

ОСОБЕННОСТИ ОТЖИГА ДИВАКАНСИЙ В КРЕМНИИ,  
СОДЕРЖАЩЕМ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ОБЛАСТИ

Антонова И. В., Васильев А. В., Панов В. И., Шаймеев С. С.

Проведено детальное исследование характера отжига дивакансий в кремнии *n*-типа, облученном нейтронами. Подробный анализ данных DLTS экспериментов показал, что отжиг происходит в две стадии. Высокотемпературная стадия (300–350 °С, энергия активации  $E_a=1.5$  эВ) связана с отжигом дивакансий в матрице кристалла. Низкотемпературная стадия (100–200 °С,  $E_a=1.0$  эВ) обусловлена подходом дефектов междоузельного типа к дивакансиям, локализованным в ядре РО.

Исследование свойств кристаллов кремния, облученных нейтронами, показало, что наличие сложных дефектных ассоциаций — разупорядоченных областей (РО) и их взаимодействие с точечными дефектами приводят к разнообразным эффектам, наблюдаемым в кристаллах после облучения и в процессе отжига [1]. Несмотря на каскадный характер введения нарушений при столкновении нейтрона с атомом решетки, в нейтронно-облученном кремнии наблюдаются практически все типы точечных дефектов, изученных в кремнии, облученном легкими частицами — электронами или  $\gamma$ -квантами [2]. Точечные дефекты, однако, ведут себя несколько иначе, если они сосредоточены в некоторых локальных областях, как это имеет место, например, в кристаллах после облучения быстрыми нейтронами [1]. Одним из интереснейших объектов является дивакансия, в поведении которой, несмотря на интенсивные исследования [3–6], остается еще много неясного. Это относится, в частности, к характеру отжига дивакансий, содержащихся в ядре и оболочке РО.

В работе [4] сделана попытка интерпретировать данные по зависимости характера отжига дивакансий от типа бомбардирующих частиц (электронов, нейтронов) и дозы облучения (интервал доз  $10^{14}$ – $10^{19}$  см<sup>-2</sup>). Основные особенности отжига дивакансий, обнаруженные по ИК поглощению [3] и спектрам DLTS [4]: 1) резкая стадия при 300–350 °С в облученных электронами кристаллах кремния, 2) сдвиг резкой стадии к меньшим (100–150 °С) температурам при сильном ( $10^{18}$ – $10^{19}$  см<sup>-2</sup>) нейтронном облучении, 3) размытая (150–350 °С) стадия при меньших дозах нейтронного облучения, объяснены в [4] в предположении о различии энергий активации  $E_a$  отжига дивакансий, локализованных в трех различных по своим свойствам областях кристалла: ядре РО ( $E_a=1.1$  эВ), примесно-дефектной оболочке ( $E_a=1.3$  эВ) и «ненарушенной» матрице кристалла ( $E_a=1.5$  эВ). В качестве физической причины зависимости  $E_a(R)$  в [4] названо наличие упругих деформаций вокруг РО.

В работе [7] развит метод DLTS применительно к кристаллам, содержащим примесно-дефектные неоднородности, в том числе РО. Предлагается, кроме спектра DLTS, снимать еще зависимость высоты пика DLTS, связанного с исследуемым уровнем дефекта, от температуры, при которой пик наблюдается.

Показано [7], что если, например, дивакансии расположены в ядре РО, то они не все будут участвовать в перезарядке, причем доля перезаряжающихся дефектов монотонно уменьшается при увеличении температуры наблюдения пика DLTS.

