

©1995 г.

К ВОПРОСУ ОБ ОБРАЗОВАНИИ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ ПРИ ТОРМОЖЕНИИ БЫСТРЫХ ИОНОВ В КРЕМНИИ

А.М.Иванов, И.Н.Ильяшенко, Н.Б.Строкан, Б.Шмидт[†]

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021, Санкт-Петербург, Россия

[†]Институт физики ионных пучков и исследования материалов Исследовательского центра, г.Россендорф, Дрезден, Германия, D-01314 (Получена 23 августа 1994 г. Принята к печати 5 сентября 1994 г.)

Высокоочищенный Si *n*-типа проводимости с удельным сопротивлением ($2 \div 6.5$) кОм·см облучался α -частицами ^{238}Pu и осколками деления ^{252}Cf (средние энергии 5.48 и 80 МэВ соответственно). Использовались малые дозы, когда отсутствовало перекрытие треков ионов. Путем математического моделирования каскада столкновений с атомами решетки Si рассмотрены особенности генерации пар Френкеля в случае легких (α -частицы) и тяжелых (осколки деления) ионов. Методом DLTS изучались глубокие уровни, возникающие в запрещенной зоне Si. Показано, что системы глубоких уровней для случая легких и тяжелых ионов совпадают. Сопоставлен вклад уровней в генерационную составляющую тока $p^+ - n$ -структур. Наблюдаемое различие в 10^3 раз в приращениях тока ($4.5 \cdot 10^{-5}$ нА/ион для осколков и $5 \cdot 10^{-8}$ нА/част. для α -частиц) объяснено условиями рекомбинации в треках ионов первичных пар Френкеля.

Введение

К настоящему времени накоплены обширные данные в области радиационных нарушений структуры в полупроводниках. Наиболее полная систематизация проведена для случая моноатомных Ge и Si (см., например, обзор [1]). Установлено, что эффективность дефектообразования определяется прежде всего тем, насколько полно происходит диссоциация первично созданных пар Френкеля: вакансия-межузельный атом]. В ходе диссоциации возможно изменение знака заряда компонент пары. Последнее определяет характер взаимодействия вакансий и межузельных атомов, а также позволяет указать расстояние между компонентами, критичное для их рекомбинации. В этой связи решающими оказываются два фактора: распределение первично созданных пар Френкеля по расстоянию между компонентами и наличие электронов и дырок, обуславливающих перезарядку.

В работе рассматривается взаимодействие с решеткой Si легких и тяжелых ионов, в роли которых выступают α -частицы ^{238}Pu и осколки деления ^{252}Cf .

В качестве исходного экспериментального факта возьмем соотношение между приращениями обратного тока диодной структуры после облучения некоторой дозой α -частиц либо осколков деления. Подчеркнем, что дозы выбираются малыми в смысле отсутствия перекрытия треков отдельных частиц. Ранее нами было получено, что ток, генерируемый в области электрического поля $p^+ - n$ -структуры, в пересчете на одну α -частицу возрастает с темпом $\Delta I = 5 \cdot 10^{-8}$ нА/част. [2,3]. В случае осколков эта величина составила $4.5 \cdot 10^{-5}$ нА/част., т.е. оказалась большей в 10^3 раз.

Приведенная нами величина ΔI отражает наличие уровней вблизи середины запрещенной зоны и является косвенной характеристикой вводимых радиационных дефектов. Поэтому далее мы проведем моделирование кинематики каскадов столкновений в случае осколка делений ^{252}Cf и сопоставим с результатами для торможения α -частиц [4].

Экспериментальные результаты

1. Формирование радиационных дефектов происходит в ходе сложной ветвящейся цепи событий, которая начинается при образовании падающим ионом первичных выбитых атомов (ПВА). Последние при последующих столкновениях с атомами решетки образуют вторичные атомы отдачи (АО), рождающие в свою очередь третичные атомы и т.д. При этом энергия передается как атомной решетке, так и электронной подсистеме, возбуждение которой приводит к неупругим потерям энергии (ионизации).

