

АТОМНАЯ СТРУКТУРА И МЕТОДЫ СТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 621.315.592:548.73

ВЛИЯНИЕ ФОТОВОЗБУЖДЕНИЯ IN SITU НА СТРУКТУРУ НАРУШЕННОГО СЛОЯ «КРЕМНИЙ–НА–ИЗОЛЯТОРЕ»

© 2012 г. К. Д. Щербачев, В. Т. Бублик, М. И. Воронова
ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»

Методом рентгеновской дифракции высокого разрешения и обратного розерфордского рассеяния изучены структуры «кремний–на–изоляторе» (КНИ), облученные ионами Ag^+ с энергией 100 кэВ и дозами $2 \cdot 10^{13}$ и $4 \cdot 10^{13}$ см⁻². Такой выбор энергии облучения позволил разместить максимум проективного пробега имплантируемых ионов вблизи середины слоя кремния КНИ и минимизировать возможные изменения электрического и упругого силовых полей встроенного диэлектрика в процессе облучения. В таких же условиях осуществлена имплантация при одновременном подсевивании образцов УФ–лампой интенсивностью 25 мВт · см⁻² (фотовозбуждение *in situ*). Установлено, что в случае малых доз фотовозбуждение способствует кластерообразованию как вблизи поверхности образца, так и в области максимума деформации. При дозе $4 \cdot 10^{13}$ ат/см², когда начинается аморфизация поверхности образца, фотовозбуждение уже не влияет на характер распределения радиационных дефектов. В приповерхностной области фотовозбуждение способствует стоку межузельных дефектов на поверхность.

Ключевые слова: кремний–на–изоляторе, имплантация, радиационные дефекты.

Введение

Известно, что устойчивые радиационные дефекты в кремнии, влияющие на электрические свойства кристаллов и приборов, образуются в результате квазихимических реакций, в процессе которых вакансии, возникающие непосредственно при передаче энергии излучений атомам мишени, образуют электрически активные комплексы с атомами примесей и друг с другом [1]. Известно также, что кинетика таких реакций весьма чувствительна к наличию в кристалле упругих и электрических полей в процессе облучения [2]. В то же время в структурах «кремний–на–изоляторе» (КНИ) заведомо присутствует серьезный источник силовых полей. Им является слой скрытого диэлектрика, в подавляющем большинстве случаев представляющий собой диоксид кремния SiO₂. Различие коэффициентов термического расширения Si и SiO₂ приводит к деформации слоя кремния. Фиксированный заряд, образующийся на SiO₂ в процессе его формирования, является источником электрического поля, воздействующего на заряженные дефекты в кремнии. Кроме того, толщина слоя кремния в КНИ–структуре гораз-

до меньше диффузионной длины свободной вакансии [3] и тем более межузельного атома. Очевидно, что различные свойства обоих интерфейсов, один из которых представляет собой границу со скрытым диэлектриком, а другой — границу с окружающей средой, должны также влиять на поведение вакансий и собственных межузельных атомов, возникающих при облучении кремния в качестве первичных радиационных дефектов.

Поскольку и вакансии, и межузельные атомы могут быть в различных зарядовых состояниях, фотовозбуждение электронной подсистемы мишени в процессе ионной бомбардировки, сопровождающееся генерацией неравновесных электронов и дырок, также способно повлиять на ансамбль образующихся радиационных дефектов. Цель работы — изучение особенностей образования остаточных радиационных дефектов кристаллической решетки слоя кремния КНИ–структуры в условиях фотовозбуждения *in situ*.

Объекты и методы исследования

Объектами исследования служили КНИ–структуры, которые

были изготовлены методом имплантации ионов кислорода и последующего высокотемпературного отжига (SIMOX-процесс). Тонкий слой кремния с ориентацией <111> и удельным сопротивлением 10 Ом · см имел *n*-тип проводимости. Плотность дислокационных дефектов в слое кремния составляла меньше 10² см⁻², что свидетельствовало о его высоком структурном совершенстве. Толщина слоя кремния исследованных КНИ-структур — 0,2 мкм, встроенного диэлектрика SiO₂ — 0,4 мкм, кремниевой подложки — 380 мкм.

