

МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИЕВЫХ ДИОДНЫХ СТРУКТУРАХ

Михнович В. В., Фирсова Т. В.

Предложена количественная модель кинетики формирования точечных радиационных дефектов в кремниевых диодных структурах, учитывающая диффузию, дрейф подвижных многозарядных компонентов пар Френкеля, а также процессы формирования стабильных комплексов. Показано, что вариация условий электронного облучения существенно влияет на профили концентрации дефектов в структуре и это должно учитываться при прогнозировании изменения электрофизических параметров диода.

В последнее время уделяется большое внимание изучению кинетики формирования точечных радиационных дефектов (ТД) в кремниевых диодных структурах [1-4]. Эти исследования важны как для углубления представлений о механизмах радиационного дефектообразования в неоднородных системах, так и для прогнозирования изменения электрических параметров приборных структур с активными областями.

В данной работе предложена количественная модель кинетики формирования ТД в кремниевых $p-n$ -структурах. Проиллюстрирована степень влияния условий электронного облучения на кинетику формирования ТД.¹

Система уравнений, описывающая кинетику формирования ТД, имеет вид (здесь учтены диффузия, дрейф вакансий V и междоузельных атомов I в электрическом поле $p-n$ -перехода, аннигиляция I и V , а также формирование стабильных радиационных комплексов)

$$\frac{\partial N_{I,V}(x,t)}{\partial t} = G_{I,V}(t) - \operatorname{div} j_{I,V}(x,t) - \beta_{I+V}(x,t) N_V(x,t) N_I(x,t) - \sum_m \gamma_m^{I,V}(x,t) N_{I,V}(x,t) N_m^{I,V}(x) - \Gamma(x,t), \quad (1)$$

$$\frac{dN_W(x,t)}{dt} = \gamma_W(x,t) N_V^2, \quad \frac{dN_m^{I,V}(x,t)}{dt} = \gamma_m^{I,V} N_m^{I,V} N_{I,V},$$

$$N_{I,V}(x,t=0) = N_W(x,t=0) = N_m^{I,V}(x,t=0) = 0, \quad \operatorname{div} j_{I,V}|_{x=-l_n, l_p} = 0.$$

Здесь $N_{I,V}$, N_W , $N_m^{I,V}$, $N_m^{I,V}$ — концентрации I , V , дивакансий, легирующей примеси типа m , комплексов I , V + атом легирующей примеси типа m ; β_{I+V} — скорость аннигиляции I и V ; γ_W — скорость формирования дивакансий; $\gamma_m^{I,V}$ — скорости формирования междоузельных и вакансионных комплексов (скорости реакций определяются по соотношениям работы [5]). В уравнении непрерывности для вакансий последнее слагаемое учитывает формирование дивакансий, т. е. $\Gamma(x,t) = 2\gamma_W N_V^2$, в уравнении непрерывности для междоузельных атомов $\Gamma(x,t) = 0$. Области n -типа соответствуют $-l_n \leq x < 0$,

¹ Под условиями облучения здесь подразумеваются температура, уровень легирования структуры и ее электрический режим.

области p -типа — $0 < x \leq l_p$; $G_{I,V}(t)$ — скорость генерации I, V . Выражение для плотности потока I и V имеет вид

$$j_{I,V} = -D_{I,V}(x, t) \nabla N_{I,V} + L_{I,V}(x, t) \frac{D_{I,V}(x, t)}{kT} N_{I,V} \nabla \varphi.$$

