

Особенности стационарной имплантации кристаллического кремния молекулярным кислородно-азотным пучком: рентгеновские Si $L_{2,3}$ -эмиссионные спектры

© Д.А. Зацепин, И.Р. Шейн*, Э.З. Курмаев, В.М. Черкашенко, С.Н. Шамин, Н.А. Скориков, А.Д. Yadav**, S.K. Dubey**

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, 620219 Екатеринбург, Россия

* Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, 620219 Екатеринбург, Россия

** Department of Physics, University of Mumbai, Vidyanagari Campus, Santacruz, Mumbai-400098, India

E-mail: d_zatsepin@ifmlrs.uran.ru

(Поступила в Редакцию 25 апреля 2007 г.)

Представлены результаты исследования локальной электронной структуры монокристаллических образцов кремния (111) с проводимостью n -типа методом рентгеновской Si $L_{2,3}$ -эмиссионной спектроскопии. Образцы имплантировались ионизированным молекулярным пучком $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ (соотношение кислород-азот в молекулярном пучке 1:1, энергия имплантации 30 keV, дозы облучения от $2 \cdot 10^{17}$ до $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, термический быстрый отжиг (rapid thermal annealing) образцов в азотной атмосфере после имплантации при 800°C в течение 5 min) для формирования системы $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$. Сравнение зарегистрированных Si L -спектров со спектрами эталонов позволило установить четкие корреляции между особенностями электронной структуры оксинитрида кремния, сформированного в результате имплантации, и дозами облучения. Показано, что при дозах имплантации $2 \cdot 10^{17}$ и $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ преимущественно формируется Si_3N_4 , в то время как при дозе $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, в основном происходит образование слоев SiO_2 в монокристаллическом кремнии. Обсуждаются наиболее вероятные причины и механизмы особенностей такого внедрения $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ в исследованные образцы. Полученные экспериментальные данные сравниваются с *ab initio* расчетами зонной структуры, выполненными методом FLAPW.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ (гранты № 08-02-00046а и 08-02-00148а), гранта Минобразования — CRDF: Annex BF4M05, EK-005-X2 (REC-005), BRHE 2004 post-doctoral fellowship award Y2-EP-05-11, а также Совета по грантам Президента РФ для ведущих научных школ (грант НШ-4192.2006.2). С индийской стороны работа выполнялась при поддержке University Mumbai Grants Commission (UGC) и проекта „Ion implantation synthesis of silicon oxynitride samples“ F.10-47/2001 (SR-I).

PACS: 71.20.Nr, 71.20.-b

1. Введение

Режимы ионной имплантации материалов при относительно высоких дозах облучения ($\geq 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) вызывают значительный интерес в связи с возможностью формирования нанокомпозитов и структур, которые нельзя получить с использованием стандартных методов химического синтеза. Известно, что процессы, протекающие при подобных режимах имплантации, приводят к существенным физико-химическим трансформациям не только поверхности, но и объема имплантированного материала и могут вызывать рост поверхностных пленок, что открывает широкие перспективы для целенаправленной модификации свойств материалов. В частности, ионно-лучевые методы формирования диэлектрических пленок на поверхности полупроводникового кремния обладают значительными технологическими преимуществами по сравнению с общепринятым низкотемпературным методом.

Диэлектрические пленки из диоксида кремния SiO_2 , нитрида кремния Si_3N_4 и оксинитрида кремния $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$

широко используются в интегральных микросхемах в качестве масок и пассивирующих покрытий, диффузионных барьеров, затворов и т.д. Диэлектрические покрытия из $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$ обладают определенной стойкостью к облучению, применяются в качестве оптических пленок; наконец, $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$ является потенциальным кандидатом для объединения в одной системе всех важных физико-химических свойств SiO_2 и Si_3N_4 . Несмотря на то что пленки оксинитрида кремния могут быть получены стандартными методами синтеза, ионно-лучевая технология формирования системы $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$ наиболее предпочтительна. Последовательная имплантация кремния кислородом и азотом при относительно высоких энергиях обычно формирует слой оксинитрида в объеме образца [1–5]. Авторы работы [6] сообщают об образовании оксинитрида кремния вследствие имплантации ионов азота в кварц при энергиях 50 и 100 keV. Имплантация ионов азота в полупроводниковый кремний при очень низких энергиях (от 5 до 20 keV) с последующим окислением должна приводить к образованию сверхтонких пленок $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$ [7,8]. Тем не менее к насто-

ящему моменту существует весьма ограниченное число работ, сообщающих о формировании слоев оксинитрида с использованием низкоэнергетичной (от 20 до 40 keV) ионной имплантации [9–13].

