

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛАСТЕРОВ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Л.Ф. Макаренко, Е.А. Левчук

Белорусский государственный университет,

пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь, makarenko@bsu.by, liauchuk.alena@gmail.com

Проведено численное моделирование заполнения глубоких ловушек, находящихся в кластерах сферической и эллипсоидальной формы. Результаты моделирования использованы для оценки параметров кластеров дивакансий в кремнии, облученном быстрыми нейтронами.

Введение

При облучении полупроводников высокоэнергетическими ядерными частицами (протонами, нейтронами и ионами) в результате столкновений атомам решетки может передаваться большая энергия с последующим образованием большого количества первичных радиационных дефектов в локальной области кристалла. В результате реакций между первичными дефектами непосредственно после облучения образуются области с высокой концентрацией устойчивых дефектных комплексов – кластеры (скопления) дефектов. Как правило, образующиеся дефектные комплексы компенсируют исходную проводимость кристаллов. То есть, дефекты в кластерах захватывают основные носители заряда, и кластеры дефектов приобретают избыточный заряд. Этот избыточный заряд экранируется подвижными носителями заряда – в полупроводнике создается рельеф потенциала, который изменяет скорости неравновесных электронных процессов [1]. Для предсказания изменения характеристик полупроводниковых приборов под действием облучения тяжелыми ядерными частицами необходима информация о параметрах устойчивых кластеров дефектов: число дефектов в кластерах, их форма и размеры, функция распределения дефектов внутри в кластерах и т.д. Однако в настоящее время отсутствует достоверная экспериментальная информация о таких параметрах кластеров дефектов в кристаллах кремния, облученных нейтронами и ионами.

DLTS является одним из наиболее распространенных методов определения параметров кластеров. В работе [2] предложено использовать этот метод для изучения кластеров радиационных дефектов в кремнии. Метод основывался на модифицированной модели сферического кластера, предложенной ранее в [3]. Несколько иное рассмотрение модели сферического кластера было проведено в работе [4]. Было показано, что основными проявлениями кластеризации дефектов являются: во-первых, температурная зависимость амплитуды пиков дивакансий в различных зарядовых состояниях $S_{\max}(T)$ и их отношение [1–3], во-вторых, “растянутая” кинетика заполнения кластеризованных дефектов [3, 4]. В данной работе исследуется первые две характеристики. В отличие от методов, использующих получение приближенного аналитического решения, мы использовали для нахождения общих закономерностей влияния кластеров на электрические свойства полупроводника числен-

ное решение соответствующих математических задач.

Постановка задачи

Распределение электрического потенциала φ в кластере с цилиндрической симметрией удовлетворяет задаче для нелинейного уравнения Пуассона:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho_c(\rho, z, \varphi)}{\epsilon \epsilon_0}, \quad \rho > 0, \quad -\infty < z < +\infty, \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad \varphi \xrightarrow[\rho \rightarrow \infty]{} 0, \quad \varphi \xrightarrow[|z| \rightarrow \infty]{} 0, \quad (2)$$

ρ_c – распределение плотности заряда – для кластеров моновалентных и дивалентных дефектов определяется следующим выражением:

$$\rho_c(\rho, z, \varphi) = e \left(N_d - n(\varphi) - \sum_i N_T^{(i)} f_T^{(i)} - \sum_j N_{TT}^{(j)} (f_{TT1}^{(j)} + 2f_{TT2}^{(j)}) \right), \quad (3)$$

где N_d – концентрация доноров, $N_T^{(i)}$ и $N_{TT}^{(j)}$ – функции распределения моновалентных и дивалентных ловушек соответственно, $f_T^{(i)}$, $f_{TT1}^{(j)}$ и $f_{TT2}^{(j)}$ – функции заполнения ловушек. Концентрация свободных электронов n связана с электрическим потенциалом выражением

$$n(\varphi) = N_d \exp\left(-\frac{e\varphi}{k_B T}\right). \quad (4)$$

В работе рассматривались кластеры, имеющие форму сферы и вытянутого сфероида. Распределение дефектов в вытянутом сфероидальном кластере описывалось функцией следующего вида:

$$N(\rho, z) = \frac{M}{\sqrt{\pi^3 b a^2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{a^2} - \frac{z^2}{b^2}\right), \quad (5)$$