Здесь φ — электростатический потенциал p — n -перехода; $D_{I,V}, L_{I,V}$ — среднестатистический коэффициент диффузии I, V и среднестатистический заряд I, V (I и V имеют спектр зарядовых состояний);

$$D_{I,V}(x, t) = \sum_j D_{I,V}^{(j)} f_{I,V}^{(j)}(x, t),$$

$$L_{I,V}(x, t) = e \sum_j j f_{I,V}^{(j)}(x, t),$$

$$D_{I,V}^{(j)} = d_{I,V}^2 \nu \exp \{-E_j^{*I,V}/kT\}.$$

Здесь $D_{I,V}^{(j)}$ — коэффициент диффузии I, V , находящихся в j -м зарядовом состоянии; $d_{I,V}$ — величина скачка ($d_{I,V} \sim a$, a — межатомное расстояние); ν — частотный фактор ($\sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$); $E_j^{*I,V}$ — энергия активации миграции I, V в j -м зарядовом состоянии; e — заряд электрона (здесь будем полагать, что $e=1$); $f_{I,V}^{(j)}$ — вероятность того, что в момент времени t I и V , находящиеся в точке x , будут иметь j -е зарядовое состояние. Для определения $f_{I,V}^{(j)}$ в общем случае необходимо решать систему дифференциальных уравнений [6]. Здесь мы будем полагать, что скорости захвата электронов и дырок дефектами много больше, чем скорости формирования радиационных комплексов. Тогда для определения $f_{I,V}^{(j)}$ можно воспользоваться известными рекуррентными соотношениями [6]. При этом $f_{I,V}^{(j)}$ является функцией от $n(x, t)$ и $p(x, t)$ (n, p — концентрации электронов и дырок).

Таким образом, для описания кинетики формирования ТД систему уравнений (1) необходимо дополнить уравнением Пуассона и уравнениями непрерывности для электронов и дырок

$$\Delta \varphi(x, t) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \rho(x, t), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \varphi(x = -l_n, t) &= 0, \quad \varphi(x = l_p, t) = U_k + U, \\ U_k &= -kT \ln [N_D(x = -l_n) N_A(x = l_p) / n_i^2]. \end{aligned}$$

Здесь ϵ — диэлектрическая проницаемость, n_i — собственная концентрация носителей заряда, U_k — контактная разность потенциалов, U — внешнее смещение ($U > 0$ соответствует прямому смещению, $U < 0$ — обратному). Выражение для плотности заряда имеет вид

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= N_A(x) - N_D(x) + n(x, t) - p(x, t) + \sum_m L_m^{I,V}(x, t) N_m^{I,V} + \\ &+ L_I(x, t) N_I(x, t) + L_V(x, t) N_V(x, t) + L_W(x, t) N_W(x, t). \end{aligned}$$

Здесь N_A, N_D — концентрации акцепторной и донорной легирующих примесей. Последние четыре слагаемых учитывают плотность заряда, локализованного на междоузельных, вакансионных комплексах I, V , дивакансиях,

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= G_n(t) - \text{div } j_n - \frac{n - n_0(x)}{\tau_n} - \sum_k R_n^{(k)}(n, p), \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= G_p(t) - \text{div } j_p - \frac{p - p_0(x)}{\tau_p} - \sum_k R_p^{(k)}(n, p), \end{aligned} \quad (3)$$

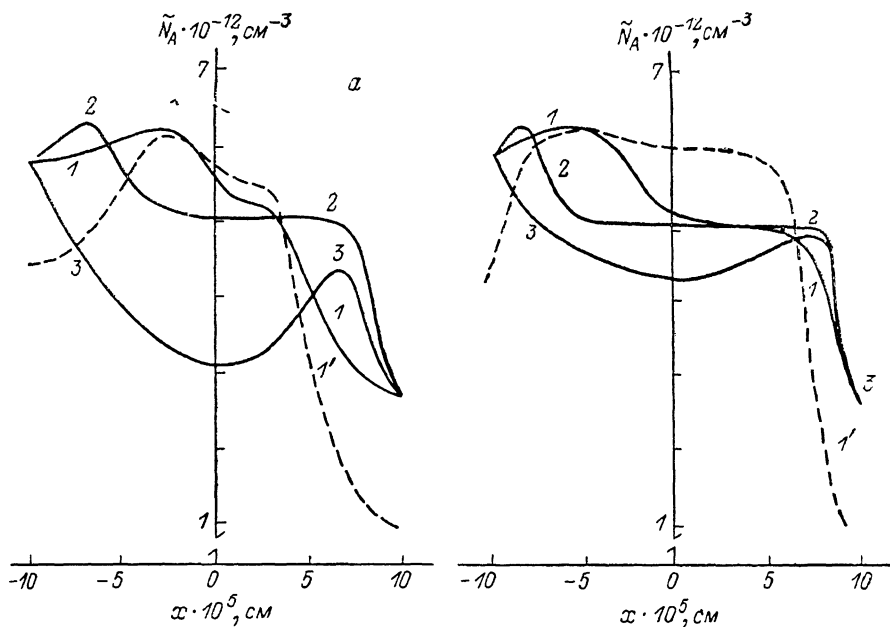
$$n(x, t=0) = \bar{n}(x), \quad p(x, t=0) = \bar{p}(x),$$