В литературе (см., например, [5]) принята следующая классификация событий. Пусть в упругом столкновении налетающий атом передает энергию E_2 атому отдачи и имеет после столкновения энергию E_1 . Кристаллическая решетка характеризуется значением средней энергии смещения атома E_d . Тогда возможны следующие случаи:

$$E_1 > E_d, \quad E_2 > E_d,$$

что соответствует образованию вакансии;

$$E_1 < E_d, \quad E_2 > E_d,$$

когда налетающий атом замещает атом решетки;

$$E_1 > E_d, \quad E_2 < E_d,$$

что приводит к возбуждению колебаний решетки;

$$E_1 < E_d, \quad E_2 < E_d,$$

когда возникает межузельный атом внедрения. Сумма вакансий и атомов замещения составляет общее число смещений.

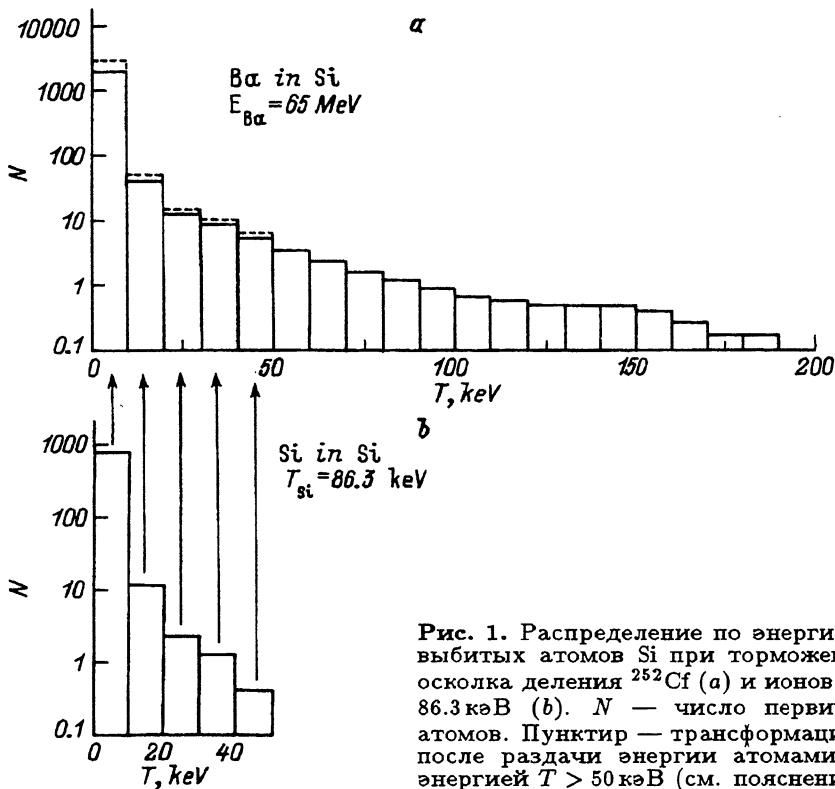


Рис. 1. Распределение по энергии T первично выбитых атомов Si при торможении тяжелого осколка деления ^{252}Cf (а) и ионов Si с энергией 86.3 кэВ (б). N — число первично выбитых атомов. Пунктир — трансформация спектра (а) после раздачи энергии атомами отдачи Si с энергией $T > 50$ кэВ (см. пояснение в тексте).

В нашем случае вследствие моноатомности решетки Si атомы замещения не являются дефектами. Таким образом, основной характеристикой повреждений решетки служит среднее число вакансий на падающий ион.

Для непосредственного компьютерного моделирования развивающегося каскада радиационных повреждений использовался метод Монте-Карло согласно программе TRIM. Физическая концепция программы изложена в [5]. В задачу входило установление основных количественных характеристик дефектообразования (среднее число дефектов на падающий ион, средняя энергия образования вакансии), а также исследование общих закономерностей развивающегося каскада атомных столкновений.

На рис. 1,а представлен спектр энергий ПВА кремния при торможении тяжелого осколка ^{252}Cf ($M = 138$, $E = 65$ МэВ).¹ В спектре учтены только те столкновения, которые привели к образованию вакансии. Для энергии смещения атома Si было принято значение $E_d = 40$ эВ, согласно работе [6]. Последнее заметно превышает используемую ранее величину $E_d \approx 25$ эВ. Однако энергия 40 эВ соответствует последним экспериментам и расчетам в модели, предполагающей гауссово рас-

¹ В спектре осколков деления ^{252}Cf имеются две группы энергий со средними значениями 65 и 95 МэВ, соответственно «тяжелые» и «легкие» осколки, в качестве которых были взяты ионы Ва и Cd.