КНИ-структуры облучали ионами Ar⁺ с энергией 100 кэВ и дозами 2 · 10¹³ и 4 · 10¹³ см². Такой выбор энергии облучения позволил разместить максимум проективного пробега имплантируемых ионов вблизи середины слоя кремния КНИ-структуры и минимизировать возможные изменения электрического и упругого силовых полей встроенного диэлектрика в процессе облучения. Для устранения каналирования угол между нормалью к поверхности и направлением пучка составлял 7°. В таких же условиях осуществляли имплантацию с фотовозбуждением (одновременное подсвечивание образцов ртутной лампой интенсивностью 25 мВт · см⁻²). Образцы, полученные в условиях фотовозбуждения *in situ*, далее для краткости будем называть подсвеченными, а образцы, имплантированные без подсветки, — неподсвеченными.

Исследование структуры слоя кремния, нарушенного имплантацией, проводили методом рентгеновской дифракции высокого разрешения в трехкристальной геометрии на рентгеновском дифрактометре D8 Discover (Bruker-AXS, Германия). Излучение — CuK_{α1}. По форме кривых дифракционного отражения (**КДО**), используя оригинальную процедуру [4], основанную на генетическом алгоритме оптимизации, было получено распределение повреждений по глубине слоя. Они описываются распределением по глубине *z* двух параметров: деформации в направлении нормали к поверхности образца $\epsilon_{zz}(z)$ и статического фактора Дебая—Валлера $L_H(z)$. Диапазон исследованных доз имплантации Ar при энергии 100 кэВ соответствует дозам, когда начинается аморфизация нарушенного слоя. При слабой аморфизации (малые дозы) вид КДО определяется распределением вакансионных и межузельных компонентов пар Френкеля по глубине нарушенного слоя. Для учета частичной аморфизации в описание модели нарушенного слоя был введен статический фактор Дебая—Валлера. Величина $L_H = 8/3[\pi(\sin\theta_B)/\lambda]^2 \langle u^2 \rangle$ (где θ_B — это угол Брэгга; λ — длина волны рентгеновского излучения) пропорциональна среднеквадратичному смещению $\langle u^2 \rangle$ атомов из их узлов в решетке, и может рассматриваться как характеристика степени кластеризации точечных дефектов. Фурье-компонента поляризуемости в искаженном кристалле χ_h^* может быть записана как $\chi_h^* = \chi_h \exp(-L_H)$, где χ_h — Фурье-компонента по-

ляризуемости в идеальном кристалле. Поскольку $0 \leq \exp(-L_H) \leq 1$, то учет статического фактора Дебая—Валлера в расчете приводит к снижению отражающей способности искаженного кристалла, что, в свою очередь, уменьшает амплитуду дифрагированной волны, пропорциональной $|\chi_h^*|$. Моделирование КДО проводили в рамках динамической теории дифракции рентгеновских лучей, используя формализм, предложенный в работе [5].

Зная величины $\epsilon_{zz}(z)$ и $L_H(z)$ и учитывая, что величина среднего квадрата статических смещений зависит от размера и числа кластеров, можно оценить концентрацию и размер (объем) кластеров, используя следующие выражения [6]:

$$L_H = \frac{8\pi\sqrt{2\pi}}{15V} H^{3/2} (q_v)^{3/2} c_{cl} (\Delta V)^{3/2};$$

$$\epsilon_{zz} = \frac{1}{3} q_v c_{cl} \frac{\Delta V}{V},$$
(1)

где $q_v = 3(C_{11} + 2C_{12})/(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$ — коэффициент, учитывающий анизотропию кристаллической решетки; C_{ij} — модули упругости; H — вектор дифракции; V — объем элементарной ячейки; c_{cl} — концентрация кластеров; ΔV — изменение объема при введении одного кластера в кристаллическую решетку подложки. Выражения (1) записаны для случая сферических кластеров, а формулы для расчета L — для случая дислокационных петель приведены в работе [7]. Согласно работе [8], дислокационные петли, которые наблюдали методом просвечивающей электронной микроскопии, возникают только после термообработки. Поскольку исследуемые образцы не были подвергнуты термообработке, и в процессе имплантации подложка не нагревалась, то будем рассматривать модель сферического кластера. Выразив из уравнений (1) c_{cl} и $\Delta V/V$ и подставив все константы, можно получить удобные для анализа профили выражения:

$$\frac{\Delta V}{V} \approx 3,1 \cdot 10^{-5} \frac{L_H^2}{\epsilon_{zz}^2};$$

$$c_{cl} \approx 6,6 \cdot 10^4 \frac{\epsilon_{zz}^3}{L_H^2}.$$
(2)

Таким образом, величина среднеквадратичных смещений (параметр L_H) может рассматриваться как характеристика степени агломерации точечных дефектов и образования кластеров (микродефектов).

