

ФОРМИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ E -ЦЕНТРОВ НА ГРАНИЦЕ ОБЛАСТЕЙ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА ПРИ ОТЖИГЕ ОБЛУЧЕННЫХ ДИОДОВ ШОТТКИ

Болотов В. В., Стучинский В. А.

Изучены распределения E -центров в зонном кремнии, формирующиеся при отжиге предварительно облученных быстрыми электронами обратно смещенных диодов Шоттки Au— n -Si. Обнаружено, что на границе области пространственного заряда (ОПЗ) и квазинейтрального объема (КО) образуется пик концентрации E -центров, свидетельствующий о переносе дефектов (E -центров или вакансий) из ОПЗ в КО. Получено, что длина переноса дефектов в ОПЗ за 15 мин прогрева при 135 °C достигает ~ 0.5 мкм, в то время как в КО она не превосходит 0.15 мкм.

Неполнота литературных данных о миграционных характеристиках (величинах коэффициентов и длин диффузии) точечных радиационных дефектов в кремнии обуславливает определенный интерес к экспериментам, позволяющим получить оценки указанных величин в материале с тем или иным примесным составом. В настоящей работе изучались распределения E -центров (комплексов фосфор—вакансия P_sV), формирующихся при прогреве облученных обратно смещенных диодов Шоттки Au— n -Si при температуре, когда реализуется избирательный зарядово-чувствительный отжиг этих комплексов в ОПЗ [1, 2]. Предполагалось, что в результате такого отжига на границе ОПЗ и КО могут возникнуть особенности распределений $N_E(x)$, связанные с проникновением подвижных дефектов из ОПЗ в объем кристалла.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Для изготовления диодов Шоттки использовался зонный кремний с концентрацией фосфора $N_{P_s}=5 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$. Диоды с $U_{om}=0$ В облучались на импульсном ускорителе электронами с энергией 3.5 МэВ. В спектрах DLTS облученных диодов (рис. 1) наблюдались пики, соответствующие глубоким уровням следующих дефектов: $E_c=0.18$ эВ ($C_iC_s+VO_i$), $E_c=0.23$ эВ и $E_c=0.40$ эВ (V_2), $E_c=0.30$ эВ (C_iP_s) и $E_c=0.44$ эВ (P_sV) [3, 4]. При выбранной величине «временного окна» $e_n^{-1}=2$ мс пики, соответствующие уровням $E_c=0.30$ и $E_c=0.44$ эВ, налагались друг на друга так, что измерения фиксировали суммарную концентрацию дефектов.¹ Распределение всех дефектов по глубине ($x \geq 0.3$ мкм) было однородным.

Был проведен изохронный (15 мин) отжиг облученных диодов Шоттки с $U_{cm}=0$ и -4 В. На рис. 2 показано изменение суммарной концентрации комплексов C_iP_s и P_sV в ОПЗ и КО. Первая (низкотемпературная) стадия обусловлена отжигом комплексов C_iP_s , вторая — E -центров [1, 2, 4]. Видно, что, отжигая облученные диоды при 135 °C, можно достичь практически полного отжига E -центров в ОПЗ при почти неизменной их концентрации в КО. В соответствии с этим несколько облученных диодов подвергались отжигу при 135 °C

¹ Вклад дивакансий (уровень $E_c=0.40$ эВ) определяли независимым измерением концентрации уровней $E_c=0.23$ эВ.

в течение 15 мин с различными $U_{\text{см}}$. Измеренные распределения E -центров в базе этих диодов приведены на рис. 3 (сплошные линии проведены по экспериментальным точкам для визуализации распределений, штриховыми и пунктирными линиями представлен результат модельного расчета; см. далее). Как

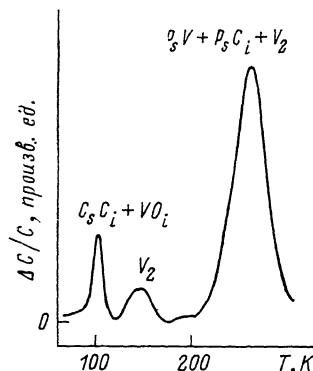


Рис. 1. Спектр DLTS облученного диода Шоттки Au—n-Si.