пределение атомов по E_d в решетке Si. При $E_d = 40$ эВ вероятность смещения атома Si принимается равной единице (см. [1]).

Распределение ПВА по сообщенной им энергии T близко к виду $1/T^2$, но спадает несколько слабее в области высоких T . Значительная величина полной переданной энергии $T \simeq 5.5$ МэВ указывает на преобладающую роль в образовании вакансий каскадов столкновений, следующих за первичными актами. В их ходе первоначальный спектр (рис. 1, а) будет трансформироваться в некоторый спектр энергии вблизи порога дефектообразования.

Для представления динамики этого процесса использовалась следующая процедура. Форма спектра ПВА (рис. 1, а) представлялась в виде ступеней (сплошные линии). Далее интервал максимальных энергий ΔT_1 заменялся конкретным значением \bar{T}_1 , соответствующим центру тяжести данного участка спектра. Затем определялся спектр торможения атомов Si с энергией \bar{T}_1 (рис. 1, б) и суммировался с ПВА, в котором интервал ΔT_1 уже не фигурировал (рис. 1, а, пунктирные линии). В отношении результирующего спектра повторялась указанная выше процедура применительно к следующему со стороны высоких энергий участку ΔT_2 . Дополнительно к спектрам торможения ионов Si различной энергии в Si (рис. 1, б) определялись зависимости полной энергии ε_{rec} , передаваемой атомам отдачи, а также число образуемых вакансий N_V от энергии ионов Si E_{Si} (рис. 2).

В итоге отслеживание динамики каскада столкновений позволило оценить вклад в образование вакансий АО различных энергий. Последнее дает возможность судить о распределении пар Френкеля по расстоянию между компонентами, что существенно для оценки числа аннигилирующих близких пар.

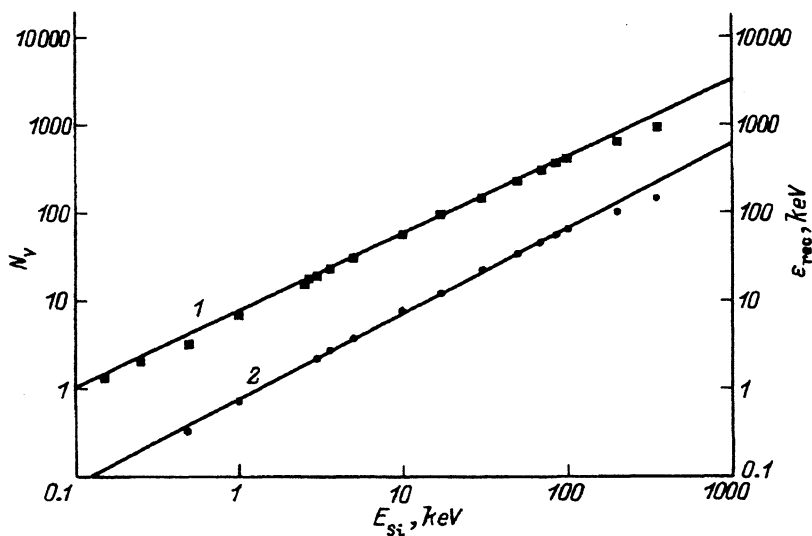


Рис. 2. Интегральные характеристики каскада торможения ионов Si в решетке Si: 1 — число образуемых вакансий N_V . Сплошная линия соответствует соотношению (2) в тексте. 2 — полная переданная атомам отдачи энергия ε_{rec} . Сплошная линия соответствует соотношению (1) в тексте.

