РАДІАЦІЙНО-СТИМУЛЬОВАНА ПЕРЕБУДОВА ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ КРЕМНІЮ

Б.В. ПАВЛИК, Р.М. ЛИС, А.С. ГРИПА, Д.П. СЛОБОДЗЯН, І.О. ХВИЩУН, Й.А. ШИКОРЯК, Р.І. ДІДИК

Львівський національний університет ім. І. Франка
(Вул. Генерала Тарнавського, 107, Львів 79017; e-mail: lys_r@ukr.net)

УДК 621.315.592, 620.19, 538.971
©2011

Запропоновано фізичну та математичну моделі процесу радіаційно-стимульованого впорядкування дефектної структури кристалів кремнію. У даній моделі враховано збільшення коефіцієнта дифузії міжвузловинного кремнію в полі дії радіації, зменшення часу життя дефектів при дозах опромінення до 260 Гр. Ефективними стоками дефектів вважали вільні поверхні кристалів, межі поділу фаз, дислокації.

1. Вступ

Основними чинниками, які викликають деградацію елементів напівпровідникової електроніки, є процеси генерування, еволюції та міграції структурних дефектів кристалічної ґратки як ростових, так і утворених дією зовнішніх факторів (обробка поверхні кристалів, температура, іонізуючі та інші поля).

Одним із можливих методів удосконалення найбільш дефектної приповерхневої області кристалів є низькодозне іонізуюче опромінення. Така дія іонізуючих полів супроводжується декількома факторами: утворення радіаційних дефектів, взаємодія радіаційних і біографічних дефектів, анігіляція і накопичення дефектів. Залежно від того, які з цих процесів будуть домінуючими, можливі або покращання, або погіршення електрофізичних характеристик матеріалів та приладів, виготовлених на їхній основі.

У науковій літературі процеси радіаційно-стимульованого дефектоутворення в напівпровідникових кристалах достатньо повно описано [1–3]. Фізику процесів, пов'язаних з поліпшенням характеристик кристалів та приладів під дією малих доз радіації ("ефект малих доз"), вивчено неповністю, хоча у практичній технології виготовлення приладів напівпровідникової електроніки цей ефект вже використовується. Тому дослідження в даній області є актуальними.

Особливо чітко "ефект малих доз" проявляється при дослідженнях радіаційно-стимульованих процесів у поверхнево-бар'єрних структурах. Дослідженню причин відхилення від теоретично розрахованих значень параметрів МОН-транзисторів та діодів (рухливості носіїв заряду та порогові напруги) за наявності структурних дефектів присвячено багато робіт [4, 5].

Фізичну природу таких процесів аналізують з врахуванням декількох факторів:

– дія опромінення супроводжується генеруванням у кристалах дефектів Френкеля, які, взаємодіючи з рекомбінаційно-активними домішками, змінюють їхній зарядовий стан та переріз захоплення носіїв заряду;

– перехід рекомбінаційної домішки з вузла у міжвузля кристалічної ґратки у результаті взаємодії з міжвузловинним атомом матриці;

– взаємодія міжвузловинного центру рекомбінації (I) з вакансією (V), створеною опроміненням, що супроводжується анігіляцією останніх;

– між напівпровідником та окислом існує сильно дефектний шар товщиною декілька сотень ангстрем, в якому розміщена велика частина швидких центрів. До складу таких центрів входять френкелівські пари, їхні асоціати з киснем та легуючою домішкою, дівакансії.

