

Энергии диссоциации комплекса C_iC_s и А-центра в кремнии

© Н.И. Бояркина, С.А. Смагулова*, А.А. Артемьев*

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

*Якутский государственный университет,
677891 Якутск, Россия

(Получена 3 сентября 2001 г. Принята к печати 22 января 2002 г.)

Рассмотрены реакции отжига комплексов межузельного атома углерода с углеродом замещения (C_iC_s) и А-центра (VO) в n -Si, облученном быстрыми электронами или γ -квантами ^{60}Co . Сделан расчет кинетики изохронного отжига этих центров. Путем сопоставления результатов расчета с литературными экспериментальными данными, полученными при измерениях концентрации центра с уровнем $E_c - 0.17$ эВ в процессе изохронного отжига облученного n -Si, определено значение энергии диссоциации комплекса C_iC_s : $E_{C_iC_s} = (1.10 \pm 0.05)$ эВ. Энергия активации отжига этого центра $E_{aC_iC_s} \approx 2.0$ эВ. Сделана оценка энергии диссоциации А-центра: $E_A = 1.94$ эВ.

Изготовление полупроводниковых приборов на основе кремния сопровождается рядом технологических операций, в том числе облучением. Представляет интерес знание электрических параметров дефектных центров, вводимых облучением в объем кремния.

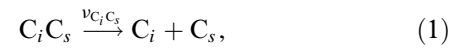
При облучении кремния быстрыми электронами или γ -квантами ^{60}Co в объем кристалла вводятся электрически активные дефекты. Основными из них являются комплексы вакансии с кислородом VO (А-центры), вакансии с донором VD (Е-центры), дивакансии (W), а также углеродсодержащие центры: межузельные атомы углерода C_i и комплексы межузельного углерода с углеродом замещения C_iC_s и с кислородом C_iO_i . Комплексы C_iC_s и VO (А-центры), имеющие акцепторные уровни вблизи $E_c - 0.17$ эВ, различить по данным электрических измерений сложно. В работе [1], например, наблюдая дефект с уровнем $E_c - 0.17$ эВ, полагали, что этот уровень принадлежит А-центру. Центры C_i и C_iC_s имеют акцепторные уровни $E_c - 0.12$ эВ и $E_c - 0.16$ эВ соответственно [2,3].

Согласно [4], изохронный отжиг радиационных дефектов с уровнем $E_c - 0.17$ эВ происходит в две стадии: при температурах $T = 200-240$ и $300-380^\circ\text{C}$. На первой стадии отжигается комплекс C_iC_s , на второй — А-центр. Кинетика отжига А-центров подробно исследована в работе [5], где на основании экспериментальных данных по изотермическому отжигу кремния, облученного быстрыми (2 МэВ) электронами, определена энергия активации процесса отжига А-центра $E_{aA} = 2.27$ эВ.

В данной работе путем сопоставления результатов расчета кинетики отжига дефектов в кремнии с экспериментальными данными, полученными в процессе изохронного отжига n -Si, облученного быстрыми электронами или γ -квантами, определены энергии диссоциации комплекса C_iC_s и А-центра.

Рассмотрим реакцию отжига комплекса C_iC_s . Предполагаем, что реакция идет по схеме диссоциации комплекса на составляющие его компоненты с последующей миграцией высвободившегося межузельного атома угле-

рода C_i по кристаллу:



где $\nu_{C_iC_s}$ — константа скорости этой реакции, т. е.

$$\frac{dN_{C_iC_s}}{dt} = -\nu_{C_iC_s} N_{C_iC_s}, \quad (2)$$

$N_{C_iC_s}$ — концентрация комплексов, t — время.

В работе [6] предложен способ расчета константы скорости реакции распада комплексов дефектов. Согласно [6], константа скорости реакции распада комплекса C_iC_s определяется следующим образом:

$$\nu_{C_iC_s} = \nu_0 \exp \frac{-E_{C_iC_s} - W_{C_iC_s}^{\text{el}}}{kT}, \quad (3)$$

где k — постоянная Больцмана, $E_{C_iC_s}$ — энергия диссоциации комплекса C_iC_s , $W_{C_iC_s}^{\text{el}}$ — энергетический вклад электронной подсистемы кристалла в скорость реакции,

$$W_{C_iC_s}^{\text{el}} = \varepsilon_{C_iC_s} f_{C_iC_s}^- - \varepsilon_{C_i} f_{C_i}^-, \quad (4)$$