Рентгенодифрактометрические данные сопоставляли с результатами, полученными методом обратного резерфордского рассеяния (**ОРР**). Профили распределения дефектов вследствие имплантации ионов аргона были построены по результатам ОРР в режиме каналирования (RBS/Channelling) с использованием пучка ионов ⁴He⁺ с энергией 2,0 МэВ. Обратное рассеянные частицы регистрировали угловым детектором, расположенным под углом 180° к направлению пучка, с разрешением по энергиям

25 кэВ. Спектры каналирования собирали для пучка, ориентированного вдоль кристаллографического направления [100]. Программу DICADA [9, 10], построенную на теоретическом описании процесса деканалирования [11, 12], использовали для интерпретации данных RBS/C. Проводили сравнение спектров каналирования для нарушенных и ненарушенных имплантацией образцов. Затем строили профили распределения дефектов, вызванных процессом имплантации.

Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 1 показаны профили распределения деформации ϵ_{zz} и статического фактора Дебая—Валлера для КНИ-структур, имплантированных ионами Ar^+ без УФ-подсветки и с подсветкой. Видно, что профили деформации в обоих случаях имеют вид кривой с максимумом. Было обнаружено, что для дозы $2 \cdot 10^{13}$ ат/см² положение максимума профиля деформации приблизительно совпадает со значением среднего проекционного пробега внедряемых ионов (~105 нм). Для малой дозы ($2 \cdot 10^{13}$ ат/см²) фотовозбуждение способствует кластерообразованию вблизи поверхности (см. рис. 1, а). Поскольку в этой области нарушенного слоя деформация меньше нуля, то, очевидно, в кластерообразовании принимают участие вакансии кремния (V_{Si}). Оценка по формулам (2) показала, что подсветка приводит как к увеличению концентрации вакансионных кластеров ($1,8 \cdot 10^{18}$ см⁻³ в неподсвеченном образце и $3,3 \cdot 10^{18}$ см⁻³ в подсвеченном), так и к их укрупнению (с 80 до 110 вакансий на кластер). При этом междузельные дефекты в кластеры не объединены, хотя в подсвеченном образце их больше. Таким образом, степень нарушения кристаллической структуры в подсвеченном образце выше, чем в неподсвеченном. Наличие аморфного слоя внутри структуры изменяет характер перераспределения радиационных дефектов. Это происходит из-за того, что слой SiO_2 ограничивает распределение и способствует накоплению междузельных дефектов [13].

В слое кремния КНИ-структуры, имплантированной ионами Ar^+ с дозой $4 \cdot 10^{13}$ ат/см², напротив, максимум профиля деформации не совпадал со значением проективного пробега внедряемых ионов (см. рис. 1, б). При этом с ростом дозы облучения максимум сдвигается в сторону поверхности, а толщина рассеивающего рентгеновское излучение нарушенного слоя кремния уменьшается. Одновременно в приповерхностной области слоя кремния КНИ-структуры резко возрастает значение статического фактора Дебая—Валлера $L_H(z)$. Такой эффект можно объяснить появлением сильно нарушенной области, которая не дает вклада в когерентное рассеяние. Данные на рис. 1, б приведены с учетом наличия у поверхности слоя кремния КНИ-структуры сильно нарушенной области. Немонотонная

