

Моделирование процессов образования радиационных дефектов в гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001) при облучении нейтронами

© А.В. Скупов[†]

Федеральный научно-производственный центр
Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 22 апреля 2014 г. Принята к печати 29 сентября 2014 г.)

Разработана программа TRISQD для компьютерного моделирования процессов образования радиационных дефектов при корпускулярном облучении полупроводниковых гетероструктур с нановключениями линзообразной формы. С ее помощью исследованы процессы дефектообразования в $p-i-n$ -диодах с встроенной в i -область 20-периодной решеткой самоформирующихся наноструктур Ge(Si) при облучении быстрыми нейтронами. Установлено, что доля наноструктур Ge(Si), в которых после попадания каскадов атомных смещений образуются точечные радиационные дефекты, составляет $\leq 3\%$ от их полного числа в решетке. Более 94% дефектов локализованы в объеме p -, n -, i -областей диода и слоев кремния, разделяющих слои наноструктур Ge(Si).

1. Введение

В настоящее время в качестве одного из перспективных направлений в создании источников и приемников излучения в диапазоне длин волн 1.3–1.55 мкм, совместимых с технологией кремниевой микроэлектроники, рассматривается использование гетероструктур с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si) [1]. Поэтому изучение изменений электрических и оптических свойств этих гетероструктур при радиационных воздействиях имеет как фундаментальное, так и прикладное значение [2]. В [3,4] исследовалась деградация спектров фотолюминесценции (ФЛ) и электролюминесценции (ЭЛ) от массивов наноструктур Ge(Si)/Si(001) при импульсном облучении нейтронами со средней энергией ~ 1 МэВ и флюенсом $\sim (10^{13} - 10^{15})$ см⁻². При интерпретации полученных данных авторами этих работ высказано предположение о том, что экспериментально наблюдаемое уменьшение интенсивности сигналов ФЛ и ЭЛ от облученных структур обусловлено уменьшением числа островков, дающих вклад в измеряемый сигнал. Причина этого состоит в образовании в объеме таких наноструктур радиационных дефектов и безызлучательной рекомбинации носителей заряда посредством них. С ростом флюенса нейтронов проявление эффекта усиливается, так как увеличивается количество наноструктур Ge(Si) с дефектами. Наша работа посвящена проверке этой гипотезы с помощью компьютерного моделирования по специально разработанной программе TRISQD.

2. Описание модели

Объектом исследования в работах [3,4] были выращенные на подложках Si(001) методом молекулярно-пучковой эпитаксии из твердых источников $p-i-n$ -

диоды, в нелегированную (i) область которых встроена 20-периодная решетка с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si). Слои p^+ -Si и n^+ -Si имели толщину 200 нм каждый, решетка самоформирующихся Ge(Si)-островков отстояла от границ i -области на 50 нм. При выбранных условиях роста образуются массивы куполообразных наноструктур Ge(Si) с поверхностной плотностью $\sim 10^{10}$ см⁻², высотой до зарачивания кремнием 10–12 нм и размером в плоскости роста 65–75 нм. Толщина кремния, разделяющего соседние слои с наноструктурами Ge(Si), составляла 27–32 нм. Содержание германия (x) в твердом растворе Si_{1-x}Ge_x материала наноструктур зависит от толщины разделяющих слоев Si и для приведенного выше интервала значений этого параметра структуры x варьируется в пределах 40–50% [5].

Известно [6], что деградация электрических и оптических свойств полупроводников при облучении их нейтронами обусловлена образованием стабильных комплексов дефектов. В их состав входят точечные радиационные дефекты — вакансии и межузельные атомы, возникающие в каскадах атомных смещений. На современном уровне теоретического описания происходящих при облучении процессов данные о пространственном распределении точечных радиационных дефектов в многослойных многокомпонентных структурах могут быть получены с помощью компьютерного моделирования, например, методом Монте-Карло по TRIM-алгоритму [7]. Однако доступные программы, реализующие этот алгоритм, не имеют возможности задания в объеме облучаемой структуры трехмерных нановключений с отличающимися от окружающего материала свойствами. Очевидно, что для моделирования образования радиационных дефектов в гетероструктурах с массивами наноструктур такая возможность необходима (см., например, [8]). Поэтому на базе ранее разработанной программы TRIS [9,10] была создана программа TRISQD, которая позволяет моделировать по TRIM-алгоритму процессы дефекто-