Рентгеновская эмиссионная спектроскопия (РЭС) является эффективным методом исследования природы химической связи Si–O и Si–N в кремнийсодержащих соединениях, подвергнутых имплантации ионами различных типов (см., например, работы [14,15] и ссылки в них). В настоящей статье представлены результаты исследования природы химической связи и электронной структуры слоев оксинитрида кремния $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$, полученного в результате низкоэнергетичной (30 keV) ионной имплантации молекулярным кислородом $^{16}\text{O}_2^+$ и азотом $^{14}\text{N}_2^+$ при соотношении 1:1 и последующего быстрого термического отжига методом рентгеновской Si $L_{2,3}$ -эмиссионной спектроскопии.

2. Методика приготовления образцов и описание эксперимента

В качестве объекта имплантации использовались диски монокристаллического кремния $\langle 111 \rangle$ n -типа, обладающие сопротивлением $0.8\text{--}1.2 \Omega \cdot \text{см}$. Очищенные образцы последовательно имплантировались при комнатной температуре молекулярным пучком $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ при энергиях 30 keV в вакууме $\sim 1 \cdot 10^{-5}$ mbar на установке факультета физики университета Мумбай, Индия. При этом дозы имплантации варьировались от $2 \cdot 10^{17}$ до $1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$, а ионный ток составлял $\sim 3\text{--}8 \mu\text{A}/\text{см}^2$. С целью обеспечения наиболее однородной имплантации на одном квадратном сантиметре площади поверхности образцов и для предотвращения эффектов нагрева имплантация выполнялась в стационарном сканирующем режиме посредством фокусировки пучка магнитным полем. В качестве источника ионизированных молекул использовались „сухие“

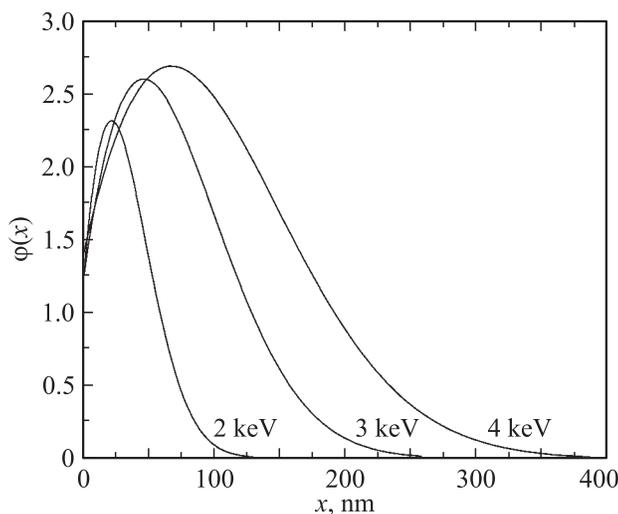


Рис. 1. Вид функции распределения $\varphi(x)$ генерируемого рентгеновского излучения от глубины для кристаллического Si.

газы O_2 и N_2 . Быстрый термический отжиг (RTA — rapid thermal annealing) образцов производился в атмосфере сухого азота при 800°C в течение 5 min. Рентгеноэмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры (валентный переход $\text{Si } 3d4s \rightarrow \text{Si } 2p_{3/2,1/2}$) имплантированных образцов и эталонов измерены с помощью ультрамягкого спектрометра СПЕКТРОЗОНД с высоким пространственным ($4 \mu\text{m}$) и энергетическим ($\Delta E = 0.3 \text{ eV}$) разрешением [16]. Данный спектрометр имеет дифракционную решетку с радиусом изгиба 2 m, 600 lines/mm и использует электронное возбуждение. При измерении рентгеновских спектров использовались значения ускоряющего напряжения U от 2 до 4 keV с шагом 1 keV. Согласно работе [7], максимальная глубина анализируемого слоя в образце по Фельдману составляла $\sim 1000 \text{ \AA}$ ($U = 2 \text{ keV}$), $\sim 1900 \text{ \AA}$ ($U = 3 \text{ keV}$) и $\sim 3400 \text{ \AA}$ ($U = 4 \text{ keV}$). Однако следует заметить, что интенсивность рентгеновского излучения определяется функцией распределения $\varphi(x)$ генерируемого излучения от глубины и поглощением [18]. Вид $\varphi(x)$ для кристаллического кремния приведен на рис. 1.