Остановимся вначале на рис. 2. Зависимость переданной АО энергии ϵ_{rec} от энергии иона E_{Si} в интервале до 100 кэВ близка к линейной:

$$\epsilon_{\text{rec}} = 0.64E_{\text{Si}}. \quad (1)$$

Отметим, что величина ϵ_{rec} получается вычитанием из E_{Si} затрат энергии рассматриваемым ионом на ионизацию, а также на рождение фононов в столкновениях с передачей порций энергии, меньших E_d . Поэтому линейная связь $\epsilon_{\text{rec}}(E_{\text{Si}})$ указывает на постоянство в определенном интервале E_{Si} суммарного вклада упомянутых двух механизмов. Число образуемых вакансий N_V хорошо аппроксимируется степенной функцией

$$N_V = 7.8(E_{\text{Si}} [\text{кэВ}])^{0.9}. \quad (2)$$

Следовательно, эффективная энергия образования вакансий $\langle \epsilon_V \rangle = dE_{\text{Si}}/dN_V$ зависит от энергии иона Si, инициировавшего каскад столкновений. Величина $\langle \epsilon_V \rangle$ составляет от 142 эВ при $E_{\text{Si}} = 1$ кэВ до 226 эВ при $E_{\text{Si}} = 100$ кэВ. Однако из этого факта не следует, что для смещения атома Si из узла приходится затратить энергию, превышающую E_d в 3.6 и 5.6 раз. Рост $\langle \epsilon_V \rangle$ обусловлен тем, что в действительности возрастающие с энергией E_{Si} затраты на ионизацию не полностью компенсируются снижением потерь на генерацию фононов. Имеющееся незначительное (рис. 2, кривая 2) возрастание величины $(E_{\text{Si}} - \epsilon_{\text{rec}})/E_{\text{Si}}$ с энергией иона сильнее проявляется в каскадах с большим числом столкновений, т.е. при больших значениях E_{Si} .

В отношении количества образованных вакансий N_V (соответственно, межузельных атомов) анализ показывает, что в треке тяжелого осколка (Ва) первоначально возникает около $3.7 \cdot 10^4$ атомов. Как отмечалось во Введении, диссоциируют далеко не все пары Френкеля, а лишь достаточно отдаленные. Причем критическое расстояние r_{cr} находится в сильной зависимости от происшедшей перезарядки компонент. Согласно последним данным [1], для нейтральных в момент рождения компонент $[V^0 I^0]$ расстояние $r_{\text{cr}} > 2a$. При захвате вакансией электрона пара $[V^- I^0]$ диссоциирует при $r_{\text{cr}} > 4a$. При полной перезарядке для пары $[V^- I^+]$ расстояние возрастает и $r_{\text{cr}} > 7a$. Здесь a — постоянная решетки. В треках ионов происходит интенсивная генерация пар электрон-дырка. При этом их концентрация в начальный момент времени (до диффузионного расплывания пакета) составляет $\Delta n = \Delta p \simeq 10^{16} \text{ см}^{-3}$ для α -частиц и $\Delta n = \Delta p \simeq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ в случае осколков. Таким образом, имеются все условия для перезарядки компонент пар Френкеля.

В связи со сказанным были определены количества пар вакансия-межузельный атом] со взаимным расстоянием более 20 и 35 Å. Для этого учитывались пары, рожденные при энергиях атома отдачи более 400 эВ и более 1 кэВ (см. таблицу). В результирующем небольшом количестве далеких пар проявилась закономерность, отраженная на рис. 1: падение вероятности столкновений с ростом переданной энергии, близкое к квадратичному закону. Рассмотрение по вышеописанному алгоритму было проведено также для легких осколков и α -частиц. В последнем случае частично использовались результаты работы [4].

Основные характеристики образования в Si пар вакансий-[межузельный атом] при торможении α -частиц и осколков деления ^{252}Cf

Тип иона	E , МэВ	ϵ_{rec}/E , %	N_V , шт.	Количество ПА	$N_V(r>4a)$, шт.	$N_V(r>7a)$, шт.	ΔI , нА/ион
Ва (тяжелый осколок)	65	8	$3.7 \cdot 10^4$	2200	2998	1197	-
Cd (легкий осколок)	95	4.6	$3.0 \cdot 10^4$	1630	2350	928	-
\bar{f} (усреднение по осколкам)	80	6.3	$3.35 \cdot 10^4$	1915	2674	1062	$4.5 \cdot 10^{-5}$
α -частица	5.5	0.2	92	37.4	6.4	2.15	$5.0 \cdot 10^{-8}$

Примечание. Здесь $r \equiv r_{\text{сг}}$.