В данной работе этот метод использован для более тщательного и детального (по сравнению с [4]) исследования отжига дивакансий в нейтронно-об-

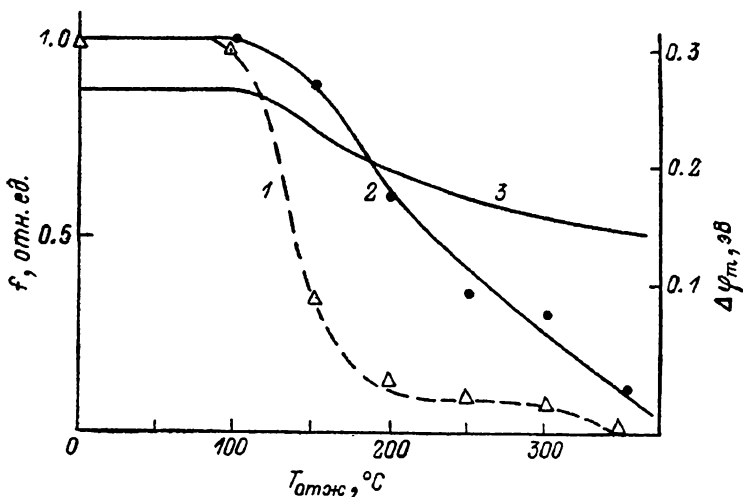
лученном кремнии. Если на всех стадиях отжига распределение дивакансий в РО задается функцией Гаусса

$$N_W(R) = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} R_0^3} \exp\left(-\frac{R^2}{2R_0^2}\right), \quad (1)$$

то, как показано в [7], зависимость измеряемой концентрации дивакансий  $N$  от температуры наблюдения  $T_n$  представляется в виде

$$\ln N = a - bT_n, \quad (2)$$

где  $a = a(M, N_{PO})$ ,  $b = b(M, R_0, N_D)$ ,  $N_{PO}$  — концентрация РО,  $N_D$  — концентрация доноров. Измеряя зависимость  $N(T_n)$  на каждой стадии отжига, получаем среднее число дивакансий в РО  $M$  и характерный размер  $R_0$  распределения дивакансий в РО в зависимости от температуры отжига  $T_{отж}$ .



Изохронный отжиг полного числа дивакансий в РО (1), пика DLTS, соответствующего уровню дивакансии  $E_c - 0.39$  эВ (2), и максимального потенциала  $\Delta\varphi_{m, \max}$ , создаваемого разупорядоченной областью (3).

Расчет: штриховая кривая — по формуле (3), точки — по методике [7].

Были исследованы образцы кремния  $n$ -типа с концентрацией фосфора  $3.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , выращенные по методу Чохральского. Доза облучения нейтронами реактора (при температуре, близкой к комнатной) составляла  $4.4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Изохронный (10 мин) отжиг проводился в интервале температур  $100 \div 350$  °C.

Полученные результаты состоят в следующем.

1. Кривые отжига уровней дивакансий  $E_c - 0.23$  и  $E_c - 0.39$  эВ совпадают с кривыми, полученными в [4]. На рисунке (кривая 2) приведен отжиг амплитуды пика DLTS, соответствующего уровню  $E_c - 0.39$  эВ; кривая демонстрирует отсутствие резкой стадии отжига уровня  $E_c - 0.39$  эВ.

2. Расчет по изложенной выше методике показывает, что полное число дивакансий  $M$  в одной усредненной РО до отжига составляет  $M_0 = 95$ , а параметр  $R_0 = 220$  Å. С ростом  $T_{отж}$   $R_0$  практически не меняется. Зависимость величины  $f = M/M_0$  от температуры отжига представлена на рисунке (кривая 1). Видно наличие двух достаточно четко выраженных стадий. Первая стадия ( $100 \div 200$  °C), на которой отжигается  $\sim 90$  % полного числа дивакансий, совпадает со стадией отжига дивакансий, наблюдавшейся по ИК поглощению при больших дозах нейтронного облучения [3]. Вторая стадия ( $300 \div 350$  °C, около  $\sim 10$  % дивакансий) соответствует интервалу температур отжига дивакансий (уровни  $E_c - 0.23$  и  $E_c - 0.39$  эВ) в электронно-облученном [8] и уровня дивакансии  $E_c - 0.23$  эВ в нейтронно-облученном кремнии [4].

3. Путем совместного решения уравнения Пуассона и электронейтральности с учетом (1) и полученных для каждой температуры отжига значений

$M$  и  $R_0$  были рассчитаны потенциал РО  $\Delta\varphi$  для комнатной температуры и изменение  $\Delta\varphi_{\max}$  в процессе отжига (кривая 3).