Расчет электронной структуры и моделирование рентгеновских эмиссионных спектров выполнялись *ab initio* полнопотенциальным методом присоединенных плоских волн FLAPW (код Wien2k [19]) с градиентной аппроксимацией обменно-корреляционного потенциала GGA-PBE [20]. Размеры МТ-сфер (muffin-tin spheres) были выбраны следующим образом: для атомов Si — 1.52 a.u., для атомов N — 1.52 a.u. и для O — 1.54 a.u. В области между МТ-сферами потенциалы представлялись в виде разложения в ряд Фурье с суммированием по векторам обратной решетки до максимального значения вектора $G_m = 12$. Параметр разложения по плоским волнам был выбран равным $R_{MT} \cdot K_{\text{max}} = 9$, где R_{MT} — радиус МТ-сфер, а K_{max} — вектор обратной решетки. Исходя из принципа минимума полной энергии ($E < 0.001 \text{ mRy}$) и сил, действующих на атомы ($f_i < 0.5 \text{ mRy/a.u.}$), для кристаллических структур $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$ (группа симметрии $P3_1/c$), $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ (группа симметрии $P6_3$), $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ (кубическая фаза типа шпинели — группа симметрии Fd_3/m) и $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ (группа симметрии $P3_1/c$) были оптимизированы как параметры кристаллической решетки, так и позиции атомов. Вычисленные параметры кристаллических решеток и позиции атомов хорошо согласуются с экспериментальными данными и с результатами других теоретических расчетов (см., например, работы [21,22]). Для оптимизированной геометрии кристаллических структур с использованием методики [23] моделировались рентгеновские Si $L_{2,3}$ -эмиссионные спектры исследованных образцов.

3. Результаты и обсуждение

Хорошо известно, что рентгеновский Si $L_{2,3}$ -эмиссионный спектр возникает благодаря электронному переходу из Si $3s$ - и Si $3d$ -уровней на Si $2p$ -уровень вследствие

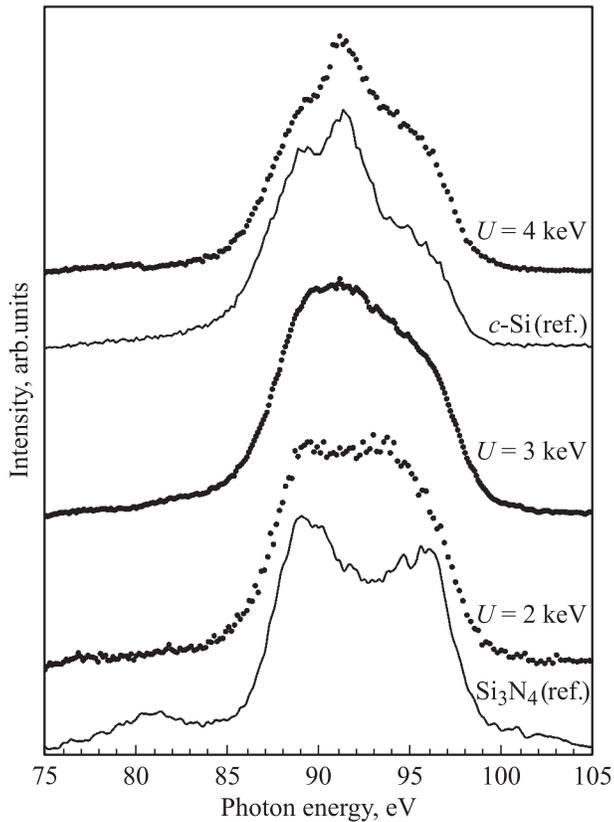


Рис. 2. Сравнение рентгеновских эмиссионных Si $L_{2,3}$ -спектров имплантированного молекулярным азотно-кислородным пучком кремния n -типа, зарегистрированных при значениях ускоряющего напряжения $U = 2, 3$ и 4 keV. Имплантация дозой $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ проведена в стационарно-сканирующем режиме. Сплошными линиями показаны спектры эталонов (кристаллического c -Si и Si_3N_4).

дипольных правил отбора и отображает парциальную плотность электронных $3d3s$ -состояний, локализованных на атомах кремния (см., например, [16,17]). В наших предыдущих работах продемонстрирована эффективность метода рентгеновской спектроскопии при исследовании образцов кремния, имплантированного в стационарном и импульсном режимах. Аналогично [15,24] анализ полученных рентгеноспектральных данных будет проводиться путем сравнения со спектрами эталонов и привлечения результатов моделирования РЭС Si $L_{2,3}$ -методом FLAPW.