где M – число дефектов в кластере, $a = Ry^{-1/3}$, $b = Ry^{2/3}$ ($y > 1$). При $y = 1$ получаем $a = b = R$, и, таким образом, рассматриваемый вытянутый сфероидальный кластер имеет тот же характеристический объем, что и сферический кластер с характеристическим радиусом R .

При решении задачи для нелинейного уравнения Пуассона применялся метод конечных элементов с использованием аддитивной сетки. Неограниченная область задания уравнения заменялась ограниченной областью, размеры которой зависели от характеристических размеров кластера. Для решения системы нелинейных

уравнений использовался модифицированный метод Ньютона.

Полученные значения функции $\phi(\rho, z)$ позволяют рассчитать значения чисел заполнения уровней ловушек, находящихся в различных частях кластера:

$$f_T(\rho, z) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{F + \phi(\rho, z) - E_T}{kT}\right)} \quad (6)$$

и среднюю долю заполненных ловушек \bar{f}_c :

$$\bar{f}_c = \frac{1}{M} \int N(\bar{r}) f_T(\bar{r}) d\bar{r}, \quad (7)$$

где F – уровень Ферми, E_T – уровень ловушек. По амплитуде пика в спектрах DLTS мы можем определить понижающий фактор

$$\bar{\eta}_c = \bar{f}_c / f_0 \quad (8)$$

и его температурную зависимость $\bar{\eta}_c(T)$. Именно расчет $\bar{\eta}_c(T)$ и будет основной целью настоящей работы.

Влияние параметров сферического кластера на понижающий фактор

Рассмотрим сферический кластер, в состав которого входит два типа одновалентных дефектов. Будем рассматривать случай, когда их распределения характеризуются одинаковыми значениями радиусов $R_1 = R_2$. Уровень первого дефекта положим равным $E_c = 0.225$ эВ, а второго – $E_c = 0.421$ эВ, что соответствует уровням дивакансии в кремнии. Число дефектов первого типа обозначим M_1 , а второго – M_2 . Случай, когда $M_1 = M_2$ соответствует кластеру дивалентных ловушек с большим расстоянием между уровнями, как это имеет место для дивакансий в кремнии.

На рис. 1 показаны зависимости понижающего фактора $\bar{\eta}_c$ для различных значений M_1 и R . Как и следовало ожидать, величина $\bar{\eta}_c$ падает с ростом M_1 для кластеров фиксированного радиуса. Однако имеет место корреляция между $\bar{\eta}_c$ и соотношением M_1/R_1 , т.е. кластеры с одинаковым соотношением M_1/R_1 характеризуются одним и тем же понижающим фактором $\bar{\eta}_c$ (см. рис. 2). Этот факт особенно важен с учетом того, что в процессе облучения образуются кластеры различного размера, но размер кластера коррелирует с числом входящих в его состав первичных радиационных дефектов $M \sim r^\alpha$, где $\alpha \approx 1$ [4]. Эти данные показаны на рис. 2 штриховой линией.

Как видно из рис. 2, наклоны линий 3 и 5 близки друг другу. То есть в кремнии все различные кластеры будут характеризоваться одним и тем же понижающим фактором. Этот вывод в целом согласуется с заключениями работы [4]. Однако численные значения для одних и тех же параметров кластера несколько отличаются, что связано с различием законов распределения дефектов внутри кластера, использованных в [4] и настоящей работе. Другим фактором, влияющим на абсолютные значения понижающего фактора является форма кластера.