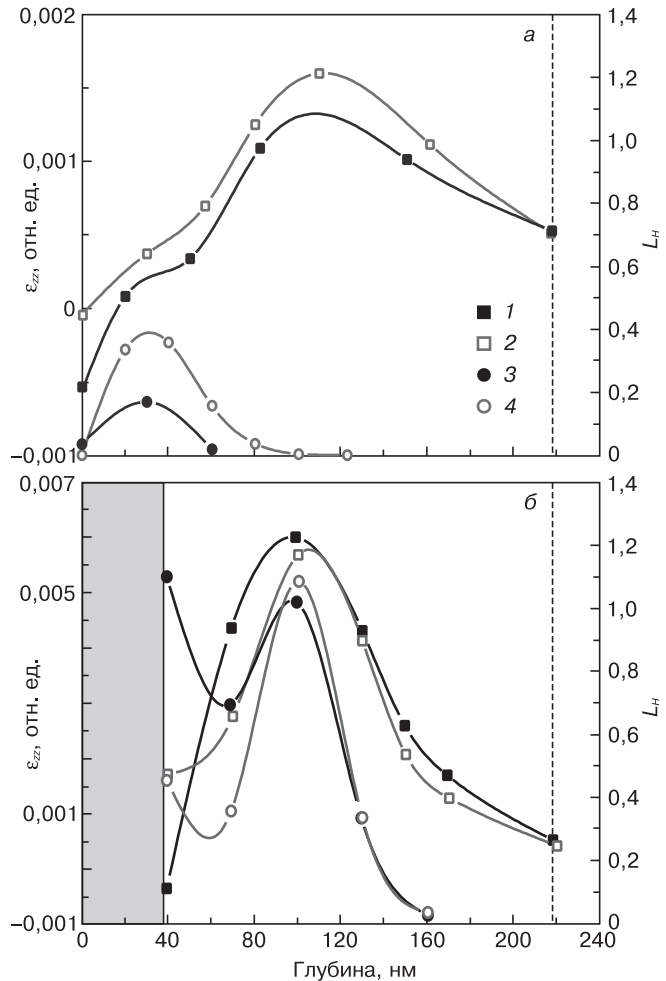


Рис. 1. Профили распределения деформации $\epsilon_{zz}(z)$ (1, 2) и среднеквадратических статических смещений $L_H(z)$ (3, 4) для КНИ-структур, имплантированных ионами Ar^+ с дозой $2 \cdot 10^{13}$ см⁻² (а) и $4 \cdot 10^{13}$ см⁻² (б): 1, 3 — без подсветки; 2, 4 — при подсветке. Штриховая линия со стрелкой — местоположение границы раздела «Si— SiO_2 ». Закрашенный прямоугольник — поликристаллическая область

область на рис. 1, б заштрихована. В работе [13] методом электронографии на отражение было показано, что данная область в верхнем кремневом слое КНИ-структуры представляет собой поликристалл. Сток междузельных дефектов к границе «поликристалл—монокристалл» идет активнее в условиях фотовозбуждения, что сказывается на уменьшении деформации вблизи этой границы (рис. 1, б).

Для данного образца оценку по формулам (2) можно выполнить только для междузельных дефектов, поскольку максимум их пространственного распределения находится вдалеке как от границы «поликристалл—монокристалл», так и от границы Si— SiO_2 , в то время как вакансионные кластеры были локализованы в разупорядоченной поликристаллической области (закрашенная область на рис. 1, б). Обнаружено, что междузельные дефекты слабо ассоциированы (3 междузельных атома на кластер) в подсвеченном и неподсвеченном образцах. Однако их количество меньше в образце, имплантированном в условиях фотовозбуждения. Тот факт, что фотовоз-

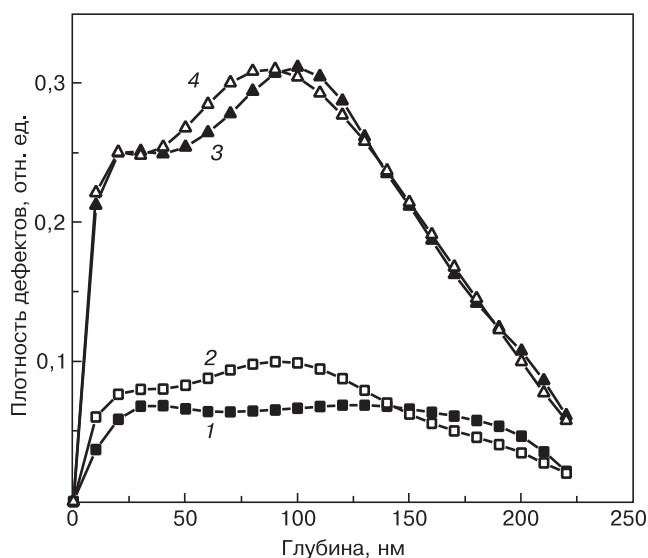


Рис. 2. Профили относительной концентрации смещенных атомов по глубине, полученные методом ОРР ионов гелия, в слое кремния КНИ-структуры без УФ-подсветки (1, 3) и в условиях фотовозбуждения *in situ* Si (2, 4), облученных ионами Ar^+ с дозой $2 \cdot 10^{13}$ (1, 2) и $4 \cdot 10^{13}$ см⁻² (3, 4)

буждение не влияет на накопление межзельных дефектов вблизи внутренней границы, может быть объяснен нейтральностью межзельного дефекта Si_i .