На рис. 2 приведены рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры кристаллического кремния, облученного азотно-кислородным пучком при дозе $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, зарегистрированные при значениях ускоряющего напряжения $U = 2, 3, 4$ keV, а также спектры эталонов — Si_3N_4 и кристаллического c -Si. Как видно из рисунка, структура спектра, полученного при $U = 2$ keV (т.е. вблизи поверхности образца), весьма схожа со структурой эталонного спектра Si_3N_4 , за исключением того, что спектр имплантированного образца имеет более размытые максимумы по сравнению с эталоном. Поскольку

такая доза имплантации образца близка к порогу аморфизации кристаллического Si [15,24], подобное размытие формы спектра может свидетельствовать о радиационно-стимулированном разупорядочении кристаллической структуры исходного кристаллического кремния и его частичной аморфизации. При этом схожесть спектральных параметров РЭС Si $L_{2,3}$ образца и эталона Si_3N_4 позволяет утверждать преимущественное формирование химических связей Si–N в приповерхностном слое глубиной $\sim 100 \text{ nm}$ ($U = 2$ keV), несмотря на тот факт, что изначально образец имплантировался молекулярным пучком $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$. В случае перехода к более глубоким слоям образца ~ 190 и $\sim 340 \text{ nm}$ происходит существенное изменение формы РЭС Si $L_{2,3}$: сначала двухпиковая структура вырождается в один широкий максимум (рис. 2, спектр, зарегистрированный при $U = 3$ keV), и затем вновь спектр образца становится практически полностью идентичным спектру неимплантированного кристаллического c -Si (сп. спектр образца при $U = 4$ keV и спектр эталона). Такое изменение формы спектра может свидетельствовать о том, что в исходном образце на глубинах от поверхности ~ 190 и $\sim 340 \text{ nm}$ не происходит формирования нитрида кремния или каких-либо других соединений на его основе, а наиболее вероятным следствием данного режима имплантации при дозе облучения $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ является сильное разупорядочение кристаллической структуры образца, появление агрегатов дефектных комплексов и аморфизация. В пользу последнего свидетельствует сильная „размытость“ полос РЭС Si $L_{2,3}$. Заметим, что аналогичная „размытость“ полос рентгеновского эмиссионного $L_{2,3}$ -спектра кремния наблюдалась нами после имплантации Si ионами Fe^+ в стационарном и импульсных режимах и проявлялась именно вследствие радиационно-стимулированных нарушений в кристаллической структуре образца — эффекта больших доз (ЭБД) [16,24].

На рис. 3 изображены рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры кристаллического кремния, облученного азотно-кислородным пучком при дозе $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$. Как и в предыдущем случае, при варьировании U от 2 до 4 keV происходят изменения формы спектров — спектр, полученный при $U = 2$ keV ($\sim 100 \text{ nm}$), похож на спектр эталона Si_3N_4 , но с приведенными выше особенностями. Однако следует отметить низкоэнергетичную полосу, расположенную в области энергий $\sim 77\text{--}78 \text{ eV}$, спектральные параметры которой совпадают с аналогичной полосой в спектре SiO_2 (рис. 4) и которая является результатом Si $3d3s$ –O $2s$ -гибридизации. Упомянутый факт свидетельствует о том, что некоторое количество фазы SiO_2 сформировалось в образце на данной глубине. При $\sim 190 \text{ nm}$ ($U = 3$ keV) вновь происходит вырождение тонкой структуры спектра в широкую полосу, и при $\sim 340 \text{ nm}$ ($U = 4$ keV) РЭС Si $L_{2,3}$ имплантированного образца становится близок по своим спектральным параметрам к спектру кристаллического кремния (эталона).