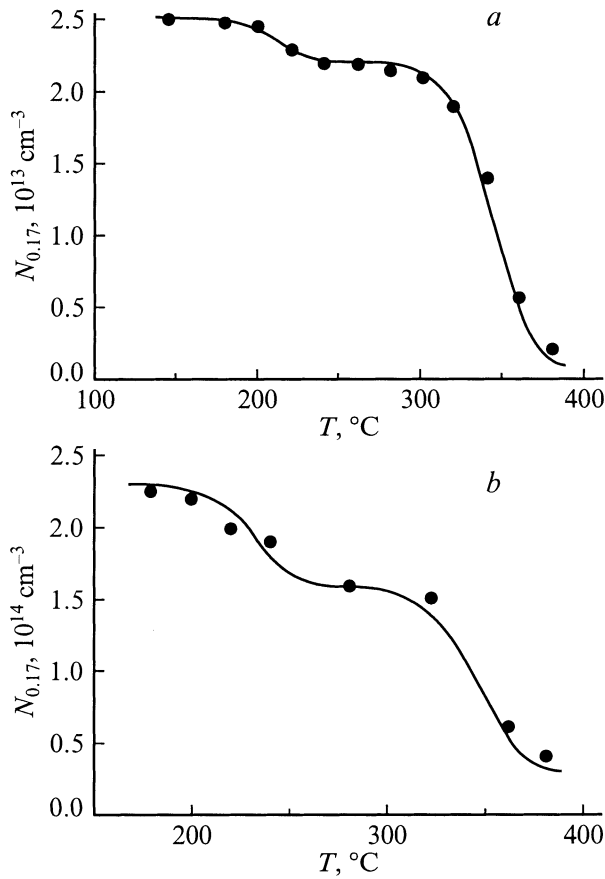
$\varepsilon_{C_iC_s} = 0.16$ эВ, $\varepsilon_{C_i} = 0.12$ эВ — энергии ионизации центров C_iC_s и C_i в n -кремнии; $f_{C_iC_s}^-$, $f_{C_i}^-$ — вероятности нахождения этих центров в отрицательно заряженном состоянии. Предэкспоненциальный множитель в (3) ν_0 вычисляется следующим образом (см. [7], формулы (1.30), (1.21), (1.6)):

$$\nu_0 = \theta D_{C_i} = \theta D_{0C_iC_s} \exp \frac{-W_{C_i}}{kT} = \nu_{0C_iC_s} \exp \frac{-W_{C_i}}{kT}, \quad (5)$$

где θ зависит от частоты колебаний компонентов комплекса, его геометрических размеров и массы; D_{C_i} — коэффициент диффузии высвободившегося межузельного атома углерода, W_{C_i} — энергия его миграции. По данным [8], $W_{C_i} = 0.87$ эВ, более ранние данные [1] дают значение $W_{C_i} = (0.77 \pm 0.05)$ эВ.

Таким образом, получаем следующее выражение для константы скорости реакции (1):

$$\nu_{C_iC_s} = \nu_{0C_iC_s} \exp \frac{-E_{C_iC_s} - W_{C_iC_s}^{\text{el}} - W_{C_i}}{kT}. \quad (6)$$



Зависимости концентрации дефектов с уровнем $E_c - 0.17$ эВ от температуры 30-минутного изохронного отжига облученного n -Si. Линии — расчет, точки — эксперимент работы [4]: a — концентрация фосфора $N_P = 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, концентрация кислорода $N_O = (6-9) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, концентрация углерода $N_C = (1-5) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, облучение γ -квантами ^{60}Co при комнатной температуре (рис. 1 из [4]); b — $N_P = 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $N_O = (1-3) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_C \approx N_O$, облучение быстрыми электронами при 0°C (рис. 3, a из [4]).

Энергия активации процесса отжига комплекса C_iC_s вычисляется следующим образом:

$$E_{aC_iC_s} = E_{C_iC_s} + W_{C_iC_s}^{\text{el}} + W_{C_i}. \quad (7)$$

Кинетика отжига A -центров определяется уравнением

$$\frac{dN_A}{dt} = -\nu_{0A} \left(\exp \frac{-E_{aA}}{kT} \right) N_A. \quad (8)$$

Концентрация дефектов $D_{0.17}$ ($N_{0.17}$) с уровнем вблизи $E_c - 0.17$ эВ есть сумма концентраций центров C_iC_s ($N_{C_iC_s}$) и A -центров (N_A). Кинетика отжига дефектов $D_{0.17}$ задается уравнением

$$\frac{dN_{0.17}}{dt} = \frac{dN_{C_iC_s}}{dt} + \frac{dN_A}{dt}. \quad (9)$$

Величину энергии диссоциации комплекса C_iC_s определяем, сопоставляя расчетные данные кинетики от-

жига дефектов $D_{0.17}$ с экспериментальными, полученными при изохронном отжиге n -Si, облученного легкими частицами. В результате такого сравнения определено значение энергии диссоциации комплекса: $E_{C_iC_s} = (1.10 \pm 0.05)$ эВ.