Кремний БКЭФ-1, $e_n^{-1} = 2 \text{ мс}$.

$U_{\text{см}} = 0 \text{ В}$, $T_{\text{отж}} = 135 \text{ }^{\circ}\text{C}$

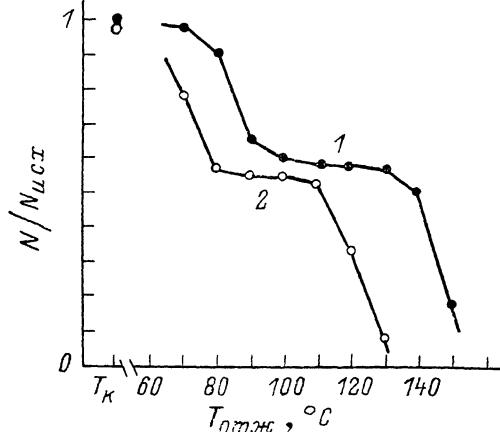


Рис. 2. Изохронный (15 мин) отжиг суммарной концентрации E -центров и комплексов C_sP_s на глубине от 0.71 до 0.85 мкм.

$U_{\text{см}} = 0 \text{ В}$, $T_{\text{отж}} = 135 \text{ }^{\circ}\text{C}$

$h = 0.46 \text{ мкм}$

$h = 1.13 \text{ мкм}$

видно, на границе ОПЗ и КО ($x=h$) обнаруживается пик концентрации E -центров, возникающий, очевидно, вследствие переноса подвижных дефектов из области, где E -центры становятся нестабильными, в объем кристалла. Кроме того, наблюдается некоторый спад $N_E(x)$ к поверхности при отжиге несмешен-

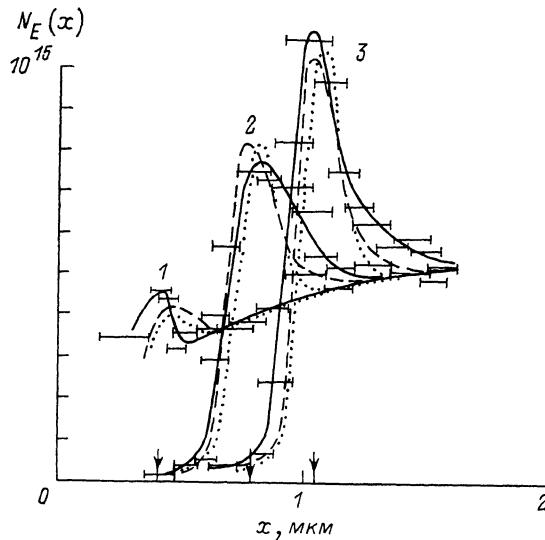


Рис. 3. Распределения E -центров по глубине в базе облученных диодов Шоттки Au—n-Si. $\Phi_0 = 2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, $T_{\text{отж}} = 135 \text{ }^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{отж}} = 15 \text{ мин}$. $U_{\text{см}}$ при облучении 0 В. $U_{\text{см}}$ при отжиге, В: 1 — 0; 2 — 2; 3 — 4. Штриховые и пунктирные линии — модельный расчет согласно вариантам 1 и 2 соответственно.

ных диодов на глубинах до 1.5 мкм. Величина этого спада варьировалась от одной партии образцов к другой, причем в случае, показанном на рис. 3, она соответствовала максимальной, а в других случаях спад практически отсутствовал. Вероятно, указанный спад $N_E(x)$ мог быть обусловлен пассивацией E -центров проникающим с поверхности при отжиге подвижным компонентом. Возможно, то же явление наблюдалось и в работе [5].