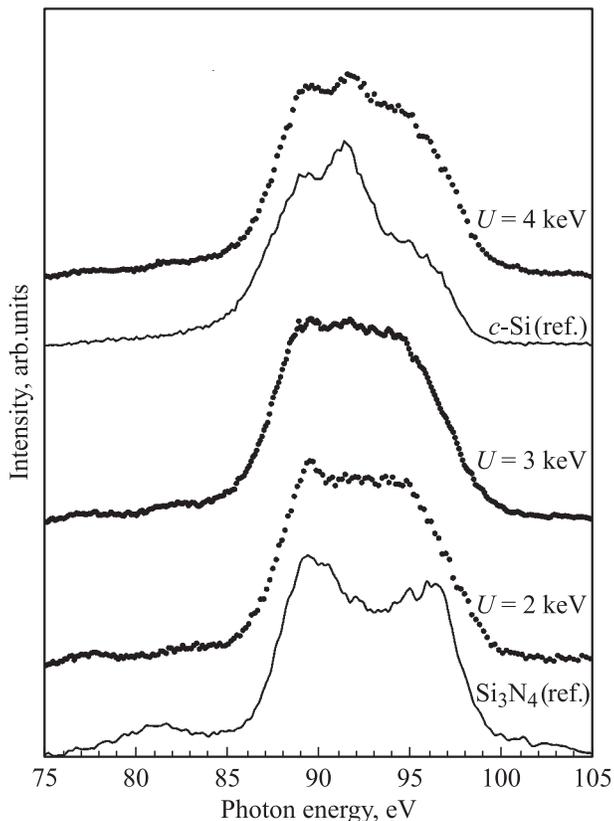


Рис. 3. Рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры кремния n -типа, подвергнутого имплантации ионами азота и кислорода в стационарно-сканирующем режиме при дозе $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, и спектры эталонов (кристаллического $c\text{-Si}$ и Si_3N_4). Спектры получены при значениях ускоряющего напряжения U от 2 до 4 кэВ.

В спектре образца при $U = 4 \text{ keV}$, несмотря на его трехпиковую структуру, которая аналогична эталону, наблюдается другое соотношение интенсивности полос: в частности, максимумы при 89 и 95 эВ более интенсивны, чем в спектре эталона (рис. 3). Для объяснения такого различия было выполнено моделирование РЭС Si $L_{2,3}$ -образца после имплантации $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ дозой $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ спектрами эталонных соединений — SiO_2 , Si_3N_4 и $c\text{-Si}$, взятых с соответствующими весовыми коэффициентами (аналогично тому, как это было произведено в нашей работе [15]). Оказалось, что наилучший результат из всех возможных вариантов дает соотношение $0.6 (c\text{-Si}) + 0.25 (\text{Si}_3\text{N}_4) + 0.15 (\text{SiO}_2)$, при котором достигается полное соответствие ширины экспериментального и аддитивного спектров (рис. 5). Некоторые различия в интенсивностях полос спектра свидетельствуют о том, что в образце, имплантированном дозой $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, скорее всего, не происходит одновременного формирования фаз Si_3N_4 и SiO_2 , поскольку в таком случае экспериментальный спектр образца удалось бы практически идеально воспроизвести суперпозицией спектров соответствующих фаз [25]. Поэтому описанное выше различие в соотношении интенсивностей полос при 89

и 95 эВ в экспериментальном спектре можно объяснить формированием в образце на глубине $\sim 340 \text{ nm}$ ($U = 4 \text{ keV}$) сложного оксинитрида $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ или смеси фаз $c\text{-Si}$ и $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ (напомним, что имплантация $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ производилась в кристаллический Si). К сожалению, нам не представилась возможность непосредственно проверить данное предположение в связи с отсутствием стабильных образцов сложного оксинитрида $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$, а также экспериментальных данных рентгеновской спектроскопии других авторов по этой тройной системе.

На рис. 4 приведены рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры кристаллического кремния, облученного азотно-кислородным пучком при дозе $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, зарегистрированные при значениях ускоряющего напряжения $U = 2, 3$ и 4 кэВ. При такой дозе имплантации экспериментальные спектры образца, зарегистрированные при $U = 2 \text{ keV}$ ($\sim 100 \text{ nm}$) и 3 кэВ ($\sim 190 \text{ nm}$), оказываются полностью идентичными эталонным спектрам SiO_2 , а спектр образца на глубине $\sim 340 \text{ nm}$ ($U = 4 \text{ keV}$) вновь проявляет трехпиковую структуру, характерную для кристаллического Si, но (аналогично предыдущему случаю с дозой имплантации