Итоговые данные сведены в таблицу, позволяющую сопоставить характер взаимодействия α -частиц и осколков деления ядер с решеткой Si.

2. Кроме числа образованных вакансий, указанное вначале расхождение приблизительно в 10^3 раз следующих величин: приращения генерационного тока в расчете на одну α -частицу от приращения, рассчитанного на один осколок деления, — может быть связано с различиями в последующем дефектообразовании. Поэтому важно сравнить систему радиационных дефектов от осколков деления с дефектами, наблюдаемыми нами ранее после облучения кремниевых p^+ - n -структур α -частицами [7].

Так как осколки деления имеют относительно небольшой пробег в Si (порядка 15 мкм), для облучения с последующим снятием спектров методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней (в дальнейшем называемых DLTS-спектрами) использовались планарные детекторы из относительно низкоомного Si (с концентрацией $N_d - N_a \simeq 7 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}$, где $N_d - N_a$ — разностная концентрация доноров и акцепторов). Облучение проводилось в вакууме со стороны p^+ -области дозой $\Phi \simeq 10^7 \text{ част./см}^2$. Периферия p^+ - n -перехода защищалась диафрагмой. Установка для измерения DLTS-спектров имела рабочую частоту 100 кГц и окно скоростей, определяемое временным интервалом 38.8 мс. На рис. 3 представлен DLTS-спектр в случае облучения осколками деления. Этот спектр полностью повторяет DLTS-спектр, полученный после облучения α -частицами [7]. Напомним, что пик E_1 связан с А-центром и частично с комплексом $C_i - C_s$ (межузельный углерод и углерод в узле решетки кремния). Пики E_2 , E_4 принадлежат двухзарядной и однозарядной дивакансиям (в E_4 может присутствовать Е-центр). Дефект E_3 связан с парой $C_i - P_s$, где P_s — легирующая примесь, фосфор. Уровни в нижней половине запрещенной зоны, наблюдаемые в режиме с инжекцией дырок, связаны с углеродом. Дефект H_1 — это междузельный углерод, H_2 — комплекс $C_i - O_i$, где O_i — междузельный кислород.

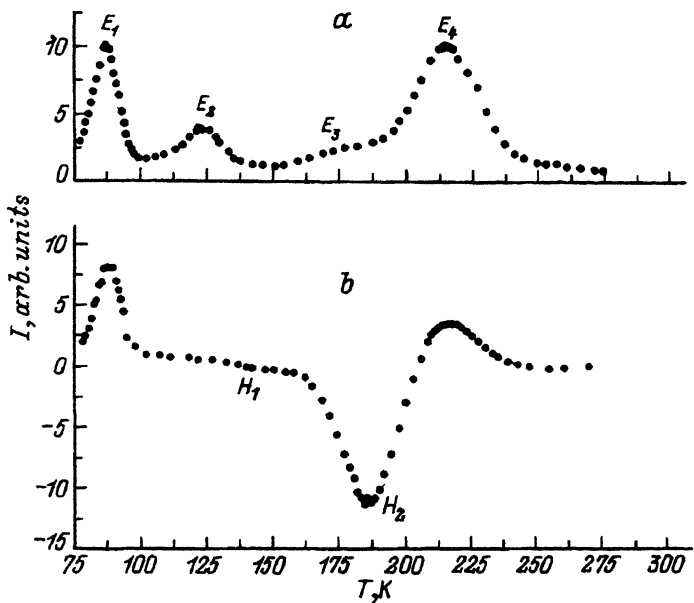


Рис. 3. Спектры сигнала DLTS I при облучении осколками. Режимы измерения: a — без инъекции, b — с инъекцией неосновных носителей для определения уровней в нижней половине зоны. Природа уровней объяснена в тексте.