В настоящее время отсутствует единая точка зрения на механизм отжига E -центров в кремнии [6, 7]. Предполагается, что может происходить как диссоциация комплекса ($P_s V \rightarrow P_s + V$), так и миграция его как целого на стоки. Поскольку неясно, какая из этих двух возможностей реализуется при $135^\circ C$, рассмотрим оба возможных варианта.

Вариант 1: имеет место диссоциация E -центров. В этом случае формирование пика $N_E(x)$ при $x=h$ происходит вследствие переноса освободившихся после отжига E -центров вакансий из ОПЗ в КО и захвата их там на фосфор. Перенос свободных вакансий из ОПЗ в КО обеспечивается, по-видимому, диффузией нейтральных вакансий (V^0). Действительно, вакансии при распаде нейтральных E -центров могут освобождаться в состоянии V^0 или (если распад идет через нейтральный промежуточный комплекс, как предполагается в [8]) в состоянии V^- . Оценим длину дрейфа V^- в поле ОПЗ во втором случае. Для времени эмиссии электрона с уровня $V^- E_g = E_c - 0.3$ эВ [7], полагая, что величина сечения l_n захвата электрона на V^0 находится в диапазоне $10^{-18} \div 10^{-15}$ см $^{-2}$, имеем оценку $\tau = (\sigma_n v_n N_c)^{-1} \exp\left(\frac{E_c - E_{g^-}}{kT}\right) \approx 5 \cdot (10^{-9} \div 10^{-6})$ с [9]. С учетом известных данных о подвижности $V^- (\mu) = \frac{eD_0}{kT} \exp\left(-\frac{0.25 \text{ эВ}}{kT}\right) \sim 2 \times 10^{-6}$ см $^2/B \cdot \text{с}$ при $135^\circ C$ [7] получаем, что дрейф в поле с напряженностью $E \sim 5 \cdot 10^4$ В/см (среднее поле при $U_{ox} = -4$ В) приводит к перемещению V^- на расстояние $l_E = \mu E \tau = 5 \cdot (10^{-6} \div 10^{-8})$ мкм, что не обеспечивает переноса достаточного количества вакансий для формирования наблюдаемых особенностей распределений $N_E(x)$ при $x=h$. Между тем количество запасаемых в пике N_E при $x=h$ вакансий составляет от одной трети до половины отжигающихся в ОПЗ E -центров (рис. 4). Рост величины пика при увеличении h вплоть до $h=1$ мкм

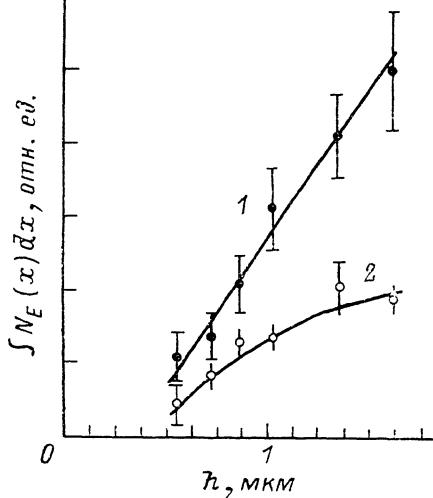


Рис. 4. Зависимость количества отожженных в ОПЗ E -центров (1) и числа E -центров в пике $N_E(x)$ при $x=h$ (2) от ширины ОПЗ h .