У кристалах кремнію радіаційно-стимульоване зменшення концентрації рекомбінаційно-активної домішки пояснюється ефектами внутрішнього гетерування домішки та легуючих атомів поверхнями кисне-

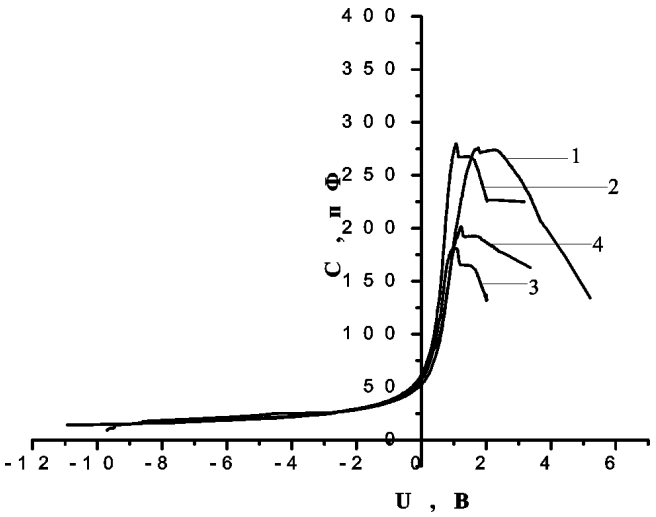

Рис. 1. Вольт-фарадні характеристики структур Bi–Si–Al при T=100 К та частоті модуляції 5 кГц, опромінених дозами: *1* – неопромінений; *2* – 130 Гр ; *3* – 260 Гр; *4* – 390 Гр

вих преципітатів та дислокаціями, які утворюються при технологічній обробці кристалів [6].

Раніше в роботах [3–5] було показано, що на початковій стадії опромінення ефективність радіаційно-стимульованих змін параметрів напівпровідникових структур має тенденцію до насичення, що також добре корелює з даними робіт [3, 6, 7].

Аналіз наукових публікацій та отримані нами експериментальні результати по вивченню особливостей радіаційно-стимульованої еволюції дефектної структури у кристалах кремнію були підставою для побудови фізичної та математичної моделей процесу радіаційно-стимульованого покращання характеристик поверхнево-бар'єрних структур на базі кристалів p-Si.

2. Експериментальні результати та їх обговорення

На рис. 1 подано дозові залежності зміни вольт-фарадних характеристик (ВФХ) Bi–Si–Al – структур під дією X-променів (Cu, 50 кВ, 10 мА).

Як видно з наведених залежностей, збільшення величини поглинутої дози радіації до 260 Гр приводить до зменшення амплітуди характерного максимуму ВФХ, який зумовлений накопиченням заряду в діелектричному приповерхневому шарі напівпровідника при формуванні поверхнево-бар'єрної структури (ПБС). Генеровані радіацією структурні дефекти є центрами рекомбінації. На початковій стадії опромінення ($D < 260$ Гр) в ПБС домінують рекомбінаційні процеси, а за подальшого збільшення дози опромінення – починають домінувати процеси генерації та накопичення нових радіаційних дефектів. При цьому вже спостерігається не покращення, а погіршення електрофізичних характеристик досліджуваних ПБС.

Виявлено [6,8] також вплив опромінення на час життя електрично-активних дефектів та неосновних носіїв заряду. На початкових стадіях опромінення кристалів Si час життя неосновних носіїв τ зростає в 2–4 рази, а потім починає зменшуватись. Відпал сприяє зростанню τ по крайній мірі до 250 °C.

Така залежність часу життя пояснюється дією двох процесів:

1. Зменшенням числа рекомбінаційно-активних центрів хімічної природи (Au, Cu та ін.), що зумовлює ріст τ.

2. Зменшення τ за рахунок безперервного збільшення з дозою числа радіаційно-введених центрів рекомбінації і локалізацією електрично-активної домішки на вакансіях. Імовірно, при певних дозах процес 1 сповільнюється, а процес, описаний в пункті 2, виходить на насичення значно пізніше.

Для опису наведених вище процесів нами використано модифіковане рівняння дифузії міжвузловинного кремнію під впливом радіації:

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2} - \frac{N(x,t)}{\tau(t)} + G, \qquad (1)$$

де $N(x,t)$ – концентраційний розподіл міжвузловинного кремнію (Si_i), D^* – коефіцієнт дифузії Si_i у полі радіації, G – швидкість генерації Si_i, $\tau(t)$ – час життя Si_i.

