

Особенности трансформации микрорельефа структур „кремний на изоляторе“ при воздействии фотонных и корпускулярных излучений

© Б.А. Логинов,¹ Д.Ю. Блинников,² В.С. Второва,² В.В. Кириллова,² Е.А. Ляшко,² В.С. Макеев,² А.Р. Первых,² Н.Д. Абросимова,³ И.Ю. Забавичев,^{3,4} А.С. Пузанов,^{3,4} Е.В. Волкова,⁴ Е.А. Тарасова,⁴ С.В. Оболенский^{3,4}

¹ Национальный исследовательский университет „Московский институт электронной техники“, 124498 Зеленоград, Москва, Россия

² Образовательный центр „Сириус“, 354349 Сочи, Россия

³ Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, филиал Российского федерального ядерного центра — Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики „Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова“, 603950 Нижний Новгород, Россия

⁴ Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603600 Нижний Новгород, Россия
e-mail: andnenastik@inbox.ru

Поступило в Редакцию 4 мая 2023 г.

В окончательной редакции 4 мая 2023 г.

Принято к публикации 4 мая 2023 г.

Приведены результаты исследований параметров микрорельефа и электрофизических характеристик структур „кремний на изоляторе“ после воздействия гамма- и гамма-нейтронного излучения. Экспериментальные исследования проведены методами атомно-силовой микроскопии и псевдо-МДП транзистора. На основе полученных данных проведена оценка эффективного радиуса ядер кластеров радиационных дефектов.

Ключевые слова: Атомно-силовая микроскопия, кремний на изоляторе, „допороговое“ дефектообразование, кластеры радиационных дефектов.

DOI: 10.21883/JTF.2023.07.55764.91-23

Введение

Микрогеометрия поверхности является одной из наиболее чувствительных характеристик полупроводниковых материалов при воздействии ионизирующих излучений. Особенно значение качества поверхности возрастает в свете миниатюризации современных электронных компонентов. Понимание механизмов перестройки поверхности при дестабилизирующих воздействиях важно для прогнозирования отклика нанoeлектронных приборов на радиационное воздействие.

1. Объекты исследований

Объектами исследований служили структуры „кремний на изоляторе“, изготовленные по технологии водородного переноса. Приборный слой и подложка имели r -тип проводимости и кристаллографическую ориентацию $\langle 100 \rangle$. Толщины приборного слоя и скрытого диэлектрика составляли 200 нм. Электрофизические характеристики и параметры микрорельефа структур, облученных гамма-излучением, сравнивались с характеристиками структур, облученных гамма-нейтронным излучением, и сопоставлялись с характеристиками контрольных образцов. Контрольные образцы обозначены как 5N. Образцы, подвергнутые воздействию гамма-излучения,

обозначены как 5U. Образцы, подвергнутые воздействию гамма-нейтронного излучения, обозначены как 5R.

2. Методика эксперимента

Для исследований микрорельефа использовался „Микроскоп сканирующий зондовый СММ-2000“ [1], изготовитель завод ПРОТОН, г. Зеленоград, свидетельство RU.C.27.004.A № 42785 о внесении в Государственный реестр средств измерений РФ. Образцы исследовались без какой-либо дополнительной обработки, в режиме атомно-силовой микроскопии (АСМ), при этом в качестве зондов использованы сверхострые кантилеверы Bruker, США, марки „MSNL“ с радиусом закругления острия 2 нм.

По данным АСМ была оценена средняя площадь кластеров, возникающих после радиационного воздействия [2,3].

Измерения методом псевдо-МДП транзистора [4] осуществлялись с помощью системы измерения электрофизических параметров с ртутным зондом.

3. Результаты и обсуждение

Характер микрорельефа, как видно из рис. 1, заметно различен для всех типов исследованных образцов. Основные результаты статистической обработки