(рис. 4) свидетельствует о том, что длина диффузии V^0 в ОПЗ при $135^\circ C$ достигает величины $\sim h/2 \approx 0.5$ мкм. Спад $N_E(x)$ при $x > h$ позволяет оценить сверху длину диффузии вакансий в КО $l_v^{KO} \leq 0.15$ мкм. Столь заметное различие длин переноса вакансий в ОПЗ и КО связано, по-видимому, с двумя обстоятельствами: 1) фосфор в ОПЗ при рассматриваемой температуре перестает быть центром захвата для вакансий, но является, вероятно, центром прилипания; 2) зарядовые состояния вакансий в ОПЗ и КО различаются: в ОПЗ вакансии нейтральны (см. выше), в КО — заряжены отрицательно по крайней мере частично, поскольку уровень Ферми E_F в образцах при температуре отжига находился при $E_c - 0.32$ эВ, т. е. был близок к уровню $V^- E_c - 0.30$ эВ [7]. Хорошее соответствие оценки $l_v^{KO} \leq 0.15$ мкм значению длины диффузии заряженных вакансий при захвате их на кулоновские притягивающие донорные центры $l_g = (4\pi N_{P_s} R_{kul})^{-1/2} \approx 0.067$ мкм ($R_{kul} = e^2/4\pi\epsilon\epsilon_0 kT \sim 35$ Å — радиус захвата) [8] также указывает на то, что вакансии в КО заряжаются отрицательно.

Вариант 2: при отжиге E -центры мигрируют как целое на стоки. В этом случае формирование пика $N_E(x)$ при $x=h$ связано с проникновением нейтральных E -центров из ОПЗ, где они подвижны (энергия активации диффузии $E_g \approx 0.95$ эВ [1]), в КО, где комплексы захватывают электроны и становятся малоподвижными ($E_g \approx 1.25$ эВ [1]). Сделанные выше оценки миграционных

длин относятся к диффузии E -центров, причем величина длины диффузии в КО ограничена, по-видимому, продолжительностью прогрева ($t_{\text{отж}}=15$ мин). Отсюда следует также оценка предэкспоненциального фактора в выражении для коэффициента диффузии нейтральных E -центров: $D=D_0 \exp(-0.95 \text{ эВ}/kT)$:

$$D_0 \geq \frac{l_{\text{опз}}^{\text{OПЗ}^2}}{t_{\text{отж}}} \exp(0.95 \text{ эВ}/kT) \sim 1.5 \text{ см}^2/\text{с.}$$

Модельный расчет

Для проверки адекватности изложенных выше представлений нами был выполнен модельный расчет формирования распределений $N_E(x)$ при отжиге, результат которого представлен на рис. 3 штриховыми и пунктирными линиями (варианты 1 и 2 соответственно).

Расчет согласно варианту 1 проводился с использованием системы уравнений

$$\frac{\partial N_V}{\partial t} = D_V - \frac{\partial^2}{\partial x^2} N_V + D_{V^0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} N_{V^0} - \mu_V - \frac{\partial}{\partial x} (E(x) N_V) - (1 + \eta^-) \frac{N_V}{\tau^-} - (1 + \eta^0) \frac{N_{V^0}}{\tau^0} + \frac{N_{E^0}}{\tau^{*0}} + \frac{N_{E^-}}{\tau^{*-}}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial N_E}{\partial t} = \frac{N_{E^0}}{\tau^{*0}} - \frac{N_{E^-}}{\tau^{*-}} + \frac{N_{V^0}}{\tau^0} + \frac{N_{V^-}}{\tau^-} - \frac{N_E}{\tau'(x)}. \quad (2)$$

Здесь N_V , N_{V^0} , N_{E^-} , N_{E^0} — концентрации отрицательно заряженных и нейтральных вакансий и E -центров соответственно; $N_V=f_V N_V$, $N_E=f_E N_E$, $f_V=(1+2 \exp(-\frac{(E_V-E_F+\varphi(x))}{kT}))^{-1}$, $f_E=(1+2 \exp(-\frac{(E_E-E_F+\varphi(x))}{kT}))^{-1}$, $E_V=E_c-0.30 \text{ эВ}$, $E_E=E_c-0.44 \text{ эВ}$ [7], $\varphi(x)$ — потенциал в ОПЗ, определяемый из уравнения

$$\int_{\varphi(x)}^{\varphi_{\max}} \frac{d\varphi}{(\exp(-\varphi/kT) + \varphi/kT - 1)^{1/2}} = \left(\frac{2eN_{P_s}}{\epsilon\epsilon_0} \frac{e}{kT} \right)^{1/2} x [10],$$

$N_V=N_V+N_{V^0}$, $N_E=N_{E^-}+N_{E^0}$; D_V и μ_V — коэффициент диффузии и подвижность вакансий; $E(x)=-\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ — поле ОПЗ; τ — время жизни вакансий по отношению к захвату на фосфор; τ^* — время распада E -центров; η — относительная мощность (по отношению к фосфору) других стоков для вакансий. Знаки «—» и «о» указывают зарядовые состояния дефектов.

