середньою довжиною зв'язку. Так, для «іонного» кристалу цей взаємозв'язок описується співвідношенням [10]:

$$W_i = \pi \frac{k_C q^2}{\bar{a}}, \quad (3)$$

а для «ковалентного» кристалу:

$$W_C = (\gamma + 2 \ln 2) \frac{k_C q^2}{\bar{a}} \approx 1,963510026 \frac{k_C q^2}{\bar{a}}, \quad (4)$$

де $\gamma \approx 0,577215664901$ – стала Ейлера-Маскероні; k_C – стала з закону Кулона; q – елементарний електричний заряд.

Класична теорія кристалічної решітки виявляється не придатною до розрахунку роботи виходу електрона з кристалу, оскільки при тих же умовах, що і при застосуванні міжвузлового аспекту, дає суперечливі значення роботи виходу, а саме нуль або нескінченність.

Для тривимірного кристалу робота виходу дещо відрізняється від значень розрахованих для одновимірного випадку:

$$W_{\text{volume}} = \frac{W_{\text{linear}}}{w_W}, \quad (5)$$

де w_W – коефіцієнт, що показує, у скільки разів робота виходу з об'ємного кристалу менша ніж з одновимірного.

Проведено експеримент, для перевірки отриманих співвідношень, на основі літературних даних, як по роботі виходу, так і за параметрами просторової решітки тих чи інших кристалів. Оскільки моделі «іонного» і «ковалентного» кристалів мають дещо різні теоретичні формули, вони розглянуті окремо (див. рис. 7-8). Визначено залежності роботи виходу від середньої довжини зв'язку (прямі лінії на рис. 7-8). Показано, що співвідношення (3) і (4) не тільки якісно, а й кількісно збігаються з експериментальними значенням з урахуванням (5). Отримано наступні напівемпіричні формули для розрахунку роботи виходу електрона відповідно з «іонного» та «ковалентного» кристалів:

$$W_{i \text{ emp}} = \frac{3}{2\bar{a}} eB, \quad (6)$$

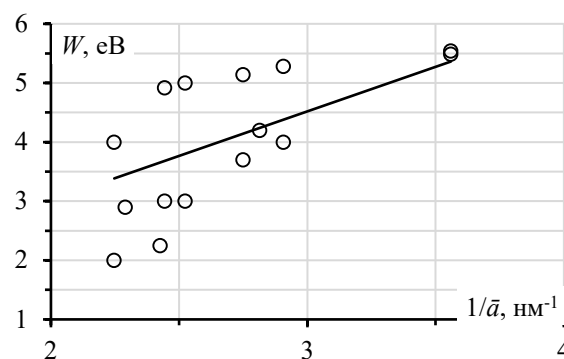


Рис. 7. Залежність роботи виходу електрона для «іонних» кристалічних матеріалів від параметра середня довжина зв'язку. Розкид значень роботи виходу з кристалу показано декількома точками, що лежать на одній вертикальній прямій

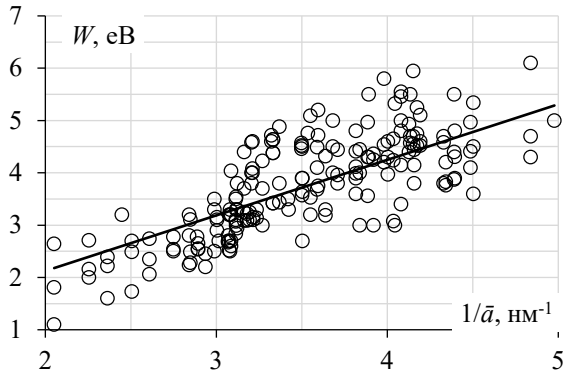


Рис. 8. Залежність роботи виходу електрона для «ковалентних» кристалічних матеріалів від параметру середня довжина зв'язку. Розкид значень роботи виходу з кристалу показано декількома точками, що лежать на одній вертикальній прямій

$$W_{c \text{ emp}} = \frac{1}{a} eB, \quad (7)$$

де \bar{a} – середня довжина зв'язку відповідного кристалу («іонного» або «ковалентного») в нанометрах.

Встановлено, що коефіцієнт w_W для іонних кристалів дорівнює 3,00, а для ковалентних – 2,83.