У рівнянні (1) нами враховано радіаційно-стимульовану зміну коефіцієнта дифузії введенням D^*, який на два порядки більший за рахунок дії радіації порівняно з коефіцієнтом дифузії при цій же температурі [1].

Для розв'язання цього рівняння необхідно вибрати початкові та граничні умови. Вважаючи, що ефективними стоками для Si_i є дислокації, вільні поверхні та межі поділу напівпровідника з діелектриком чи металом, крайові умови можна записати у такому вигляді:

$$N(x,0) = N_0 = f(x),$$

$$N(0,t) = N_0 \exp(\alpha t) = g(t),$$

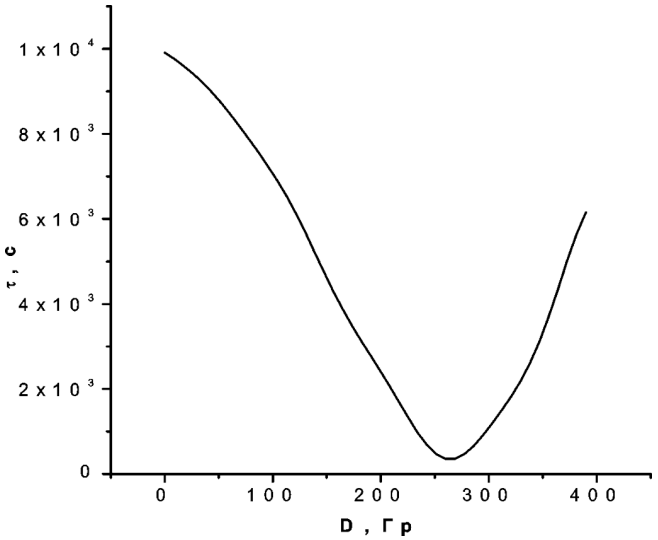

Рис. 2. Залежність часу життя кремнію у міжвузловинному стані від дози опромінення

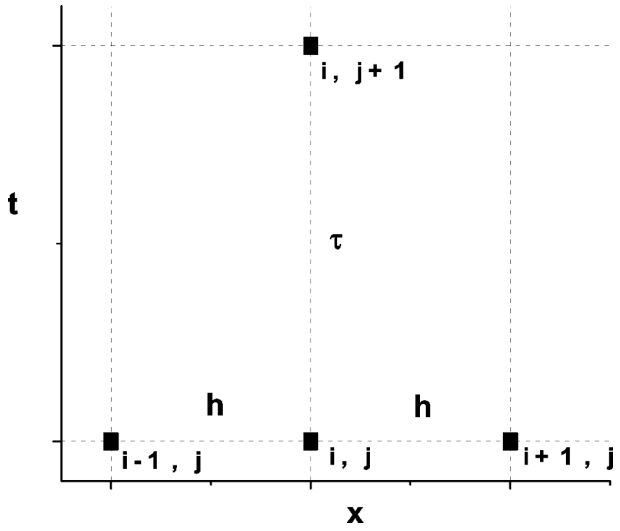

Рис. 3. Прямокутна ґратка явної різницевої схеми

$$N(l,t) = N_0 \exp(\beta t) = q(t),$$

де $N(0,t)$, та $N(l,t)$ – концентрація дефектів Si_i на поверхні зразка, l – товщина зразка, N_0 – середня концентрація міжвузловинного кремнію, $\alpha = \beta = 2,7 \cdot 10^{-4}$ – сталі. За початковий розподіл можна взяти, наприклад, нормальний розподіл Гауса.