Величины кинетических коэффициентов для вакансий принимались соответствующими литературным данным (см., например, [7]): $D_{V^0}=9 \cdot 10^{-5} \times \exp(-0.33 \text{ эВ}/kT)=7.6 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$, $D_{V^-}=9 \cdot 10^{-5} \exp(-0.25 \text{ эВ}/kT)=7.4 \times 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}$, $\mu_V=eD_V/kT$. При записи уравнения (1) учтено, что равновесные зарядовые состояния вакансий устанавливаются быстрее, чем происходит перемещение вакансий на заметные расстояния (например, на расстояние, соответствующее шагу сетки, использовавшейся для конечно-разностной аппроксимации уравнений). Поскольку времена жизни вакансий τ были значительно меньше остальных времен задачи (времен распада E -центров, продолжительности отжига и шага по времени конечно-разностной аппроксимации), для уравнения (1) принималось приближение квазистационара $\partial V/\partial t=0$. Начальное распределение E -центров (после облучения диодов Шоттки с $U_{\text{см}}=0 \text{ В}$) принято (в соответствии с данными работы [11]) следующим:

$$N_E(x)=\begin{cases} N(\infty), & x>h, \\ 1/3 N(\infty), & x<h. \end{cases}$$

Последний член в уравнении (2) с $\tau'(x)=\tau'_0 \exp(x/L_{\text{зап}})$ введен для феноменологического описания обсуждавшегося выше спада $N_E(x)$ к поверхности,

обусловленного, возможно, пассивацией E -центров. Удовлетворительное соответствие результата расчета распределению $N_E(x)$, формирующемуся при отжиге в случае $U_{\text{ex}}=0$ В, достигалось при выборе $\tau'_0=600$ с, $L_{\text{зап}}=0.5$ мкм. При выборе η^0 использовались следующие соображения. При облучении обратно смешенных диодов Шоттки с базой из кислородосодержащего кремния КЭФ-1 в ОПЗ вводится в 2 раза меньше A -центров (комплекс вакансия—кислород VO_2), чем в КО [11]. Поскольку кислород в этом случае является доминирующей ловушкой для вакансий, отношение 1 : 2 отражает, по-видимому, соотношение общего количества вакансий, поступающих во вторичные каналы дефектообразования в ОПЗ и КО. Поскольку в случае бескислородного материала (БКЭФ-1) в КО доминирующей ловушкой является фосфор, из соотношения 1 : 3 числа вводимых E -центров в ОПЗ и КО [11] следует, по-видимому, что η^0 близко к 0.5. Значения остальных параметров выбраны следующими: $l_v=\sqrt{D_v \tau} = 0.067$ мкм, $l_{v0}=\sqrt{D_{v0} \tau^0 / \eta^0} = 0.5$ мкм, $\tau^*=2 \cdot 10^4$ с, $\tau^*=3 \cdot 10^2$ с, $\eta^-=0.1$, $\eta^0=5 \cdot 10^{-2}$. Выбор η^- (по порядку величины) может быть аргументирован в рамках предположения, что времена жизни нейтральных и отрицательно заряженных вакансий по отношению к захвату на отличные от фосфора стоки, если последние нейтральны, различаются не слишком сильно ($\tau^-/\eta^- = \tau^0/\eta^0$). Отсюда получаем $\eta^-= (D_{v0}/D_v)(l_v/l_{v0})^2 \sim 2 \cdot 10^{-3}$. Здесь существенна малость η^- , в силу которой расчетные распределения $N_E(x)$ изменяются слабо (менее чем на 4 %) при варьировании η^- в пределах $10^{-3} \div 5 \cdot 10^{-2}$.

