

©1994 г.

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ДОЗЫ АМОРФИЗАЦИИ КРЕМНИЯ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Г.А.Гусаков, А.П.Новиков, В.М.Анищук

Белорусский государственный университет,

220080, Минск, Беларусь

(Получена 14 февраля 1994 г. Принята к печати 1 апреля 1994 г.)

Предложена модель ионно-индуцированной аморфизации полупроводника с учетом как природы создаваемых радиационных нарушений, так и структуры конечного аморфного состояния. Результаты машинного моделирования для кремния, облученного ионами As, P и В, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Вопросы аморфизации полупроводниковых материалов при ионной имплантации широко изучаются на протяжении последних пятнадцати лет. Многочисленные экспериментальные данные позволяют сделать вывод, что кристаллические полупроводники переходят в аморфное состояние при достижении критической концентрации дефектов того или иного типа. Исходя из этого, предложено несколько моделей, описывающих зависимость критической дозы аморфизации от температуры имплантации [1-3]. Однако, несмотря на достаточно хорошее совпадение теоретических зависимостей с экспериментальными результатами, эти модели не дают четкой картины процессов, происходящих при ионно-индуцированной аморфизации. Феноменологический характер существующих подходов, очевидно, обусловлен отсутствием в них информации о природе создаваемых радиационных нарушений и структуре конечного аморфного состояния.

В настоящей работе предпринята попытка устранить эти недостатки. В развиваемом подходе в расчет принимались процессы введения нарушений ионными пучками, их структура и термическая стабильность. Критерий «аморфности» облучаемой области определялся на базе перколяционного подхода [4-5]. В качестве примера был выбран кремний, как наиболее изученный полупроводниковый материал.

Известно, что основными типами нарушений, создаваемых при имплантации ионов в Si, являются разупорядоченные области, состоящие преимущественно из вакансий, и VV -центры, образующиеся

при перекрывании разупорядоченных областей [6]. Такие области в кремнии создаются первично-выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E > (1-2) \text{ КэВ}$. В работе [7] на основе данных машинного моделирования процессов радиационного дефектообразования в кремнии по методу Монте-Карло показано, что ПВА с энергией $(6-8) \text{ КэВ}$ с вероятностью, близкой к единице, создают две и более изолированные разупорядоченные области. Таким образом, размеры этих областей ограничены энергией ПВА: $(1-2) \text{ КэВ} < E < (6-8) \text{ КэВ}$. Поскольку области образуются собственными выбитыми атомами, процессы, происходящие при их возникновении, не зависят от сорта налетающего иона. Для определения структуры разупорядоченных областей в кристаллах кремния достаточно рассмотреть каскад ПВА с энергией в интервале $(1-2) \text{ КэВ} < E < (6-8) \text{ КэВ}$.

В основу количественного анализа структуры отдельной разупорядоченной области положена модель [8]. В результате прохождения ПВА с энергией $E > (1-2) \text{ КэВ}$ на начальном этапе образуется сгусток вакансий. Эти вакансии затем покидают поврежденную область, диффундируя в матрицу, или связываются в вакансии. Соотношение указанных процессов описывается системой уравнений

$$\begin{cases} \frac{dn_V}{dt} = -2\alpha n_V^2 - D_V \frac{dn_V}{dr} dS, \\ \frac{dn_{V_2}}{dt} = \alpha n_V^2, \end{cases} \quad (1)$$

где n_V и n_{V_2} — концентрации вакансий и дивакансий соответственно, D_V — коэффициент диффузии вакансий.

$$D_V = \frac{1}{8} a^2 \nu f_V \exp\left(\frac{\Delta S_m}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_m^{(V)}}{kT}\right), \quad (2)$$

$$\alpha = a\nu\sigma_1 \exp(-E_a/kT). \quad (3)$$

Здесь a — постоянная решетки, ν — частота колебания атома в узле решетки, $f_V = 1/2$ (для алмазной решетки) — коэффициент корреляции, $\Delta S_m = 13k$ — энтропия самодиффузии для Si, $E_m^{(V)}$ — энергия активации вакансии, σ_1 — сечение образования дивакансий, E_a — барьер образования дивакансий. Член $D_V (dn_V/dr) dS$ в (1) описывает диффузию вакансий через поверхность S разупорядоченной области.