З аналізу літературних даних [1, 9, 10] для моделювання процесів дифузії дефектів у кристалах кремнію взято такі значення початкових параметрів: коефіцієнт дифузії $D = 10^{-16}$ м^2/с при нормальних умовах і $D^* = 10^{-14}$ м^2/с при опроміненні; швидкість генерації дефектів у напівпровіднику при дії радіації $G = 10^{13}$ м$^{-3}$/с; середній час життя дефектів у кристалі без опромінення $\tau = 10^4$ с; середня концентрація міжвузловинного кремнію $N_0 = 10^{17}$ м$^{-3}$; товщина зразка $l = 5 \cdot 10^{-4}$ м; час експерименту 90 хвилин, що відповідає дозі 360 Гр.

Аналіз наших попередніх досліджень та літературних даних [1, 3, 6, 8–10] дозволив побудувати функцію $\tau(D)$ у вигляді кривої, яку наведено на рис. 2. На цій залежності можна виділити дві ділянки:

1. Ділянка зменшення часу життя дефектів на початковій стадії опромінення, починаючи зі значення τ_0, яке відповідає часу життя до опромінення, до його мінімального значення, що характеризується однаковою ефективністю процесів гетерування та рекомбінації дефектів, з одного боку, а з іншого – їхньої генерації.
2. Ділянка, що характеризується значною перевагою процесу генерації дефектів в полі радіації.

Щоб уникнути ускладнень під час розв'язування рівняння дифузії, ми протабулювали функцію $\tau(D)$ і вважали значення τ миттєвим.

Задачу було розв'язано чисельно із використанням явної різницевої схеми. Для цього було побудовано рівномірну прямокутну (рис. 3) ґратку за допомогою координатних ліній:

$$x_i = ih, \quad i = (\overline{0, I}),$$

$$t_j = j\tau, \quad j = (\overline{0, J}),$$

де h, τ – кроки ґратки по осях x і t відповідно.

Значення $N(x,t)$ у вузлах ґратки позначимо N_i^j, тобто $N_i^j = N(x_i, \tau_j)$. Апроксимуємо N_i^j значенням n_i^j. Використаємо шаблон явної схеми.

Тоді за допомогою скінченних різниць одержимо таку різницеву схему:

$$\begin{cases} \dfrac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\tau} = A\dfrac{n_{i+1}^j - 2n_i^j + n_{i-1}^j}{h^2} + Bn_i^j + C, \\ i = (\overline{1, I-1}), i = (\overline{0, J}), \\ n_0^j = g(t_j), \\ n_I^j = q(t_j), \\ n_i^0 = f(x_i). \end{cases} \tag{2}$$

У рівняння (2) підставляємо такі значення:

$$A = D; \quad B = -1/\tau_0; \quad C = G.$$

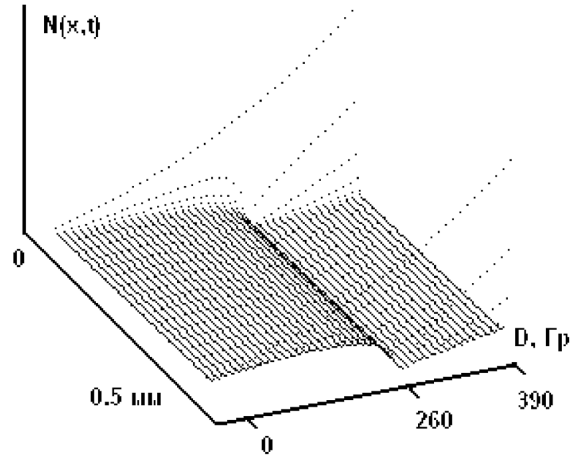

Рис. 4. Залежність середньої концентрації дефектів в об'ємі кремнію при різних перерізах кристала від величини поглинутої дози опромінення