Расчет согласно варианту 2 проводился с использованием уравнения

$$\frac{\partial N_E}{\partial t} = D_{E^-} \frac{\partial^2}{\partial x^2} N_{E^-} + D_{E^0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} N_{E^0} - \mu_{E^-} \frac{\partial}{\partial x} (E(x) N_{E^-}) - \frac{N_{E^0}}{\tau'^0} - \frac{N_{E^-}}{\tau^*} - \frac{N_E}{\tau'(x)},$$

где D_E и μ_E — коэффициент диффузии и подвижность E -центров, τ^* — время жизни E -центров по отношению к захвату на стоки, остальные обозначения совпадают с использовавшимися ранее. При расчете принято $D_0=1.5$ см²/с, $l_{E^0}=\sqrt{D_{E^0} \tau^*}=0.5$ мкм, $\tau^*/\tau'^0=D_{E^-}/D_{E^0}$ (реакция захвата E -центров на стоки лимитируется диффузией и при этом радиус реакции слабо зависит от зарядового состояния E -центров); как и раньше, $\tau'(x)=\tau'_0 \exp(x/L_{\text{зап}})$, где $\tau'_0=600$ с, $L_{\text{зап}}=0.5$ мкм.

Как видно из рис. 3, результаты расчета согласно обоим вариантам находятся в удовлетворительном соответствии с данными эксперимента, что показывает возможность адекватного описания распределений $N_E(x)$ с учетом предварительно полученных оценок миграционных характеристик дефектов.

Таким образом, показано, что при отжиге предварительно облученных диодов Шоттки Au—*n*-Si при 135 °С на границе ОПЗ и КО формируется пик концентрации E -центров, свидетельствующий о переносе подвижных дефектов (E -центров или освобождающихся при их распаде вакансий) из ОПЗ в объем кристалла. Получено, что длина переноса дефектов за время прогрева 15 мин в ОПЗ достигает ~0.5, а в КО не превосходит ~0.15 мкм. Для случая отжига комплекса путем миграции его как целого на стоки с учетом литературных данных об энергии активации диффузии получена оценка коэффициента диффузии нейтральных E -центров: 1.5 exp(−0.95 эВ/*kT*) см²/с. Результат проведенного модельного расчета дрейфо-диффузионного перераспределения дефектов удовлетворительно согласуется с данными эксперимента.

Список литературы

- [1] Kimerling L. C., De Angelis H. M., Diebold Y. W. // Sol. St. Commun. 1975. V. 16. N. 1. P. 171—174.
- [2] Barnes C. E., Samara G. A. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 48. N. 11. P. 934—936.
- [3] Kimerling L. C. // Rad. Eff. Semicond. Conf. Ser. N. 31. Bristol—London, 1977. P. 221—230.
- [4] Kimerling L. C., Asom M. T., Benton J. L. et al. // Mater. Sci. Forum. 1989. V. 38-41. Pt I. P. 141—450.
- [5] Тахмазиди Г. А. // Микроэлектроника. 1987. Т. 16. Б. 4. С. 372—373.
- [6] Watkins G. D., Corbett J. W. // Phys. Rev. 1964. V. 134. N 5A. P. 1359—1377.

- [7] Емцев В. В., Машовец Т. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М., 1981. 248 с.
- [8] Барапов А. И., Васильев А. В., Кулешов В. Ф. и др. // Препринт Института проблем технологии электроники и особочистых материалов и Института физики полупроводников СО АН СССР. Черноголовка, 1985.
- [9] Берман Л. С., Лебедев А. А. Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Л., 1981. 176 с.
- [10] Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Т. 1. М., 1984. 455 с.
- [11] Болотов В. В., Карпов А. В., Стучинский В. А. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 1. С. 49—55.

Институт физики полупроводников
СО АН СССР
Новосибирск

Получена 23.07.1990
Принята к печати 20.12.1990