Порівнюючи відношення коефіцієнтів розроблених теоретичних моделей (3) і (4):

$$\frac{W_i}{W_c} = \frac{\pi}{\gamma + 2 \ln 2} \approx 1,6000 \quad (8)$$

та напівемпіричних формул (6) та (7):

$$\frac{W_{i \text{ emp}}}{W_{c \text{ emp}}} = \frac{3}{2} = 1,5, \quad (9)$$

визначено, що розбіжність між практичними даними та даними за розробленою теорією, складає 6,67%. Таким чином, показано, що параметр середня довжина зв'язку має практичну цінність, а отже, використання його при виборі діелектрика для будь-якої напівпровідникової підкладки за критерієм (2) є коректним.

Розрахунок значень критерію (2) для випадку кремнієвих підкладок показано на рис. 9. Отже, діелектрики, що мають значення критерію K менше, ніж у діоксиду кремнію, а саме La_2O_3 , Dy_2O_3 , CeO_2 , Nd_2O_3 , Y_2O_3 , Er_2O_3 , і Ho_2O_3 , є придатними для заміни SiO_2 у кремнієвих МДН-структурах. Для вибору найкращого з них окрім значення критерію K слід враховувати значення діелектричної проникності та ряд інших факторів.

Так, найменшим значенням критерію K відповідають діелектрики Dy_2O_3 та CeO_2 . При цьому слід зазначити, що, по-перше, діелектрична проникність CeO_2 більше ніж у Dy_2O_3 . По-друге, тонкі плівки Dy_2O_3 на кремнієвих підкладках характеризуються поліморфною модифікацією кристалічної решітки. Це призводить до значних механічних напружень в діелектрику та до великих значень щільності поверхневих станів. Цього не спостерігається у випадку тонких плівок CeO_2 . З огляду на зазначене, найкращим претендентом для заміни SiO_2 в кремнієвих МДН-приладах є CeO_2 .

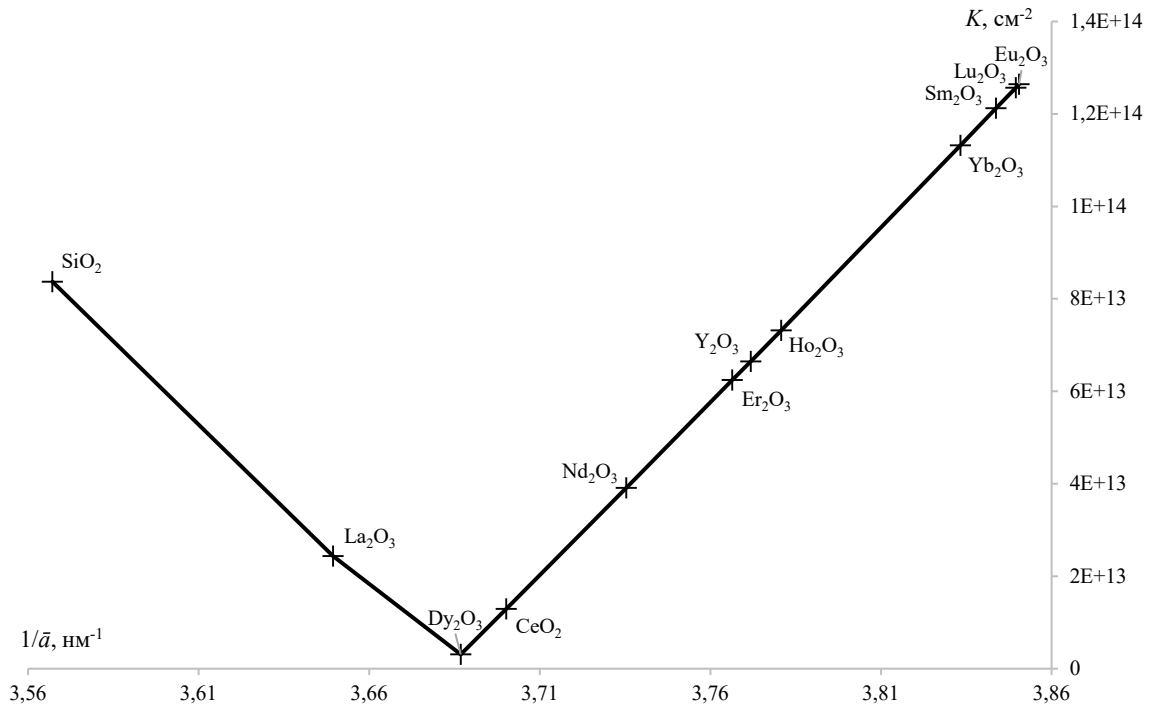


Рис. 9. Залежність значення критерію (2) для матеріалів-претендентів для кремнієвої підкладки від величини оберненої до середньої довжини зв'язку.