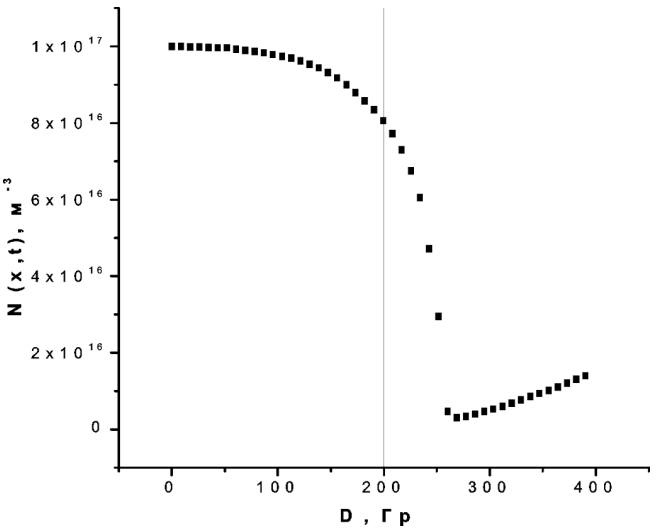

Рис. 5. Залежність середньої концентрації дефектів в об'ємі кремнію ($x = 0,25$ мм) від дози опромінення

Оскільки $h = l/I$, то $x_i = ih = il/I$; $\tau_j = j\tau$; l – товщина зразка.

Явним сітковим методом шукаємо n_i^j ($i = \overline{0, I}$; $j = \overline{0, J}$) та записуємо їхні значення у масив $n[i, j]$. Сформувавши цей масив, виводимо на графік отриману таким способом точково задану поверхню (рис. 4).

Формування і розв'язання нашого рівняння сітковим методом було виконано у середовищі математичного пакету Maple [11].

У фізичній моделі процесу радіаційно-стимульованої дифузії дефектів кремнію вважаємо, що на початкових стадіях опромінення одночасно протікають такі процеси:

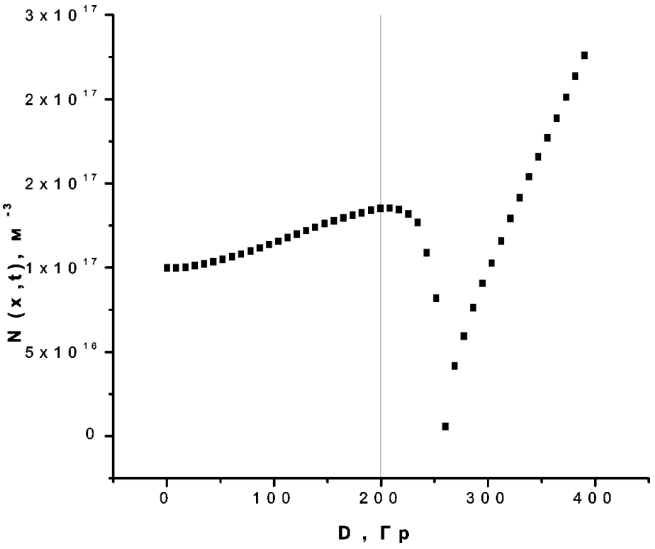

Рис. 6. Залежність середньої концентрації дефектів у приповерхневій області кремнію ($x = 10^{-5}$ м) від дози опромінення

– генерація радіаційних структурних дефектів;

– різке збільшення величини коефіцієнта дифузії міжвузловинного кремнію (на 2-4 порядки), що може стати причиною зменшення концентрації власних структурних дефектів на 1-2 порядки [1];

– гетерування дефектів (міжвузловинного кремнію) на дислокаціях, вільних поверхнях, межах поділу середовищ;

– рекомбінаційні процеси, ефективність яких пов'язана з рухливістю компонент.

Результати отриманих розрахунків показано на рис. 4–6. На цих залежностях чітко простежуються характерні області:

– на початковій стадії опромінення ($D < 200$ Гр) концентрація структурних дефектів зазнає відносно малих змін ($\pm 20\%$) (рис. 5, 6), що характеризуються приблизно однаковою ефективністю процесів генерування та анігіляції дефектів;

– область різкого зменшення концентрації в об'ємі та у приповерхневому шарі при $D = 260$ Гр зумовлена домінуванням процесів радіаційно-стимульованого гетерування і рекомбінації дефектів над процесами генерування дефектів; що відповідає максимуму ефекту радіаційно-стимульованого впорядкування;

– область ($D > 260$ Гр), що характеризується переважанням процесу генерування дефектів над їх радіаційно-стимульованим впорядкуванням. Причому ефективність процесів генерації та накопичення

радіаційних дефектів є значно більшою у приповерхневому шарі порівняно із об'ємом зразка.