[†] E-mail: skav10@mail.ru

образования в гетерокомпозициях, содержащих слои с включениями линзообразной формы с заданными высотой и диаметром основания. Включения могут быть заполнены материалом с химическим составом, плотностью и энергиями смещения атомов из узлов кристаллической решетки, отличающимися от таковых окружающего материала. Основания включений располагаются в одной геометрической плоскости, а их поверхностная плотность может варьироваться. Программа имеет возможность в ходе моделирования накапливать данные о количестве возникших в объеме каждого включения вакансий и межузельных атомов, а затем проводить их статистическую обработку.

Таким образом, в программе TRISQD геометрическая модель описанного выше $p-i-n$ -диода со встроенной решеткой самоформирующихся наностроек Ge(Si) из работ [3,4] может быть задана с требуемой детализацией при отождествлении наностроек с линзообразными включениями. Числовые значения параметров геометрической модели $p-i-n$ -диода выбирались равными приведенным выше, а заданные в интервалах, приняты равными средним по интервалам. Согласно [11], плотность кремния равна 2.33 г/см^3 , а твердого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (при $x = 0.45$), оцененная по формуле $\rho = 5.3256 - 2.5083y - 0.4853y^2$ ($y = 1 - x$), равна 3.80 г/см^3 . Поскольку значения энергии смещения атомов Si и Ge из узлов кристаллической решетки рассматриваемой гетероструктуры неизвестны, то для обоих типов атомов во всех материалах она задавалась равной 20 эВ , что характерно для объемного кремния [12].

Энергетический спектр нейтронов реактора, использовавшегося для облучения гетероструктур в [3,4], как и любой спектр деления урана, содержит несколько компонент в интервале $0.1-8 \text{ МэВ}$. Поэтому практический интерес представляет оценка параметров дефектообразования при развитии каскадов, инициированных нейтронами с разными энергиями из этого интервала. Начальная энергия первичных атомов отдачи (ПАО), в приближении упругого рассеяния нейтронов на ядрах атомов материала вычислялась по формуле [6]: $E_{\text{РКО}} = 2M_n M_{\text{РКО}} E_n / (M_n + M_{\text{РКО}})^2$, где M_n и E_n — масса (1.009 а. е. м.) и кинетическая энергия нейтрона, $M_{\text{РКО}}$ — масса атома, с ядром которого происходит столкновение (для кремния $M_{\text{РКО}} = 28.086 \text{ а. е. м.}$). Выбранные из этого интервала значения E_n и соответствующие им округленные до целых значения $E_{\text{РКО}}$ представлены в таблице. Для упрощения ПАО Ge не рассматривались, поскольку содержание атомов этого элемента в гетероструктуре много меньше, чем атомов Si. Положения точек старта ПАО разыгрывались случайным образом из равномерных распределений по каждой из пространственных координат. Начальные направления движения ПАО — из равномерного распределения в пространстве согласно алгоритму, описанному в [13].

Для сокращения времени счета по программе TRISQD до приемлемых значений (несколько часов) моделиро-

Рассчитанные значения \bar{v} , $\Delta\bar{v}$, \bar{d}_{is} , \bar{d}_v , $\bar{\epsilon}$ для различных энергий ПАО $E_{\text{РКО}}$

E_n , МэВ	$E_{\text{РКО}}$, кэВ	\bar{v}	$\Delta\bar{v}$	$\bar{\epsilon}$, %	\bar{d}_{is} , вак./ПАО	\bar{d}_v , вак./ПАО
1	67	0.55	0.81	0.03–2.93	35	690
2	134	0.97	1.19	0.05–5.19	58	1086
4	268	1.62	1.71	0.09–8.68	88	1566
8	536	2.57	2.38	0.14–13.77	117	2040

Примечание. Здесь вак./ПАО — вакансий на один ПАО.