Система (1) решалась в сферических координатах. Исходные параметры (начальное количество вакансий N_0 и радиус разупорядоченной области Δ) определялись для «средней» разупорядоченной области, характерной для данного иона, при помощи машинного моделирования (программа TRIM-92). Поскольку энергия ПВА, образующих изолированную разупорядоченную область, мала (для ионов средних масс и тяжелых ионов «средняя» область создается ПВА с энергией $E = 2.5 \text{ КэВ}$), можно считать, что объем индивидуального субкаскада близок к среднестатистическому. Таким образом, объем разупорядоченной области можно считать равным среднестатистическому объему каскада, соответствующего ПВА. Однако количественные расчеты по системе (1) требуют знания барьера образования дивакансий E_a .

Таблица 1. Количество дивакансий L в средней разупорядоченной области для кремния, облученного ионами В, Р и As с $E = 150$ КэВ, полученное при решении системы (1)

Температура мишени T , К	L_B $\Delta = 1.1$ нм, $N_0 = 24$	L_P $\Delta = 1.52$ нм, $N_0 = 32$	L_{As} $\Delta = 1.56$ нм, $N_0 = 36$
200	11.8	15.7	17.6
250	10.2	13.4	15.3
300	6.8	9	10.4
350	3.5	4.6	5.5
400	1.8	2.3	2.7
450	0.8	1	1.3
500	0.4	0.5	0.6

Для оценок E_a использовался подход, изложенный в работе [9], в котором система рассматривалась как результат суперпозиции сильных ковалентных связей. Согласно этому подходу, для образования вакансии необходимо затратить энергию, равную двум энергиям диссоциации связи $2D$. Но оставшиеся 4 свободные связи разбиваются на две пары. Таким образом, запасенная энергия для одной вакансии равна

$$H_F^{(V)} = 2D - 2U_B, \quad (4)$$

где U_B — энергия, полученная в результате спаривания оборванных связей. Аналогичный подход для дивакансий дает выражение

$$H_F^{(V_2)} = 3D - 3U_B. \quad (5)$$

Барьер образования дивакансии определяется следующим образом:

$$E_a = H_F^{(V_2)} + E_b^{(V_2)} - 2H_F^{(V)}, \quad (6)$$

где $E_b^{(V_2)}$ — энергия связи вакансии в дивакансии. Известно, что

$$E_b^{(V_2)} \approx D. \quad (7)$$

Отсюда следует, что

$$E_a \approx U_B, \quad (8)$$

для кремния $U_B \sim 0.1$ эВ. Результаты расчетов по системе (1) для ионов В, Р и As с энергией $E = 150$ КэВ приведены в табл. 1, которая дополнена значениями параметров N_0 и Δ .

Принимая во внимание критерий аморфизации [5], из которого следует, что концентрация дивакансий, необходимая для перевода в аморфное состояние полупроводника с алмазной решеткой, порядка 3%, можно сделать вывод, что при $T < 350$ К для образования VV -центра достаточно однократного перекрытия разупорядоченных областей. Таким образом, процессы, происходящие в имплантируемом слое, могут

быть описаны системой

$$\begin{cases} \frac{dN_{dr}}{dt} = jK \left(1 - \frac{2N_{dr}B}{A}\right) - \delta_{V2}N_{po}, \\ \frac{dN_{VV}}{dt} = \frac{N_{dr}B}{A} jK - \delta_{VV}N_{VV}, \\ \frac{dN_{V2}}{dt} = LjK \left(1 - \frac{2N_{dr}B}{A}\right) + Q\delta_{VV}N_V - \delta_{V2}N_{V2}, \end{cases} \quad (9)$$

где N_{dr} , N_{VV} и N_{V2} — количество разупорядоченных областей, VV -центров и дивакансий соответственно, j — плотность тока пучка, B — объем средней разупорядоченной области, A — объем имплантируемого слоя, K — среднее число областей, создаваемых одним ионом, L — количество дивакансий в средней разупорядоченной области при данной температуре, δ_{V2} и δ_{VV} — коэффициенты, описывающие распад дивакансий и VV -центров:

$$\delta_{V2} = \nu \exp\left(-E_b^{(V2)}/kT\right), \quad (10)$$

$$\delta_{VV} = \nu \exp\left(-E_b^{(VV)}/kT\right). \quad (11)$$

Выражение $(N_{dr}B/A)jK$ описывает вероятность перекрывания разупорядоченных областей, а член $Q\delta_{VV}N_{VV}$ определяет образование «вторичных» дивакансий за счет взаимодействия продуктов распада VV -центров. Коэффициент Q равен среднему количеству вторичных дивакансий на один распавшийся VV -центр. Для определения Q решалась следующая система:

$$\begin{cases} \frac{dn_V}{dt} = G - \gamma n_V n_i - 2\alpha n_V^2, \\ \frac{dn_{V2}}{dt} = \alpha n_V^2, \end{cases} \quad (12)$$

где G — скорость генерации вакансий за счет распада VV -центров, γ — коэффициент аннигиляции пары вакансия-межузельный атом.

$$\gamma = \alpha\nu\sigma_2 \exp(-E_\gamma/kT), \quad (13)$$

где σ_2 — сечение аннигиляции и E_γ — барьер аннигиляции.