$$n(x = -l_n, t) = n_n^0, \quad n(x = l_p, t) = n_p^0,$$

$$p(x = -l_n, t) = p_n^0, \quad p(x = l_p, t) = p_p^0,$$

$$j_n = -D_n \nabla n + \frac{D_n}{kT} n \nabla \varphi, \quad j_p = -D_p \nabla p - \frac{D_p}{kT} p \nabla \varphi.$$

Здесь $G_{n, p}$ — скорость генерации электронов и дырок, $\tau_{n, p}$ — время жизни электронов и дырок, обусловленное рекомбинацией на исходных дефектах, $R_{n, p}^{(k)}$ — скорость рекомбинации электронов и дырок на радиационных дефектах типа k (определяется по известным соотношениям [6]), $D_{n, p}$ — коэффициент диффузии электронов и дырок, $p_0(x)$, $n_0(x)$ — концентрации дырок и электронов до облучения в отсутствие внешнего смещения ($U=0$), концен-



Зависимость концентрации А-центров \tilde{N}_A от x .

U, В: 1 — 0, 2 — -1, 3 — 1 ($T=300$ К). 1' — $U=0$ ($T=250$ К). $N_D, \text{см}^{-3}$: а — 10^{18} , б — 10^{14} ; $N_A, \text{см}^{-3}$: а, б — 10^{16} .

трации \bar{n} , \bar{p} определяются из решения системы уравнений (2), (3) без учета облучения. Обычно полагают, что на границах концентрации электронов и дырок равны своим равновесным значениям.

Поясним качественно влияние условий облучения на кинетику формирования ТД. Вариация условий облучения приводит к изменению φ , n , p . В результате изменяется $f_{I, v}^{(j)}$, что приводит к изменению $D_{I, v}$, $L_{I, v}$, скоростей формирования радиационных дефектов. Это сказывается на профилях концентраций ТД.

Для количественного анализа кинетики формирования ТД необходимо численно решить систему уравнений (1)—(3).² На рисунке представлены расчетные профили концентрации А-центров \tilde{N}_A (комплекс вакансия—кислород) после окончания формирования радиационных дефектов при различных условиях облучения. Учитывалось, что междоузельные атомы аннигилируют с вакансиями, а последние, кроме того, участвуют в формировании А-центров, дивакансий, Е-центров (комплекс вакансия—атом донорной легирующей примеси). Диодная структура и импульс облучения выбирались модельными: $l_n = l_p = 10^{-4}$ см,

² Разностные схемы были получены интегринтерполяционным методом [7, 8] и реализованы методом прогонки.

$$G_{n,p,I,\nu} = \begin{cases} G_{n,p,I,\nu}^0 \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right), & t \leq \tau, \\ 0, & t > \tau. \end{cases}$$