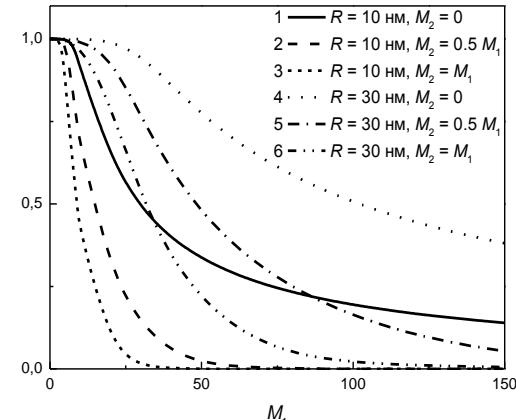


Рис. 1. Зависимость понижающего фактора от количества дефектов в кластере для различных радиусов кластера и значений M_2 ; $T = 125$ К, $N_d = 10^{15}$ см $^{-3}$, длина Дебая $L_D = 84$ нм.

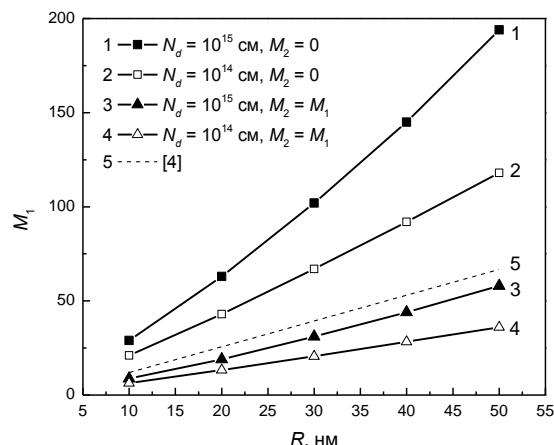


Рис. 2. Зависимость числа дефектов в первом кластере от величины радиуса кластера при понижающем факторе 0,5, для различных значений M_2 , $T = 125$ К. Для кривых 1,3 $L_D = 84$ нм, для кривых 2,4 $L_D = 265$ нм.

Температурная зависимость понижающего фактора

Из экспериментальных данных DLTS известно, что пик, соответствующий ионизации двукратно отрицательного состояния дивакансии (V_2^-) уменьшается с ростом температуры его наблюдения [4]. Этот факт объясняется тем, что с ростом температуры уровень Ферми в объеме полупроводника понижается, что приводит уменьшению члена $(F + \phi - E_T)$ в знаменателе формулы (6). Соответственно уменьшается $f_T(\rho, z)$ и \bar{f}_c . Такая температурная зависимость амплитуды пика DLTS является еще одним признаком наличия в полупроводнике кластеризованных дефектов. И, в принципе, этой зависимостью можно воспользоваться для оценки параметров кластера, даже если абсолютная величина понижающего фактора не известна.

При изучении вопроса о зависимости $\bar{\eta}_c(T)$ будем рассматривать как сферические кластеры, так и кластеры, имеющие форму вытянутого сфероида. По-видимому, модель кластеров такой

формы является более реалистичной по сравнению со сферическими кластерами. При расчетах мы задавались параметрами кластеризованных дефектов и температурами, характерными для дивакансий в кремнии.

Результаты вычислений представлены на рис. 3–4. Как видно из этих рисунков, форма кластера достаточно сильно влияет на соотношение между числом дефектов в кластере и понижающим фактором. Для кластеров вытянутой формы величина \bar{n}_c меньше для одинаковых значений M . Для вытянутых кластеров наблюдается также и более слабая зависимость \bar{n}_c от температуры.