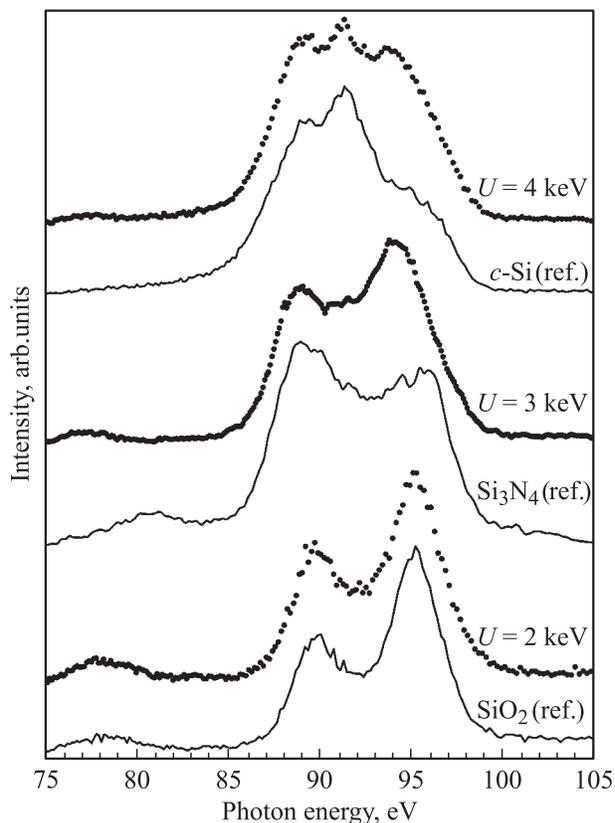


Рис. 4. Сравнение рентгеновских эмиссионных Si $L_{2,3}$ -спектров имплантированного молекулярным азотно-кислородным пучком кремния n -типа, зарегистрированных при значении ускоряющего напряжения $U = 2, 3$ и 4 кэВ. Имплантация дозой $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ проведена в стационарно-сканирующем режиме. Сплошными линиями показаны спектры эталонов (кристаллического $c\text{-Si}$, Si_3N_4 и SiO_2).

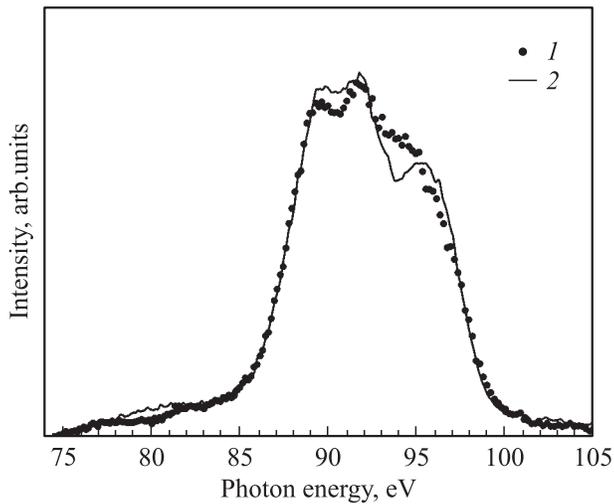


Рис. 5. Результат аппроксимации экспериментального эмиссионного Si $L_{2,3}$ -спектра образца кремния, облученного дозой $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ (1), суммой спектров эталонов, взятых в следующих весовых соотношениях: $0.6 \text{ c-Si} + 0.25 \text{ Si}_3\text{N}_4 + 0.15 \text{ SiO}_2$ (2).

$1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$) с „неправильным“ соотношением интенсивностей главных полос. Исходя из идентичности спектра SiO_2 (эталона) и экспериментальных спектров, можно утверждать, что при такой же дозе имплантации на глубинах образца ~ 100 и $\sim 190 \text{ nm}$ формируется фаза SiO_2 , в то время как на глубине $\sim 340 \text{ nm}$, скорее всего, вновь формируется сложный оксинитрид $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ или смесь фаз c-Si и $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ (данные по аппроксимации спектрами эталонных соединений не приводятся ввиду идентичности результата предыдущему случаю). Таким образом, основываясь на проведенном нами анализе, можно сделать следующие выводы. При дозах имплантации $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ на глубине $\sim 100 \text{ nm}$ от поверхности происходит формирование фазы Si_3N_4 ; при дозах $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ наряду с фазой Si_3N_4 начинает формироваться фаза SiO_2 ; при максимальной дозе $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ образуется преимущественно фаза SiO_2 . При дозах $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ и $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ на глубине $\sim 340 \text{ nm}$, вероятнее всего, происходит образование сложного оксинитрида $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ или смеси фаз c-Si и $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$. Вполне возможно, что описанные особенности имплантации кремния $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{14}\text{N}_2^+$ могут иметь место благодаря хорошо известному эффекту каналирования. Данный эффект представляет собой преимущественное проникновение определенных типов имплантированных частиц вдоль конкретной кристаллографической плоскости объекта имплантации и концентрированное накопление этой примеси внутри объема образца [26].