вание каскадов атомных смещений выполнялось не во всем объеме $p-i-n$ -диода, а в выбранной расчетной области размерами $L \times L \times l_{\text{pin}}$, где L — размер области в плоскости, перпендикулярной направлению эпитаксиального роста гетероструктуры, l_{pin} — ее толщина (1.07 мкм). При корректном выборе размеров расчетной области результаты моделирования будут близки к характерным для целого $p-i-n$ -диода. При выборе значения L учитывалось, что оно должно быть существенно больше характерного размера каскада атомных смещений с данной $E_{\text{РКО}}$ для наиболее полного воспроизведения моделируемых процессов. В качестве характерного размера каскада принят удвоенный средний проецированный на начальное направление движения пробег ПАО с энергией $E_{\text{РКО}}$. Множитель 2 введен для учета того, что все направления движения ПАО равновероятны. Для атомов Si с $E_{\text{РКО}}$ в интервале $67-536 \text{ кэВ}$ средний проецированный пробег в кремнии составляет $\sim (0.1-0.7) \text{ мкм}$. В то же время в объеме расчетной области должно помещаться столько наностроек, чтобы при усреднении результатов расчета по их числу обеспечить достаточный объем выборки ($\sim 10^4$). При указанной выше поверхностной плотности наностроек ($\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$) должно быть $L \geq 2.3 \text{ мкм}$. Принято значение $L = 3 \text{ мкм}$, так как оно удовлетворяет всем перечисленным критериям и приемлемо с точки зрения вычислительной эффективности.

Вклад в дефектообразование каскадов атомных смещений, возникших за пределами расчетной области и попавших в нее, учитывался с помощью периодических граничных условий. В ходе моделирования программа TRISQD автоматически корректирует координаты и/или направление движения атома отдачи, если он выходит за пределы расчетной области. При пересечении атомом отдачи одной из граней расчетной области, перпендикулярных направлению роста гетероструктуры $p-i-n$ -диода, соответствующие координаты изменяются так, что атом входит в расчетную область через противоположную грань. Направление движения не изменяется. Если атом отдачи пересекает грань расчетной области, совпадающую с границей раздела кремниевой подложки и гетероструктуры $p-i-n$ -диода, то его координата симметрично отражается относительно нее. Направление движения этого атома отдачи изменяется на противо-

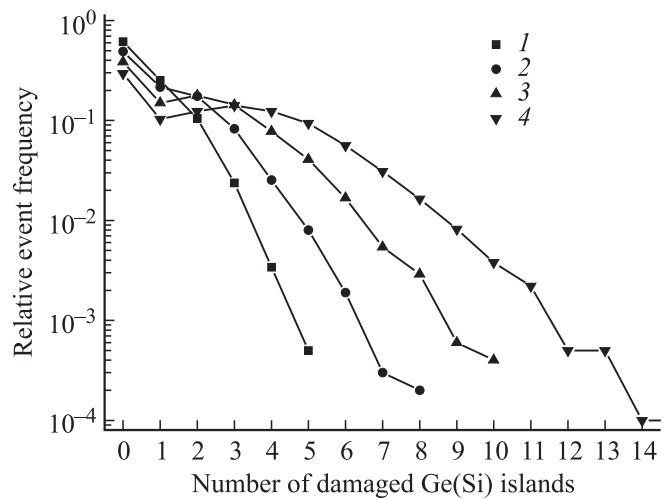
положное. При пересечении атомом отдачи грани расчетной области, совпадающей с границей раздела n -слоя и верхнего металлического контакта p - i - n -диода, он считается вышедшим из объема гетероструктуры и его траектория обрывается.

3. Результаты расчета и их обсуждение

По результатам моделирования оценивались среднее число наностроек, где образовались точечные радиационные дефекты ($\bar{\nu}$), среднее квадратичное отклонение от среднего ($\Delta\nu$), среднее число точечных дефектов (вакансий или межузельных атомов) в объеме всех наностроек (\bar{d}_{is}) и в окружающем их материале (\bar{d}_v) внутри расчетной области. Усреднение проводилось по 10^4 статистическим испытаниям (каскадам атомных смещений). Полученные значения $\bar{\nu}$, $\Delta\nu$, \bar{d}_{is} , \bar{d}_v для всех E_{PKO} представлены в таблице. Также по результатам моделирования построены распределения относительных частот (вероятностей) образования точечных радиационных дефектов в заданном числе наностроек в процессе развития одного каскада атомных смещений при различных E_{PKO} (рисунок). Значения $\bar{\nu}$ и $\Delta\nu$ — математическое ожидание и дисперсия этого распределения соответственно.