ВИСНОВКИ

Запропоновано критерій вибору діелектрика для МДН-структур на основі будь-якої напівпровідникової підкладки, який дозволяє, при інших рівних умовах, обрати такий діелектрик, що забезпечить найменший електричний заряд на межі розділу напівпровідник-діелектрик, порівняно з іншими претендентами. Завдяки введенню нового характеристичного параметру кристалічної речовини, а саме середньої довжини зв'язку, вперше отримано аналітичний вираз для роботи виходу електрона з кристалу.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] K. A. Valiev and A. A. Orlikovskii, "Ot mikro- i nanoelektroniki k tverdotelnym kvantovym kompiuteram [From micro- and nanoelectronics to solid-state quantum computers]," in *Bazovye lektsii po elektronike [Basic lectures on electronics]*, V. M. Proleiko, Ed. Moscow: Tehnosfera, 2009, pp. 72–95.
- [2] S. Kar, Ed., *High Permittivity Gate Dielectric Materials*, vol. 43. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, ISBN: 978-3-642-36534-8.
- [3] O. Engstrom, *The MOS System*. Cambridge: Cambridge University Press, 2014, ISBN: 9780511794490.
- [4] K. J. Hubbard and D. G. Schlom, "Thermodynamic stability of binary oxides in contact with silicon," *J. Mater. Res.*, vol. 11, no. 11, pp. 2757–2776, Nov. 1996, DOI: [10.1557/JMR.1996.0350](https://doi.org/10.1557/JMR.1996.0350).

- [5] G. Y. Krasnikov and N. A. Zaitsev, *Sistema kremnii-dioksid kremniya submikronnyh SBIS [The silicon-silicon dioxide system of submicron VLSI]*. Moscow: Tehnosfera, 2003, ISBN: 5-94836-008-3.
- [6] O. Engström *et al.*, "Navigation aids in the search for future high-k dielectrics: Physical and electrical trends," *Solid. State. Electron.*, vol. 51, no. 4, pp. 622–626, Apr. 2007, DOI: [10.1016/j.sse.2007.02.021](https://doi.org/10.1016/j.sse.2007.02.021).
- [7] S. Kar and R. Singh, "Correlation between the material constants of and a figure of merit for the high-k gate dielectrics," in *Electrochemical Society*. 28, 2003, pp. 13–24.
- [8] O. V. Borisov, L. N. Korolevych, and A. V. Shevliakova, "Fizicheskaya model mezuzlovogo aspekta prostranstvennoi kristallicheskoj reshyotki [Physical model of intersites aspect of space crystal lattice]," *Electron. Commun.*, vol. 21, no. 2, pp. 10–17, Nov. 2016, DOI: [10.20535/2312-1807.2016.21.2.83920](https://doi.org/10.20535/2312-1807.2016.21.2.83920).
- [9] H. V. Shevliakova, L. M. Korolevych, and O. V. Borisov, "Matematicheskaya model mezuzlovogo aspekta prostranstvennoi kristallicheskoj reshyotki [Mathematical model of intersites aspect of space crystal lattice]," *Electron. Commun.*, vol. 20, no. 5, pp. 6–14, May 2015, DOI: [10.20535/2312-1807.2015.20.5.69923](https://doi.org/10.20535/2312-1807.2015.20.5.69923).
- [10] L. Korolevych, A. Borisov, and H. Shevliakova, "Relationship between electron work function and crystal lattice constant," in *2017 IEEE First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, 2017, pp. 623–627, DOI: [10.1109/UKRCON.2017.8100327](https://doi.org/10.1109/UKRCON.2017.8100327).

УДК 621.382

Критерий выбора диэлектрика для кремниевых МДП-структур

Королевич Л. Н., ORCID [0000-0002-4006-280X](https://orcid.org/0000-0002-4006-280X)e-mail korolevych.lyubomyr@gmail.comБорисов А. В., к.т.н. проф., ORCID [0000-0003-4553-3591](https://orcid.org/0000-0003-4553-3591)e-mail a.borisov@kpi.ua

Национальный технический университет Украины

«Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского

Киев, Украина

Анотация—Рассматриваются вопросы общего подхода к поиску диэлектрика для кремниевых МДП-структур в качестве альтернативного диоксида кремния (SiO₂).