Указанные выводы можно продемонстрировать на теоретических расчетах, результаты которых приведены на рис. 6. Как видно из этого рисунка, эмиссионные $L_{2,3}$ -спектры кристаллического кремния, SiO_2 , Si_3N_4 и $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ существенно различаются. Так, например, смоделированные $L_{2,3}$ -спектры для c-Si имеют три характерных пика, которые расположены в областях -2.6 ,

-6.4 и -9.3 eV ниже уровня Ферми. С другой стороны, в эмиссионной полосе SiO_2 наблюдается пик с высокой интенсивностью в области -1.2 eV ниже уровня Ферми. В области от -4.8 до -7.8 eV и в районе -17.2 eV расположено несколько пиков, которые хорошо видны и в экспериментальных спектрах (рис. 3). Совершенно иной характер структуры был рассчитан для Si $L_{2,3}$ -спектров системы Si_3N_4 . Как видно из рис. 6, в области -0.8 — -8.2 eV расположен ряд пиков, энергетическое положение и интенсивность которых хорошо коррелируют с данными, полученными экспериментально. Однако для $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$ и $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ в области -14.8 eV ниже уровня Ферми расположены пики с низкой плотностью состояний, в то время как для $\text{c-Si}_3\text{N}_4$ такая тонкая структура спектра отсутствует. Упомянутое спектральное поведение наблюдается и для Si $L_{2,3}$ -спектров $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$, что связано, на наш взгляд, с особенностью его кристаллической структуры. Для данного соединения длина связи Si—N короче, чем длина связи Si—O, т.е. исходя из формы спектров следует сделать вывод о высокой концентрации фазы Si—N. Но, с другой стороны, в этом спектре, как и для SiO_2 , в области -1.2 eV существует достаточно интенсивный пик с небольшим „плечом“ на высокоэнергетическом склоне, свидетельствующий о значительном вкладе гибридо-

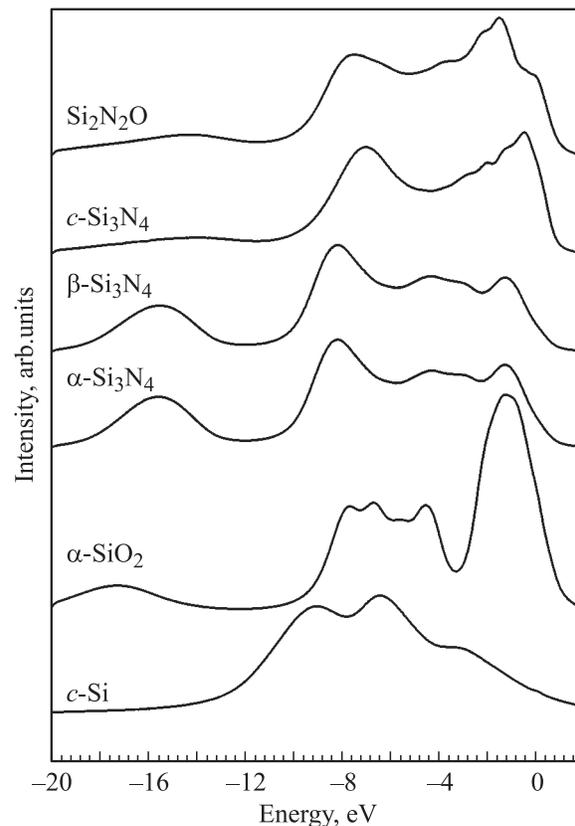


Рис. 6. Результаты моделирования методом FLAPW рентгеновских Si $L_{2,3}$ -эмиссионных спектров сложного оксида $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$, различных фаз Si_3N_4 , аморфного $\alpha\text{-SiO}_2$ и кристаллического c-Si .

ванной связи кремний–кислород в структуру эмиссионного спектра. Кроме того, упомянутое высокоэнергетическое „плечо“ (рис. 6) можно трактовать как влияние на Si $L_{2,3}$ -спектр Si₂N₂O межатомных связей, присущих именно *c*-Si₃N₄-структуре. В конечном итоге, при анализе расчетного Si $L_{2,3}$ -спектра Si₂N₂O можно предположить, что он представляет собой сложную комбинацию спектров кристаллического кремния, SiO₂ и Si₃N₄. Данный вывод подтверждает, что с помощью предложенной выше модели экспериментальный спектр Si $L_{2,3}$ для сложной системы Si–N–O может быть представлен в виде суперпозиции отдельных Si $L_{2,3}$ -спектров более простых кристаллических структур.