Средняя доля поврежденных образованием радиационных дефектов наностроек есть $\bar{\varepsilon} = (\bar{N}/N_{is}) \cdot 100\%$, N_{is} — концентрация наностроек Ge(Si) в объеме p - i - n -диода, которая при указанных выше поверхностной плотности и толщинах слоев гетероструктуры равна $1.9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Среднюю концентрацию наностроек, поврежденных образованием радиационных дефектов при флюенсе нейтронов F_n и энергии E_n , можно оценить по формуле $\bar{N} = \sigma_d(E_n) N_{at} F_n \bar{\nu}$, где $\sigma_d(E_n)$ — полное сечение рассеяния нейтронов с энергией E_n на ядрах атомов материала, концентрация которых равна N_{at} . Эта формула аналогична используемой для оценки полного числа смещенных атомов в веществе при облучении нейтронами, если под $\bar{\nu}$ понимается среднее число смещенных атомов, приходящееся на каждый ПАО (см. [6], с. 31). Для кремния $\sigma_d(E_n)$ при E_n в диапазоне 0.5–10 МэВ составляет 2–3 барн [6], $N_{at} \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Вычисленные границы интервалов $\bar{\varepsilon}$ при всех E_{PKO} и $F_n = (1-100) \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ [3,4] приведены в таблице.

Из данных таблицы следует, что доля наностроек Ge(Si) в i -области p - i - n -диода, в которых образуются точечные радиационные дефекты при облучении нейтронами с энергией 8 МэВ и флюенсом 10^{15} см^{-2} , составляет $\sim 14\%$. Эти значения параметров излучения можно считать предельными, они используются лишь для получения теоретической оценки сверху. На практике F_n — это интеграл по всему энергетическому спектру воздействующего на образец излучения реактора. Нейтронам с определенной энергией соответствует лишь доля в измеряемом флюенсе, причем с ростом E_n она, как



Распределения относительных частот образования точечных радиационных дефектов (повреждения) заданного числа наностроек Ge(Si) каскадом атомных смещений при начальных энергиях вызывающего его первоначального атома отдачи, кэВ: 1 — 67, 2 — 134, 3 — 268, 4 — 536.

правило, уменьшается. Характерная энергия нейтронов импульсного реактора, на котором проводилось облучение гетероструктур в [3,4], составляет лишь ~ 1 МэВ. При такой энергии нейтронов доля поврежденных радиационными дефектами наностроек $\leq 3\%$ даже при максимальном значении F_n . Поэтому образование радиационных дефектов в отдельных наностройках Ge(Si) в результате прямого попадания в них инициированных нейтронами каскадов атомных смещений нельзя считать основной причиной деградации спектров ФЛ и ЭЛ их массивов. Этот вывод подтверждает и рисунок, из которого следует, что вероятность возникновения радиационных дефектов в процессе развития одного каскада атомных смещений хотя бы в одном наностройке Ge(Si) не превышает 0.3.

Дефектообразование наиболее эффективно происходит в объеме p -, i -, n -областей диода и слоев кремния, разделяющих слои наностроек Ge(Si) в решетке. Из приведенных в таблице данных видно, что количество точечных дефектов (вакансий) в наностройках Ge(Si) \bar{d}_{is} составляет $\leq 6\%$ от полного числа смещений \bar{d}_v в расчете на один ПАО. Поэтому деградация спектров ФЛ и ЭЛ массивов наностроек Ge(Si), встроенных в i -область p - i - n -диода при облучении нейтронами, по-видимому, обусловлена изменением параметров переноса носителей заряда в p -, i -, n -областях из-за образования радиационных дефектов. Захват на ловушки и безызлучательная рекомбинация через создаваемые ими в запрещенной зоне кремния уровни уменьшают поток носителей заряда к наностройкам Ge(Si), а следовательно, и интенсивность излучательной рекомбинации в них, что наблюдается экспериментально.