3. Висновки

Аналіз експериментальних та розрахункових даних дозволяє стверджувати, що у кристалах p-Si на початковій стадії опромінення ефект радіаційно-стимульованого впорядкування проявляється інтенсивніше в більш дефектній приповерхневій області (у порівнянні з об'ємом зразка).

Запропонована фізична модель процесу радіаційно-стимульованої перебудови дефектної структури добре корелює із експериментальними результатами.

1. Т.Д. Джафаров, *Радиационно-стимулированная диффузия в полупроводниках* (Энергоатомиздат, Москва, 1991).
2. В.С. Вавилов, Н.П. Кекелидзе, Л.С. Смирнов, *Действие излучений на полупроводники* (Наука, Москва, 1988).
3. О.Ю. Борковская, П.Л. Дмитрук, В.Г. Литовченко, О.П. Мищук, ФТП **23**, № 2, 207 (1989).
4. I.V. Marchishin, V.N.Ovsyuk, and S.B. Sevastianov, Phys. Stat. Sol. A **106**, 153 (1988).
5. Б.В. Павлик, М.В. Лишак, УФЖ **51**, № 3, 275 (2006).
6. В.В. Болотов, В.А Коротченко, А.П Мамонтов, А.В. Ржанов, Л.С. Смирнов, С.С. Шаймеев, ФТП **4**, 2257 (1980).
7. B. Pavlyk, B. Tsybulyak, O. Klochan, Rad. Eff. Defects Solids **158**, 151 (2002).
8. В.А. Сминтина, І.Р. Яцунський, О.А. Кулініч, М.А. Глауберман, Фізика і хімія твердого тіла **9**, № 4, 701 (2008).
9. В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь, *Радиационная физика полупроводников* (Наукова думка, Київ, 1979).
10. В.В. Лукьяница, ФТП **37**, Вип. 4, 422 (2003).
11. В.П. Дьяконов, *Maple 9.5/10 в математике, физике и образовании* (Солон-прессс, Москва, 2006).

Одержано 14.04.10

РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННАЯ ПЕРЕСТРОЙКА ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Б.В. Павлык, Р.М. Лыс, А.С. Грыпа, Д.П. Слободзян, И.О. Хвищун, Й.А. Шикоряк, Р.И. Дидык

Р е з ю м е

Предложены физическая и математическая модели процесса радиационно-стимулированного упорядочения дефектной структуры кристаллов кремния. В данной модели учтено увеличение коэффициента диффузии межузельного кремния в поле действия радиации и уменьшение времени жизни дефектов при дозах облучения до 260 Гр. Эффективными стоками дефектов считали свободные поверхности кристаллов, границы раздела фаз, дислокации.

RADIATION-INDUCED REARRANGEMENT OF DEFECTS IN SILICON CRYSTALS

B.V. Pavlyk, R.M. Lys, A.S. Hrypa, D.P. Slobodzyan, I.O. Khvyshchun, J.A. Shykoryak, R.I. Didyk

Ivan Franko Lviv National University
(*107, Tarnavskyi Str., Lviv 79019, Ukraine; e-mail: lys_ r@ukr.net*)

S u m m a r y

Physical and mathematical models of the radiation-induced ordering of a defect structure in silicon crystals are proposed. These models involve an increase of the diffusion coefficient of interstitial silicon in the irradiation field and a reduction of the defect lifetime at irradiation doses below 260 Gy. Free surfaces of crystals, phase interfaces, and dislocations are considered to be effective defect sinks.