Список литературы

- [1] A.B. Danilin, K.A. Drakin, V.V. Kukin, A.A. Malinin, V.N. Mordkovich, A.F. Petrov, V.V. Saraykin, O.I. Vyletalina. Nucl. Instr. Meth. B **58**, 191 (1991).
- [2] J.K.Y. Wong, J.A. Kilner, A.B. Danilin, I.V. Charniy, L.A. Charniy. Vacuum **44**, 219 (1993).
- [3] A.I. Belogorokhov, V.T. Bublik, K.D. Scherbachev, Yu.N. Parkhomenko, V.V. Makarov, A.B. Danilin. Nucl. Instr. Meth. B **147**, 320 (1999).
- [4] M.Yu. Barabanenkov, Yu.A. Agafonov, V.N. Mordkovich, A.N. Pustovit, A.F. Vyatkin, V.I. Zinenko. Nucl. Instr. Meth. B **171**, 301 (2000).
- [5] A.D. Yadav, Rucha H. Polji, Vibha Singh, S.K. Dubey, T.K. Gundu Rao. Nucl. Instr. Meth. B **245**, 475 (2006).
- [6] A. Carnera, P. Mazzoldi, A.B. Boscoletto, F. Caccavale, R. Bertoncetto, G. Granozz, I. Spagnol, G. Battaglin. J. Non-Cryst. Sol. **125**, 293 (1990).
- [7] T.D.M. Salgado, F.C. Stedile, C. Krug, I.J.R. Baumvol, C. Radthe. Nucl. Instr. Meth. B **148**, 252 (1999).
- [8] J.A. Diniz, A.P. Sotero, G.S. Lujan, P.J. Tatsch, J.W. Swart. Nucl. Instr. Meth. B **166-167**, 64 (2000).
- [9] A.D. Yadav, M.C. Joshi. Thin Solid Films **91**, 45 (1982).
- [10] A. Ermolieff, P. Molle, S. Martton. Appl. Phys. Lett. **56**, 2672 (1990).
- [11] Geeta Bhatt, Alka R. Chauhan, A.D. Yadav, S.K. Dubey. Proc. DAE SSP Sump. Chandigarh, India (2002).
- [12] A.R. Chauhan, G. Bhatt, A.D. Yadav, S.K. Dubey, T.K. Gundu Rao. Nucl. Instr. Meth. B **21**, 451 (2003).
- [13] G. Bhatt, A.D. Yadav, S.K. Dubey, T.K. Gundu Rao. Nucl. Instr. Meth. B **222**, 75 (2004).
- [14] Э.З. Курмаев, Д.А. Зацепин, С.О. Чолах, В. Schmidt, Y. Harada, T. Tokushima, H. Osawa, S. Shin, T. Takeuchi. ФТТ **47**, 728 (2005).
- [15] Д.А. Зацепин, Е.С. Яненко, Э.З. Курмаев, В.М. Черкашенко, С.Н. Шамин, С.О. Чолах. ФТТ **48**, 204 (2006).
- [16] E.Z. Kurmaev, V.V. Fedorenko, S.N. Shamin, A.V. Postnikov, G. Wiech, Y. Kim. Phys. Scripta T **41**, 288 (1992).
- [17] E.Z. Kurmaev, V.R. Galakhov, S.N. Shamin. Critical Rev. Solid State Mater. Sci. **23**, 65 (1998).
- [18] R.S. Crisp. J. Phys. F: Met. Phys. **13**, 1325 (1983).
- [19] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen. WIEN2k. An Augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties. Tech. Univ. Wien, Wien (2001).
- [20] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [21] Y.-N. Xu, W.Y. Ching. Phys. Rev. B **51**, 17 379 (1995).
- [22] J. Sjoeborg, G. Helgesson, I. Idrestedt. Acta Cryst. C **47**, 2438 (1991).
- [23] K. Schwarz, A. Neckel. Phys. Chem. Chem. Phys. **79**, 1071 (1975).
- [24] Д.А. Зацепин, Э.З. Курмаев, И.Р. Шейн, В.М. Черкашенко, С.Н. Шамин, С.О. Чолах. ФТТ **49**, 72 (2007).
- [25] D.A. Zatsepin, V.R. Galakhov, B.A. Gizhevskii, E.Z. Kurmaev, V.V. Fedorenko, A.A. Samokhvalov, S.V. Naumov, R. Berger. Phys. Rev. B **59**, 59 211 (1999).
- [26] Д.А. Зацепин, С.О. Чолах. Физические основы технологий микро- и нанoeлектроники. Изд-во ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, Екатеринбург (2006). 236 с.