4. Заключение

На базе известного TRIM-алгоритма разработана оригинальная компьютерная программа TRISQD, позволяющая моделировать процессы образования точечных радиационных дефектов при корпускулярном облучении в многослойных многокомпонентных гетероструктурах, содержащих массивы нановключений линзообразной формы. С помощью TRISQD исследованы процессы дефектообразования в $p-i-n$ -диодах со встроенной в i -область 20-периодной решеткой самоформирующихся nanoостровков Ge(Si) при облучении быстрыми нейтронами. Установлено, что доля nanoостровков Ge(Si), в которых после попадания инициированных нейтронами каскадов атомных смещений образуются точечные радиационные дефекты, составляет $\leq 3\%$ от их полного числа в решетке. В то же время более 94% всех точечных радиационных дефектов локализованы в объеме p -, n -, i -областей диода и разделяющих слоёв nanoостровков Ge(Si) слоёв кремния. Следовательно, сложные стабильные радиационные дефекты, уменьшающие концентрацию, подвижность и время жизни носителей также локализованы в этих областях $p-i-n$ -диода, а большая часть nanoостровков Ge(Si) остается свободной от радиационных дефектов. На основании этих результатов высказано предположение о том, что причина экспериментально наблюдаемой в [3,4] деградации спектров ФЛ и ЭЛ массивов nanoостровков Ge(Si) состоит в обусловленном радиационными дефектами уменьшении концентрации достигающих nanoостровки носителей заряда и соответствующем уменьшении интенсивности излучательной рекомбинации через их энергетические уровни.

Автор благодарит А.В. Новикова, С.В. Оболенского и В.К. Киселева за интерес к работе и ценные замечания.

Список литературы

- [1] А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, В.В. Кириенко, А.И. Никифоров. ФТТ, **47**, 37 (2005).
- [2] Н.А. Соболев. ФТП, **47**, 182 (2013).
- [3] А.В. Новиков, А.Н. Яблонский, В.В. Платонов, С.В. Оболенский, Д.Н. Лобанов, З.Ф. Красильник. ФТП, **44**, 346 (2010).
- [4] З.Ф. Красильник, К.Е. Кудрявцев, А.Н. Качемцев, Д.В. Лобанов, А.В. Новиков, С.В. Оболенский, Д.В. Шенгуров. ФТП, **45**, 230 (2011).
- [5] Д.Н. Лобанов, А.В. Новиков, К.Е. Кудрявцев, Д.В. Шенгуров, Ю.Н. Дроздов, А.Н. Яблонский, В.Г. Шмагин, З.Ф. Красильник, Н.Д. Захаров, Р. Werner. ФТП, **43**, 332 (2009).
- [6] В.М. Кулаков, Е.А. Ладыгин, В.И. Шаховцов, Э. Вологдин, Ю. Андреев. *Действие проникающей радиации на изделия электронной техники* (М., Сов. радио, 1976).
- [7] J.P. Biersack, L.G. Huggmark. Nucl. Instr. Meth., **174**, 257 (1980). <http://www.srim.org>

- [8] D.I. Tetelbaum, D.V. Guseinov, V.K. Vasiliev, A.N. Mikhaylov, A.I. Belov, D.S. Korolev, S.V. Obolensky, A.N. Kachemtsev. Nucl. Inst. Meth. B, **326**, 41 (2014).
- [9] А.В. Скупов, В.Д. Скупов, С.В. Оболенский. ФХОМ, № 4, 5 (2006).
- [10] А.В. Скупов, С.В. Оболенский. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 4, 37 (2007).
- [11] S. Adachi. *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (John Wiley and Sons, Ltd, 2009).
- [12] В.С. Вавилов. УФН, **167** (4), 407 (1997).
- [13] И.М. Соболев. *Численные методы Монте-Карло* (М., Наука, 1973).

Редактор Л.В. Шаронова

Modeling of defect formation processes in heterostructures with self-assembled Ge(Si)/Si(001) nanoislands irradiated by neutrons

A.V. Skupov

Federal Research and Production Center Measuring Systems Research Institute named after Y.Y. Sedakov, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Computer code TRISQD was developed for modeling defect formation when semiconductor heterostructures with lenticular-shape nanoinclusions irradiated by neutrons. It was used for investigation defects formation in $p-i-n$ diodes with 20-periods lattice of self-assembled Ge(Si) nanoislands, irradiated by fast neutrons. It was found, that a part of Ge(Si) nanoislands damaged by radiation point defects during atoms displacement cascades is $\leq 3\%$ of their total number in lattice. More than 94% of defects are localized in bulk p -, n -, i -regions of diode and silicone layers separating Ge(Si) nanoislands.