Образование вторичных дивакансий становится значительным при $T \geq 350$ К, когда невозможно образование стабильных VV -центров. При этих условиях скорость G можно принять постоянной. Она определяется скоростью введения VV -центров. Решая систему (12), получаем

$$Q = \frac{L}{1 + \frac{\sigma_2}{2\sigma_1} \exp\left(\frac{E_a - E_\gamma}{kT}\right)}. \quad (14)$$

Для определения E_γ использовался тот же подход, что и для E_a :

$$E_\gamma = 2U_B - E_I, \quad (15)$$

где E_I — дополнительная энергия, вносимая в решетку междузельным атомом.

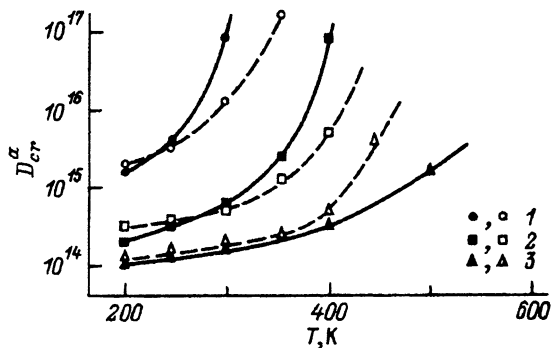


Рис. 1. Кривые температурной зависимости критической дозы аморфизации кремния D_{cr}^{α} , полученные по данным [10] (сплошные линии) и при решении системы (9) для $E = 150$ КэВ и $j = 2 \mu\text{A}/\text{см}^2$ (штриховые). Облучение ионами: 1 — As^+ , 2 — P^+ , 3 — B^+ .

Параметры A , B и K для решения системы (9) определялись при помощи программы TRIM-92. Для нахождения порога аморфизации использовался подход [5], в котором критерием аморфности облучаемой области служит отсутствие в ней кристаллических кластеров, состоящих более чем из N атомов. Из результатов [5] следует, что критическая концентрация дивакансий и VV -центров, необходимая для перевода кристаллического кремния в аморфное состояние, составляет 3% и 0.76% соответственно.

Предложенная математическая модель дает хорошее совпадение с экспериментальными данными [10] для легких частиц и частиц средних масс (рис. 1). Для тяжелых частиц при $T > 300$ К модель дает завышенные критические дозы аморфизации. По-видимому, это объясняется тем, что для частиц, тяжелее P , велика вероятность перекрывания разупорядоченных областей, созданных вдоль трека одного иона, особенно в конце пробега. Это приводит к образованию протяженных аморфных областей. Такие области имеют энергию активации отжига, отличную от VV -центров. Их следует рассматривать как отдельный тип дефектов. Введение в рассматриваемую систему уравнений, описывающих генерацию аморфных областей, их распад и взаимодействие продуктов распада, очевидно, позволит распространить действие модели и на тяжелые частицы.

Таблица 2. Количество дивакансий и VV -центров в имплантированном слое, полученное при помощи системы (9) для кремния, облученного ионами P с $E = 150$ КэВ, $j = 2 \mu\text{A}/\text{см}^2$ и $D = 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^2$

Температура мишени T , К	N_{VV}	N_{V_2}
303	$4.6 \cdot 10^{15}$	$1.2 \cdot 10^{16}$
323	$1.4 \cdot 10^{15}$	$2.1 \cdot 10^{16}$
348	$1.5 \cdot 10^{14}$	$2.0 \cdot 10^{16}$
373	$1.9 \cdot 10^{13}$	$1.3 \cdot 10^{16}$
403	$2.4 \cdot 10^{12}$	$6.6 \cdot 10^{15}$
433	$3.1 \cdot 10^{11}$	$1.4 \cdot 10^{15}$
473	$1.0 \cdot 10^{10}$	$1.1 \cdot 10^{14}$
503	$5.6 \cdot 10^8$	$1.4 \cdot 10^{13}$