Полное совпадение спектров радиационных дефектов для осколков деления и α -частиц указывает на образование «простых» вторичных дефектов. Здесь необходимо отметить, что при облучении осколками в принципе возможно образование и сложных дефектов типа разупорядоченных областей (РО). Тогда следует ожидать, что возникновение РО проявится в смещении пиков в DLTS-спектре по температуре, а также в образовании новых, ранее не наблюдавшихся, глубоких уровней. Так, в DLTS-спектрах после облучения нейтронами нами наблюдалось смещение пика E_4 в сторону более низких температур. Согласно представлениям, развитым в работе [8], это связывается именно с наличием в кристалле крупномасштабных дефектов, например, РО. При этом дефекты, расположенные в примесно-дефектной оболочке РО, имеют другие параметры по сравнению с теми же дефектами структуры, находящимися в матрице кристалла.

Причиной отсутствия расхождения в системах наблюдаемых уровней дефектов, возникающих от легких и тяжелых ионов, может являться малое количество сложных дефектов. Например, если доля простых дефектов, связанных с РО, составляет (10–15)% от их общего числа, то трудно ожидать заметного смещения пиков в DLTS-спектрах. Поэтому рассмотрим картину торможения осколков в плане возникновения РО.

3. Проверим, не создает ли одиночный тяжелый ион разупорядоченных областей в Si. Примем за РО, согласно [9], область с линейными размерами порядка 10^2 \AA и $N_V = (10^{19} - 10^{20}) \text{ см}^{-3}$. Другими словами, объем РО считается равным примерно 10^{-18} см^3 с количеством нарушений от 10 до 100.

Рассмотрим сначала, может ли создаваться РО в каскаде торможения АО Si на периферии трека иона. Возьмем для энергии значение 5 кэВ, что соответствует пробегу 100 \AA .² При $E_{\text{Si}} = 5 \text{ кэВ}$ рассеяние иона происходит в объеме, близком к выбранной нами величине 10^{-18} см^3 . Число создаваемых вакансий составляет $N_V = 30$. Рассматривая неполную перезарядку пар Френкеля, получаем долю не прорекомбинировавших пар менее 10%, что недостаточно для образования РО.

Рассмотрим теперь возможность возникновения РО непосредственно на отрезке трека тяжелого иона, скажем Ва ($E = 65 \text{ МэВ}$, $M = 138$). Область дефектообразования для тяжелых ионов сильно смещена к концу трека, т.е., если в треке появляются РО, то они должны находиться ближе к его концу. Выделим последние 1500 \AA трека иона Ва, где плотность передаваемой решетке энергии в проекции на направление движения составляет около 200 эВ/\AA . Это в 4 раза превышает рассмотренный выше случай торможения Si с $E = 5 \text{ кэВ}$. Однако передача энергии АО идет такими порциями, что АО Si разлетаются по радиусу на значительное расстояние. В итоге в пересчете на объем порядка 10^{-18} см^3 оказывается количество вакансий, близкое к случаю $E_{\text{Si}} = 5 \text{ кэВ}$. Однако если выделить последние 250 \AA пробега Ва, когда АО кремния менее энергичны, то в цилиндре диаметром 100 \AA возникает уже порядка 80 вакансий на 100 \AA пробега. С учетом слабой ионизации и, соответственно, темпа перезарядки в конце пробега тяжелого иона можно сказать, что вероятность образования РО на последних $(200-300) \text{ \AA}$ трека иона Ва велика.

Подобные же оценки для иона Cd, который был взят в качестве легкого осколка деления ^{252}Cf ($E = 95 \text{ МэВ}$, $M = 113$), привели к аналогичному результату.

Таким образом, можно сделать вывод, что количество образованных разупорядоченных областей в Si по порядку величины равно числу упавших осколков ^{252}Cf .

4. В заключение обратимся к приведенному в начале статьи экспериментальному факту — осколок деления вызывает в $1.1 \cdot 10^3$ раз большее приращение обратного тока $p^+ - n$ -структуры, чем α -частица. Установленная выше картина преимущественного образования простых дефектов, идентичных случаю α -частиц, позволяет сопоставить ΔI с числом созданных пар Френкеля. Из таблицы видно, что величина порядка 10^3 получается в случае, когда условия для рекомбинации возникающих пар неодинаковы. Именно для α -частиц происходит перезарядка как вакансий, так и межузельных атомов, а для осколков — только одной компоненты.