Зависимость полного числа дивакансий в одной РО от температуры имеет четко выраженный двухстадийный характер и может быть описана следующим образом:

$$f = f_1 \exp\left[-\beta_0 t \exp\left(-\frac{E'_a}{kT}\right)\right] + f_2 \exp\left[-\beta_0 t \exp\left(-\frac{E''_a}{kT}\right)\right], \quad (3)$$

где  $f$  — доля неотожженных дивакансий;  $E'_a=1.0$ ,  $E''_a=1.5$  эВ — энергии активации отжига на первой и второй стадиях отжига соответственно;  $t$  и  $T$  — время и температура отжига;  $\beta_0$  — частотный фактор ( $\beta_0=1.1 \cdot 10^9$  с<sup>-1</sup> [5]);  $E''_a$  была выбрана в соответствии с известным значением для случая электронного облучения [5], т. е. равномерного распределения дивакансий по кристаллу, а значение  $E'_a$  подбиралось так, чтобы рассчитанная по (3) доля  $f$  (см. рисунок, штриховая кривая) наилучшим образом совпала с экспериментом;  $f_1=0.9$ ,  $f_2=0.1$  — доли дефектов, отжигающихся с разными энергиями активации.

Из сравнения кривых 1 и 2 на рисунке видно, что при температурах, при которых происходит существенное уменьшение полного числа дивакансий в РО (по кривой 1), изменение концентрации электрически активных дивакансий  $N_W$ , по измерениям DLTS, малое. Принимая во внимание тот факт, что  $N_W$  соответствует дефектам, расположенным в матрице и на периферии РО, можно сделать вывод, что на первой стадии отжига исчезают в основном дивакансии, локализованные в ядре РО.

Таким образом, представленные в данной работе результаты свидетельствуют в пользу того, что дивакансии в нейтронно-облученном кремнии отжигаются с двумя энергиями активации, одна из которых (1.5 эВ) соответствует отжигу дивакансий, расположенных в матрице кристалла, другая (1.0 эВ) — отжигу дивакансий, локализованных в ядре РО. Тогда размытость стадии отжига уровня  $E_c-0.39$  эВ объясняется изменением доли заряженных дивакансий, дающих вклад в сигнал DLTS. По мере отжига РО полное число дивакансий уменьшается. Это приводит к уменьшению разности потенциалов (кривая 3) между РО и матрицей, и, следовательно, доля заряженных дивакансий, дающих вклад в сигнал DLTS, возрастает. Эти два противоположных процесса и приводят к размытию стадии отжига. Аналогично можно объяснить и результаты, полученные по ИК измерениям [3].

Возможные причины уменьшения энергии активации отжига  $E_a$  дивакансий в ядре РО (по сравнению с матрицей кристалла): I) наличие деформаций в пределах РО [4, 6]; II) зависимость  $E_a$  от зарядового состояния дивакансий [как показано в [9], константа скорости отжига дефектов зависит от их зарядовых состояний (или положения уровня Ферми) главным образом вследствие того, что при отжиге дефекта исчезают связанные с ним уровни в запрещенной зоне и захваченные на них электроны должны перейти в зону проводимости]; III) различные механизмы отжига дивакансий на разных стадиях. В работе [10] показано, что, кроме «обычного» термического распада дефектного комплекса, возможно его исчезновение при подходе противоположного компонента пары Френкеля. Этот механизм был успешно использован в работе [11] для интерпретации особенностей отжига сложных дефектов.

Причина I, по-видимому, не реализуется, поскольку если деформационные поля приводят к изменению  $E_a$ , то, как показано в [6], изменение энергии активации должно быть пропорционально концентрации дивакансий. Другими словами,  $E_a$  должна отслеживать зависимость  $N_W$  от расстояния до центра РО (1). Кроме того, по мере отжига деформационные напряжения, очевидно, должны уменьшаться. В обоих случаях энергия активации будет иметь некоторый непрерывный спектр значений, что не согласуется с полученными результатами.

Оценки вероятности нахождения дивакансий в разных зарядовых состояниях показывают, что на стадии 300–350 °С практически все дивакансии, локализованные в ядре РО, уже при комнатной температуре находятся в состоянии  $W^0$ , которое не меняется при повышении температуры отжига. Эти данные говорят о нереализуемости причины II.