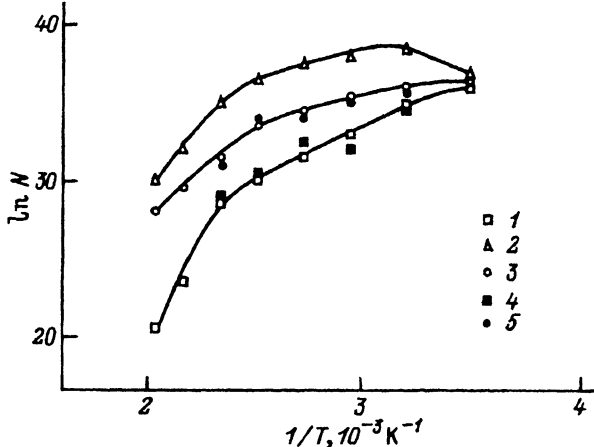


Рис. 2. Зависимость количества дефектов в имплантированном слое от обратной температуры имплантации для Si, облученного ионами P^+ с $E = 150 \text{ КэВ}$ и $j = 2 \mu\text{А}/\text{см}^2$.

1 — теоретические значения количества VV -центров; 2 — теоретические значения количества дивакансий; 3 — оценочное количество рассеивающих центров (типа VV -центра), полученное с учетом того, что сечение рассеяния на VV -центре на порядок больше, чем на дивакансии; 4 — количество VV -центров по данным ЭПР; 5 — количество рассеивающих центров по данным каналирования.

При помощи системы (9) были также проверены результаты нашего эксперимента по определению температурной зависимости дефектообразования в кремнии. Серия пластин кремния типа КЛБ-10 с ориентацией $\langle 111 \rangle$ облучалась ионами P^+ с энергией $E = 150 \text{ КэВ}$, плотностью тока пучка $j = 2 \mu\text{А}/\text{см}^2$ и дозой $D = 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Температура мишеней изменялась в интервале (300–500) К и поддерживалась с точностью 5 К. Для нахождения относительной концентрации дефектов образцы после облучения исследовались методами каналирования ионов гелия, ЭПР и ИК-спектроскопии. В табл. 2 приведены значения концентрации дивакансий и VV -центров, полученные для условий нашего эксперимента при помощи системы (9). Изменение этих концентраций с температурой показано на рис. 2 сплошными линиями. Кроме того, была проведена оценка зависимости числа рассеивающих центров от температуры. Предполагалось, что сечение рассеяния каналированных ионов на VV -центре на порядок больше, чем на дивакансии. Экспериментальные значения числа VV -центров, полученные по данным ЭПР, и числа рассеивающих центров, полученные по данным каналирования, приведены на рис. 2. Видно, что экспериментальные результаты достаточно хорошо совпадают с теоретическими. Это говорит о возможности применения предложенного подхода для описания процессов накопления радиационных нарушений.

В заключение необходимо подчеркнуть, что учет в данной модели конкретных типов нарушений, преимущественно возникающих в кремнии под воздействием ионных пучков, и использование перколяционной теории для определения порога аморфизации позволяют во многом устранить феноменологический характер существующих подходов к вопросам аморфизации полупроводников.

Список литературы

- [1] J.F. Gibbons. Proc. IEEE, **60**, 1062 (1972).
- [2] F.F. Morehead, B.L. Crowder. Rad. Eff., **6**, 27 (1970).
- [3] J.R. Dennis, E.B. Hale. J. Appl. Phys., **49**, 1119 (1978).
- [4] V.K.S. Shante, S. Kirkpatrick. Adv. Phys., **20**, 325 (1971).
- [5] А.П. Новиков, Г.А. Гусаков. Тез. XXIII Межнац. совещ. по физике взаимод. заряж. частиц с кристаллами (Изд-во Моск. ун-та, 1993), с. 78.
- [6] Физические процессы в облученных полупроводниках, под ред. Л.С.Смирнова (Новосибирск, Наука, 1977).
- [7] Ф.Ф. Комаров, В.Г. Лобанок, А.П. Новиков, А.И. Урванович. АН БССР. Сер. физ-мат. наук, № 3, 68 (1990).
- [8] Н.А. Ухин. ФТП, **6**, 931 (1972).
- [9] R.A. Swalin. J. Phys. Chem. Sol., **18**, 290 (1961).
- [10] F.F. Morehead, B.L. Crowder et al. J. Appl. Phys., **43**, 1112 (1972).

Редактор Т.А. Полянская

On temperature dependence of the crystal doze silicon amorphysation at ion implantation

G.A. Gusakov, A.P. Novikov and V.M. Anistchik

Belorussian State University, 220080, Minsk, Belorussia