На первый взгляд, это противоречит большей ($\approx 10^2$) плотности неравновесных носителей в треке осколков. Однако указанное превышение характеризует трек в среднем. На самом деле ход ионизации по длине трека для α -частиц и осколков сугубо различен. Осколки производят ионизацию в начале пробега, а α -частицы имеют характерное возрастание к его концу (кривая Брэгга). В обоих случаях

² Заметим, что область дефектообразования при торможении ионов Si в кремнии слегка смещена к концу пробега, поэтому для АО кремния с энергией более 5 кэВ можно рассматривать последние 100 \AA пробега, что снова приводит нас к случаю с энергией $E_{\text{Si}} = 5 \text{ кэВ}$.

дефекты структуры сосредоточены на последних (1-2) мкм пробега. В результате области образования дефектов и ионизации для α -частиц пространственно совпадают, а для осколков — оказываются разнесенными на противоположные концы трека. Указанные геометрические особенности и обуславливают различие в условиях рекомбинации первично созданных пар Френкеля.

Заключение

На наш взгляд, целесообразно отметить следующие результаты работы.

Рождение пар Френкеля в треках α -частиц и осколков можно рассматривать как полярные случаи в отношении роли атомов отдачи. Если α -частица в первичных столкновениях образует примерно 40% пар, а остальные 60% приходятся на долю АО, то в случае осколков в первичных столкновениях возникает примерно 6% пар, а 94% пар приходится на каскады АО.

Несмотря на сугубо различную энергию АО и, следовательно, глубину каскада раздачи ими энергии, результирующее распределение по взаимному расстоянию компонент пар Френкеля оказывается близким. Не наблюдается также различий в системе уровней дефектов, возникающих на стадии комплексообразования.

Сказанное позволяет заключить, что при воздействии осколка на решетку кремния преимущественно возникают простые дефекты. Крупномасштабные дефекты, например, РО могут образоваться в конце пробега осколка, где объемная плотность пар Френкеля высока, а сопутствующая ионизация слаба. Однако количество РО сопоставимо с числом упавших осколков и сугубо меньше ($\approx 10^3$ раз) числа простых дефектов.

Проявление возникающих дефектов в генерации носителей тока соответствует ситуации, когда в треках α -частиц происходит полная, а для осколков — частичная перезарядка пар Френкеля. Последнее согласуется с пространственным распределением актов ионизации и образования дефектов (совпадение для α -частиц и размежевание областей для осколков).

Список литературы

- [1] В.В. Емцев, Т.Б. Машовец, В.В. Михнович. ФТП, **26**, 22 (1992).
- [2] L. Bischoff, J. von Borany, H. Morgendtean, B. Schmidt, D. Schubert. Prepr. ZfK-579 (Dresden, 1986).
- [3] Е.М. Вербицкая, В.К. Еремин, А.М. Иванов, Н.Б. Строкан. ФТП, **25**, 209 (1993).
- [4] Л.С. Берман, А.М. Иванов, Н.Б. Строкан. Письма ЖТФ, **19**, 24 (1993).
- [5] *Ion Implantation. Science and Technology*, ed. by J.F. Ziegler (Acad. Press., 1984).
- [6] Л.С. Берман, Н.А. Витовский, В.Н. Ломасов, В.Н. Ткаченко. ФТП, **24**, 1816 (1990).
- [7] Е.М. Вербицкая, В.К. Еремин, А.М. Иванов, Е.С. Игнатенко, Н.Б. Строкан, У.Ш. Туребеков, И. Борани, В. Шмидт. ФТП, **25**, 852 (1991).
- [8] А.В. Васильев, И.А. Копшик, С.А. Смагулова, М.А. Цвайгерт, С.С. Шаймеев. ФТП, **17**, 1155 (1983).
- [9] Р.Ф. Коноплева, В.Н. Остроумов. *Взаимодействие заряженных частиц высоких энергий с германием и кремнием* (М., Атомиздат, 1975).

To the question of the formation of structural defects due to the stopping of fast ions in silicon

A.M. Ivanov, I.N. Ilyashenko, N.B. Strokan, B. Schmidt[†]

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St.-Petersburg, Russia

[†]Institute for Physics of Ion Beams and Material Science, Rossendorf Research Center, Dresden, Germany D-01314