Показано, что на основе классической теории описания кристаллической решётки (узловой аспект) невозможно получить критерий выбора диэлектрика для МДП-структуры. Поэтому предложен новый –межузловой аспект – описания кристаллической решётки на основе которого получен общий критерий выбора диэлектрика для любой полупроводниковой подложки. Благодаря введению нового характеристического параметра кристаллического вещества – средней длины связи – получено аналитическое выражение для работы выхода электрона из кристалла.

Установлено, что наиболее пригодным для кремниевых МДП-структур является диоксид церия CeO₂.

Библ. 10, рис. 9.

Ключевые слова — МДП-структура; узловой аспект; междузловой аспект; средняя длина связи; критерий выбора; работа выхода.



The Criterion for Choosing an Insulator for Silicon MOS Structures

L. M. Korolevych, ORCID [0000-0002-4006-280X](https://orcid.org/0000-0002-4006-280X)

e-mail korolevych.lyubomyr@gmail.com

O. V. Borisov, PhD Prof., ORCID [0000-0003-4553-3591](https://orcid.org/0000-0003-4553-3591)

e-mail a.borisov@kpi.ua

National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”

Kyiv, Ukraine

Abstract—Nowadays, MIS structures based on silicon dioxide films have become the most widely used. However, the desire to reduce the channel length and the nano-scaling in electronics showed, that SiO₂ can't provide the specified MIS devices parameters and characteristics. This is due to the superfine insulator films problem. First of all, this can be solved by replacing SiO₂ with another insulator that meets certain requirements. Oxides of transition and rare-earth metals meets almost all of these requirements. However, the principle issue of insulator and semiconductor compatibility remains unsolved in terms of ensure their interface quality. Therefore, the researching purpose is to create a general approach to the selection of insulator which is an alternative to silicon dioxide. This insulator must provide a high quality of insulator-semiconductor interface.

In MIS structures, the main indicator of semiconductor-insulator interface is its density of the electric charge. Low values of the charge density at the semiconductor-insulator interface are corresponds to high quality of the interface. This is due to the fact that low interface charge density has low affecting on threshold voltage and provide higher its stability. In the first approximation, the surface states density is identically equal to the incomplete bonds density at semiconductor-insulator interface. Therefore, this parameter is selected as the basis of the insulator choosing criterion for a particular semiconductor substrate.

It is shown that the classical theory of crystalline lattice (site aspect) can't allow to obtain an analytical expression for the insulator choosing criterion for MIS structures. Therefore, a new form of description of a crystal lattice (intersite aspect) is proposed. Since the crystals differs not only by symmetry but also by the crystallographic orientation of their interface with the vacuum, then an infinite number of solutions about value of incomplete bonds density at the interface correspond to each pair of materials. For obtaining only the one solution by using insulator choosing criterion, a new characteristic parameter of the crystalline substance is introduced - the average bond length. To confirm the practical significance of the average bond length, the relationship between this parameter and electron work function is obtained. The experiment based on literary data of both electron work function and lattice constants was made. The experimental results proves both validity of the relationship and practical significance of the average bond length.

On the basis of the intersite aspect and the average bond length, general insulator choosing criterion for MIS structures on certain semiconductor substrate was obtained.

For replacement of silicon dioxide in silicon MIS devices, insulator was selected from suitable materials namely oxides of transition and rare-earth metals. The incomplete bonds density at the insulator-silicon interface was calculated for each of these materials. Analysis of the calculation results showed that, in accordance with the insulator choosing criterion, the most promising material is CeO₂.

The insulator choosing criterion for MIS structures on certain semiconductor substrate is proposed. Its allows, under other equal conditions, to choose the suitable insulator which will provide the least electric charge density at the insulator-semiconductor interface, in comparison with other pretenders. In case of a silicon substrate, such insulator is CeO₂. A new characteristic parameter of a crystalline materials is introduced - the average bond length. The analytical expression, which get the relationship between this parameter and the electron work function, is obtained.

The obtained results provide an opportunity to make choices insulator for MIS devices based on not only silicon substrates, but also any other semiconductor materials. The proposed insulator choosing criterion can serve as the basis for build new criteria. This ones can help in solving more complicated problems like choosing insulator for MIS devices based on semiconductor substrate with a certain crystallographic orientation.

Bibl. 10, Fig. 9.

Keywords — MOS-structure; nodal aspect; inter-node aspect; average coupling length; criterion of choice; electron work function.