Здесь τ — длительность импульса ($\sim 10^{-5}$ с). Значения $G_{I,\nu}^0$ выбирались из следующих соображений. Характерные концентрации дефектов, вводимых облучением, составляют $\sim 10^{13}$ см $^{-3}$. Исходя из этого $G_{I,\nu}^0 \sim 10^{18}$ см $^{-3}$ ·с $^{-1}$ ($G_{I,\nu}^0 \tau \sim 10^{13}$ см $^{-3}$). Здесь важно отметить следующее. Такие концентрации дефектов ($\sim 10^{13}$ см $^{-3}$) достигаются, как правило, в результате многократного облучения (если речь идет об импульсном режиме облучения). Однако если $1/\omega \gg \tau_{I,\nu}$, $\tau_{n,p}$ ($\tau_{I,\nu}$ — характерные времена формирования дефектов; ω — частота следования импульсов; в частности, в условиях экспериментов [$^{2-4}$] $\omega = 10^2$ Гц), что обычно выполняется, то вклад всех импульсов в значения концентрации дефектов аддитивен. Значения $G_{n,p}^0$ примем такими, как в условиях экспериментов [$^{2-4}$]: $G_{n,p}^0 \sim 10^{17}$ см $^{-3}$ ·с $^{-1}$ (вообще говоря, существует связь между $G_{n,p}^0$ и $G_{I,\nu}^0/\eta$, где η — количество импульсов, но так как в различных экспериментах значение η может быть разным, то здесь в модельных расчетах эта связь не учитывается).

Из расчетов следует (см. рисунок), что даже при незначительных вариациях условий облучения профили концентраций дефектов могут довольно сильно изменяться, что необходимо учитывать при прогнозировании изменения электрофизических параметров полупроводниковых приборов.

В заключение приведем значения констант, использованных в расчетах: $D_{n,p} \sim 10$ см 2 /с, $\tau_{n,p} \sim 10^{-5}$ с, $\epsilon \simeq 11.8$, $E_F^* \simeq 0$ [9].

Концентрация кислорода принималась равной 10^{18} см $^{-3}$, концентрации доноров N_D в p -области и акцепторов N_A в n -области принимались равными нулю (значения N_D в n -области и N_A в p -области приведены в подрисуночных подпсах).

Значение энергии активации миграции нейтральной вакансии $\simeq 0.33$ эВ [10], двукратно отрицательной $\simeq 0.18$ эВ [10], однократно положительной $\simeq 0.33$ эВ [10], однократно отрицательной $\simeq 0.25$ эВ [11], для двукратно положительной вакансии полагали, что $E^{*v} \simeq 0.33$ эВ. Выбиралась общепринятая система зарядовых состояний для рассматриваемых здесь дефектов. При расчете скорости рекомбинации $R_{n,p}^{(k)}$ электронов и дырок на дефектах (A , E -центрах, дивакансиях) принималось, что сечения захвата электронов и дырок $\sim 10^{-15}$ см 2 . При определении $f_{I,\nu}^{(j)}$ полагали, что для I и V отношения сечений захвата дырок к сечениям захвата электронов ~ 1 (здесь не обязательно знать абсолютные значения сечений).

Список литературы

- [1] Кучинский П. В., Ломако В. М., Петрунин А. П. // Письма ЖТФ. 1985. Т. 11. В. 5. С. 309—311.
- [2] Болотов В. В., Карпов А. В., Стучинская В. А. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 1. С. 49—55.
- [3] Бобрикова О. В., Стась В. Ф. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 1. С. 143—145.
- [4] Бобрикова О. В., Герасименко Н. Н., Стась В. Ф. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 12. С. 2236—2239.
- [5] Кожевников В. П., Михнович В. В. // ЖТФ. 1981. Т. 51. В. 1. С. 153—157.
- [6] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. 672 с.
- [7] Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1977. 656 с.
- [8] Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. Рига, 1983. 167 с.
- [9] McKeighen R. E., Kochler J. S. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 2. P. 462—476.
- [10] Watkins G. D. // Lat. Def. Semicond. Conf. Ser. N 23. London—Bristol, 1975. P. 1—22.
- [11] Ершов С. Н., Пантелеев В. А., Нагорных С. Н., Черняховский В. В. // ФТТ. 1977. Т. 19. В. 1. С. 322—323.

Получена 30.08.1989
Принята к печати 19.09.1989