Наиболее вероятной представляется причина III — отжиг дивакансий в ядре РО путем подхода дефектов междоузельного типа. Некоторые из междоузельных комплексов, локализованных в примесно-дефектной оболочке РО, могут отжигаться при относительно невысоких температурах ( $\sim 100^\circ\text{C}$ ). При этом освобождаются подвижные междоузельные атомы (примесные или собственные). Диффундируя к ядру, они взаимодействуют с дивакансиями, приводя к уменьшению их числа. Количество провзаимодействовавших дивакансий будет тем больше, чем выше их концентрация. Следовательно, вероятность встречи диффундирующего междоузельного атома с дивакансиями, локализованными в ядре РО, существенно выше, чем с дивакансиями, расположенными вне. Оценки показывают, что через ядро при развале междоузельных комплексов, расположенных на периферии РО, пройдет не менее 30 % междоузельных атомов, т. е. вероятность встречи междоузельных атомов с дивакансиями в ядре достаточно велика. Примером междоузельного комплекса, развал которого приводит к отжигу дивакансий, может служить дефект, состоящий из двух рядом расположенных междоузельных атомов, который, согласно данным ЭПР, наблюдается в кремнии, облученном нейтронами [12], и отжигается при температуре 400 К [13].

Таким образом, дивакансии в кремнии, облученном нейтронами, отжигаются в две четко выраженные стадии, одна из которых имеет место при  $300 \div 350$  ( $E_a = 1.5$  эВ), а другая — при  $100 \div 200^\circ\text{C}$  ( $E_a = 1.0$  эВ). Наличие стадий обусловлено двумя различными механизмами отжига. Механизм отжига при  $100 \div 200^\circ\text{C}$  заключается, по-видимому, во взаимодействии дивакансий и междоузельных атомов, высвободившихся при отжиге комплекса междоузельного типа, в результате чего уменьшается концентрация дивакансий во всем объеме кристалла. Но, в силу того что вероятность взаимодействия значительно выше в ядре РО, где в основном сосредоточены дивакансии, наиболее существенное изменение концентрации дивакансий имеет место именно в ядре РО. Размытость стадии отжига дивакансий, наблюдаемых по спектрам DLTS или ИК поглощения, обусловлена изменением с температурой отжига доли дивакансий в различных зарядовых состояниях, дающих вклады в сигналы DLTS или ИК.

Авторы благодарят Л. С. Смирнова за плодотворные дискуссии.

#### Список литературы

- [1] Вопросы радиационной технологии полупроводников / Под ред. Л. С. Смирнова. Новосибирск, 1980. 292 с.
- [2] Васильев А. В., Смагулова С. А., Шаймеев С. С. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 11. С. 1983—1986.
- [3] Newman R. C., Totterdell D. H. J. // J. Phys. C: St. Phys. 1975. V. 8. P. 3944—3954.
- [4] Васильев А. В., Смагулова С. А., Смирнов Л. С. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 3. С. 561—564.
- [5] Euvvaray A. O., Sun E. // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. N 9. P. 3776—3780.
- [6] Михнович В. В. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 9. С. 1670—1673.
- [7] Антонова И. В., Васильев А. В., Панов В. И., Шаймеев С. С. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 6. С. 998—1003.
- [8] Kimerling L. C. // Rad. Eff. Semicond. Inst. Phys. Ser. N 31. Bristol—London, 1977. P. 224—230.
- [9] Баранов А. И., Васильев А. В., Кулепов В. Ф., Вяткин А. Ф., Смирнов Л. С. // Препринт. Черноголовка, 1985. 50 с.
- [10] Васильев А. В. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 4. С. 603—608.
- [11] Баранов А. И., Смирнов Л. С. // Препринт ИФП СО АН СССР. Новосибирск, 1978. 48 с.
- [12] Lee Y. H., Corbett J. W. // Sol. St. Sommun. 1974. V. 15. N 11/12. P. 1781—1784.
- [13] Lee Y. H., Gerasimenko N. N., Corbett J. W. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 10. P. 4506—4520.