Данные, полученные методом ОРР (рис. 2), подтверждают результаты рентгенодифракционного эксперимента: при малой дозе дефектность верхнего слоя кремния выше у подсвеченного образца. При повышении дозы различия между подсвеченным и неподсвеченным образцами на глубине более 120 нм практически исчезают.

Заключение

Фотовозбуждение для малых доз способствует кластерообразованию вакансионных дефектов вблизи поверхности образца КНИ. При дозе $4 \cdot 10^{13}$ ат/см² дефектов так много, что фотовозбуждение уже не влияет на характер распределения межзельных дефектов в области вблизи границы «верхний слой

Si — SiO₂». В то же время наличие поликристаллического слоя на поверхности кремния облегчает сток межзельных дефектов в условиях фотовозбуждения. Важно отметить, что накопление межзельных дефектов в области аморфного слоя SiO₂ при имплантации в условиях фотовозбуждения сохраняется.

Библиографический список

1. Физические процессы в облученных полупроводниках / Под ред. Л. С. Смирнова – Новосибирск : Наука, 1977. – 256 с.
2. Morozov, N. P. Radiation defect formation at ion implantation of semiconductors in the presence of force-fields / N. P. Morozov, D. I. Tetelbaum // Phys. status solidi (a). – 1979. – V. 51. – P. 629–640.
3. Акимов, А. Г. Управляемый резистор с функциями полевого транзистора и полевого датчика Холла / А. Г. Акимов, М. Ю. Барабаненков, В. Н. Мордкович // Приборы и техника эксперимента. – 1988. – № 5. – С. 123–128.
4. Щербачев, К. Д. Применение трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии для исследования ионоимплантированных слоев / К. Д. Щербачев, А. В. Курипятник, В. Т. Бублик // Заводская лаборатория. – 2003. – № 6. – С. 23–31.
5. Wie, C. R. Dynamical X-ray diffraction from nonuniform crystalline films: Application to X-ray rocking curve analysis / C. R. Wie, T. A. Tombrello, T. Vreeland // J. Appl. Phys. – 1986. – V. 59. – P. 3743–3746.
6. Кривоглаз, М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах / М. А. Кривоглаз. – Киев : Наукова думка, 1983. – 407 с.
7. Servidory, M. Analysis of (n, -n) and (n, -n, n) X-ray rocking curves of processed silicon / M. Servidory, R. Fabri // J. Phys. B: Appl. Phys. – 1993. – V. 26. – P. A22–A28.
8. Goldberg, R. D. Secondary defect formation in self-ion irradiated silicon / R. D. Goldberg, T. W. Simpson, I. V. Mitchell, P. J. Simpson, M. Prikryl, G. C. Weatherly // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 1995. – V. 106. – P. 216–221.
9. Gartner, K. Energy dependence of dechanneling due to dislocation loops / K. Gartner, A. Uguzzoni // Ibid. – 1992. – V. 67. – P. 189–193.
10. Gartner, K. Axial dechanneling in compound crystals with point defects and defect analysis by RBS / K. Gartner // Ibid. – 1997. – V. 132. – P. 147–158.
11. Lyndard, J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles / J. Lyndard, K. Dan Vid Selsk // Mat. Fys. Medd. – 1965. – V. 34, N 14. – P. 1–65.
12. Bonderup, E. Calculations on axial dechanneling / E. Bonderup, H. Esbensen, J. U. Andersen, H. E. Schitt // Radiat. Effects. – 1972. – V. 12. – P. 261–266.
13. Щербачев, К. Д. Особенности образования радиационных дефектов в слое кремния структур «кремний–на–изоляторе» / К. Д. Щербачев, В. Т. Бублик, В. Н. Мордкович, Д. М. Пажин // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, № 6. – С. 754–758.

Авторы благодарны проф. В. Н. Мордковичу и с. н. с. Д. М. Пажину (ИПТМ РАН) за предоставленные образцы и Nuno P. Barradas, E. Alves (ITN, Сакавем, Португалия) за помощь в измерениях методом обратного резерфордовского рассеяния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы» на оборудовании ЦКП «Материаловедение и металлургия» НИТУ «МИСиС».