На рисунке приведены зависимости $N_{0.17}$ от температуры изохронного отжига облученного n -Si, полученные из решения уравнения (9). При решении предполагалось, что отжиг центра C_iC_s происходит путем распада его на углерод замещения C_s и межузельный атом углерода C_i , мигрирующий по кристаллу с энергией $W_{C_i} = 0.87$ эВ. Значение энергии диссоциации центра C_iC_s принималось равным 1.05 эВ (рисунок, a) и 1.13 эВ (рисунок, b). Энергия активации отжига A -центра полагалась равной 2.27 эВ. Точками представлены экспериментальные данные, взятые из работы [4], полученные при изохронном отжиге n -Si, облученного γ -квантами ^{60}Co (рисунок, a) и быстрыми (4 МэВ) электронами (рисунок, b). Согласие расчетных кривых с экспериментальными данными свидетельствует в пользу предложенного значения энергии диссоциации комплекса C_iC_s $E_{C_iC_s} = (1.10 \pm 0.05)$ эВ.

Энергия активации $E_{aC_iC_s}$ процесса отжига центра C_iC_s в предположении механизма распада комплекса на составляющие его компоненты, согласно (7), равна $1.10 + 0.87 + 0.02 = 1.99$ эВ ≈ 2.0 эВ.

Зная энергию активации процесса отжига A -центра $E_{aA} = 2.27$ эВ, можно оценить энергию диссоциации этого центра E_A следующим образом. Предполагаем, что A -центр отжигается, распадаясь на межузельный атом кислорода O_i и мигрирующую по кристаллу вакансию V :



Тогда аналогично (7)

$$E_{aA} = E_A + W_A^{\text{el}} + W_V, \quad (11)$$

откуда

$$E_A = E_{aA} - W_A^{\text{el}} - W_V, \quad (12)$$

где E_A — энергия диссоциации A -центра;

$$W_A^{\text{el}} = \varepsilon_V 2f_V^{-} + \varepsilon_A f_A^{-} \quad (13)$$

— энергия вклада электронной подсистемы кристалла в скорость реакции (10),

$$W_V = W_V^{-} f_V^{-} + W_V^0 f_V^0 \quad (14)$$

— энергия миграции высвободившейся вакансии. После вычислений получим:

$$W_A^{\text{el}} = -0.39 \cdot 10^{-5} + 0.17 \cdot 3 \cdot 10^{-3} = 0.51 \cdot 10^{-3} \text{ эВ},$$

$$W_V = 0.18 \cdot 10^{-5} + 0.33 \cdot 1 = 0.33 \text{ эВ},$$

$$E_A = 2.27 + 0.51 \cdot 10^{-3} - 0.33 = 1.94 \text{ эВ}.$$

Таким образом, энергия диссоциации A -центра составляет $E_A = 1.94$ эВ.

Авторы приносят благодарность Л.С. Смирнову, О.В. Наумовой и В.Ф. Стасю за полезные дискуссии.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 00-15-96801).

Список литературы

- [1] А.В. Васильев, В.И. Панов, С.А. Смагулова, С.С. Шаймеев. ФТП, **21**, 573 (1987).
- [2] А.Г. Литвинко, Л.Ф. Макаренко, Л.И. Мури́н, В.Д. Ткачев. ФТП, **14**, 776 (1980).
- [3] L.I. Murin. Phys. St. Sol. (a), **93**, K147 (1986).
- [4] И.Ф. Медведева, Л.Ф. Макаренко, В.П. Маркевич, Л.И. Мури́н. Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, № 3, 19 (1991).
- [5] B.G. Svensson, J.L. Lindstrom. Phys. Rev. B, **34**, 8709 (1986).
- [6] Н.И. Бояркина. ФТП, **34**, 425 (2000).
- [7] А.И. Баранов, А.В. Васильев, В.Ф. Кулешов, А.Ф. Вяткин, Л.С. Смирнов. Препринт: *Константы скорости реакций между многозарядными центрами в полупроводниках* (Черноголовка, 1985).
- [8] G. Davies, E.C. Lightowlerst, R.C. Newmant, A.S. Oates. Semicond. Sci. Technol., **2**, 524 (1987).

Редактор Л.В. Шаронова

Dissociation energies of a C_iC_s and A -center complex in silicon

N.I. Boyarkina, S.A. Smagulova, A.A. Artemjev**

Institute of Physics of Semiconductors,
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,
630090 Novosibirsk, Russia

*The Yakut State University,
677891 Yakutsk, Russia

Abstract The interstitial-substitutional carbon atom complexes and A -centers annealing reactions in n -type silicon irradiated by fast electrons or by γ -rays ^{60}Co have been considered. The calculation of the isochronal annealing kinetics of these centers is made. From the comparison of the results calculated against experimental data obtained in measurements of the concentration of the centers with the level $E_c - 0.17$ eV (during the isochronal annealing of irradiated n -type silicon) the C_iC_s -complex dissociation energy $E_{C_iC_s} = 1.10 \pm 0.05$ eV was determined. Effective annealing activation energy $E_{aC_iC_s} \approx 2.0$ eV. Dissociation energy of the A -center was evaluated, $E_A = 1.94$ eV.