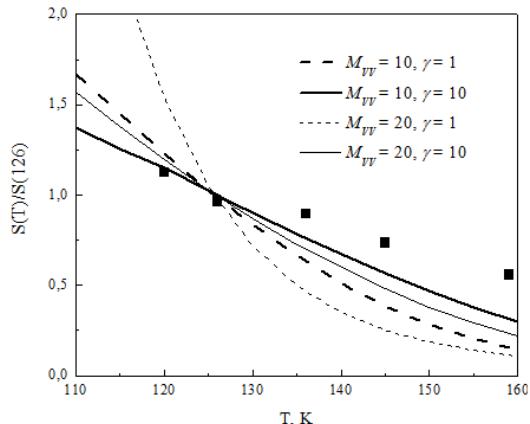


Рис. 3. Температурная зависимость амплитуды пика DLTS для двукратно заряженных дивакансий ($S(T)$) в вытянутом сфероидальном ($\gamma = 10$) и сферическом ($\gamma = 1$) кластерах при $M = 10$ и $M = 20$ (линии), а также экспериментальные данные (маркеры). Амплитуды пика нормированы на амплитуду при 126 К, $N_d = 2.55 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $R = 10 \text{ нм}$.

Результаты численного моделирования также показали, что величиной, определяющей зависимость $S_{\max}(T)$, является отношение суммарного числа дефектов в кластере (M) к его характеристическому радиусу (R). Кроме этого следует отметить, что скорость падения амплитуды сигнала DLTS с температурой уменьшается при использовании кристаллов с более высоким уровнем легирования.

MODELING OF ELECTRICAL PROPERTIES FOR DEFECT CLUSTERS IN SEMICONDUCTORS

L.F. Makarenko, E.A. Levchuk

*Belarusian State University, Nezavisimosti Ave. 4, Minsk, 220030, Belarus
makarenko@bsu.by, liauchuk.alena@gmail.com*

Numerical simulations of carrier trapping by defects situated in spherical and ellipsoidal clusters are carried out. The simulation results are used to estimate the parameters of divacancy clusters in silicon irradiated with fast neutrons.

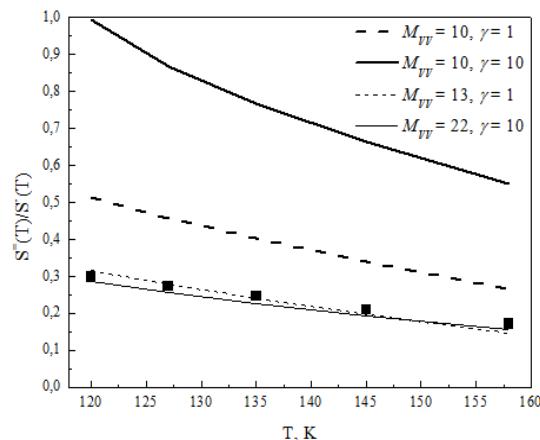


Рис. 4. Температурная зависимость отношения амплитуд пиков DLTS для двукратно ($S^+(T)$) и однократно ($S^-(T)$) заряженных дивакансий в вытянутом сфероидальном ($\gamma = 10$) и сферическом ($\gamma = 1$) кластерах (линии), а также экспериментальные данные (маркеры). Значения температуры приведены для пика двукратно заряженных дивакансий. $N_d = 2.55 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $R = 10 \text{ нм}$.

Заключение

Из результатов численного моделирования следует, что как доля регистрируемых дефектов, так и зависимость $S_{\max}(T)$ в значительной степени определяются формой кластера и дисперсией функции распределения дефектов в кластере. Неопределенность этих величин приводит к неоднозначной взаимосвязи $S_{\max}(T)$ с параметрами кластеров дефектов. Тем не менее, приведенные результаты позволяют дать разумные оценки параметров кластеров дивакансий в кремниевом облученном быстрыми нейтронами.

Список литературы

1. Bruzzi M. // EEE Transactions on Nuclear Science. 2001. V. 48. № 4. P. 960–971.
2. Антонова И.В. и др. // Физика и техника полупроводников. 1988. Т. 22. № 6. С. 998–1003.
3. Gossick J. // J. Appl. Phys. 1959. V. 30. P. 1214.
4. Fleming R.M. et al. // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. P. 043711.