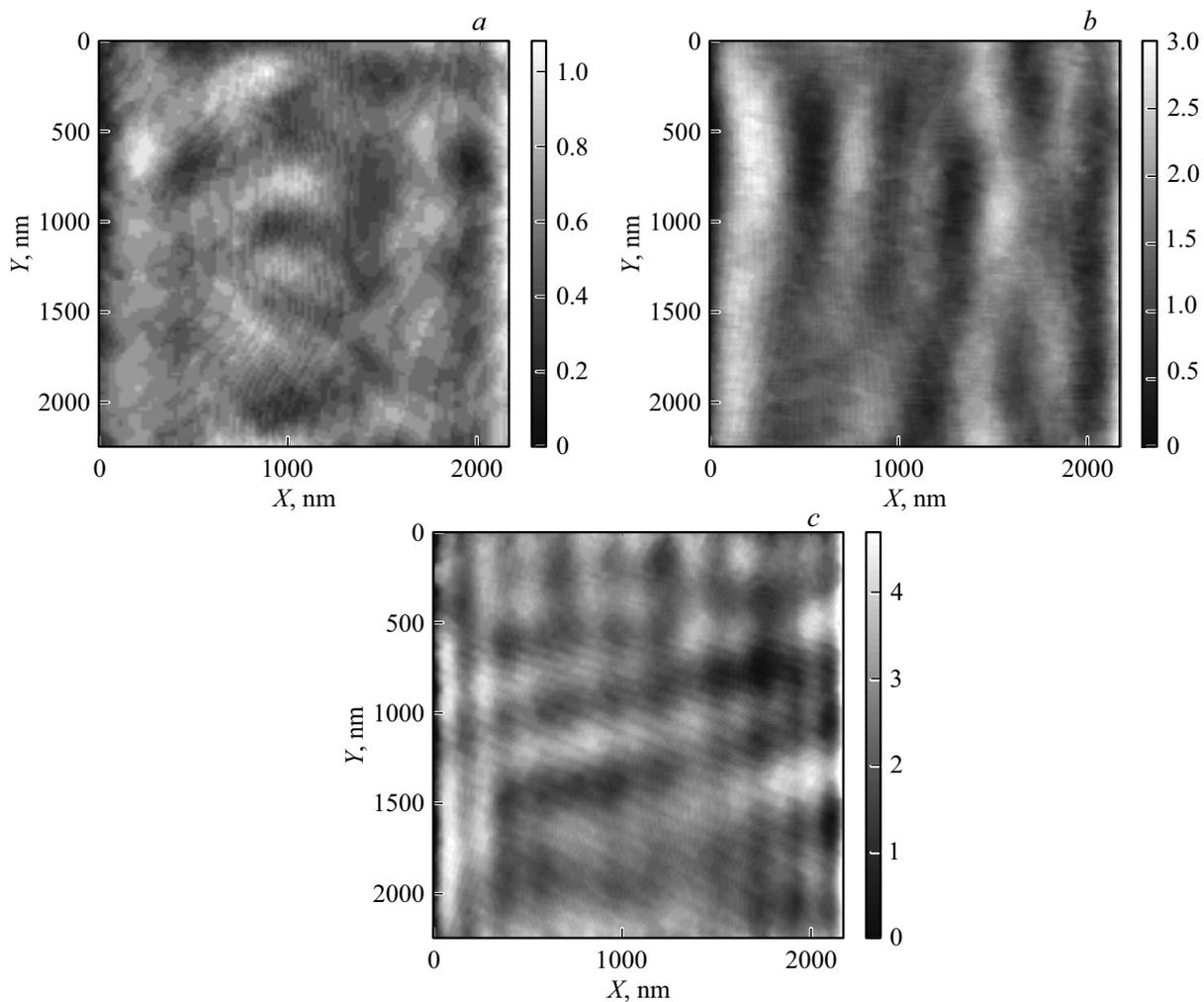


Рис. 1. Микрорельеф поверхности образцов: *a* — 5N, *b* — 5R, *c* — 5U, размер кадра для образца 5N — $2.16 \mu\text{m}$ (X)/ 2.25 (Y) μm , для образцов 5R, 5U — $2.17 \mu\text{m}$ (X)/ 2.26 (Y) μm .

изображений обобщены в табл. 1. Видно, что при гамма-нейтронном облучении образуются более крупномасштабные структуры, чем при воздействии гамма-излучения, что связано с большей средней начальной энергией первичных атомов отдачи при воздействии корпускулярных излучений по сравнению с фотонными тех же энергий. Исключение составляет среднее расстояние между минимумами профиля рельефа, отражающий, по-видимому, более развитую структуру субкластеров радиационных дефектов, образующихся при воздействии гамма-излучения.

Для нахождения распределения размеров ядер кластеров радиационных дефектов, образовавшихся после гамма- и нейтронного воздействий, использовался следующий алгоритм обработки:

- предварительная медианная фильтрация АСМ изображения с целью устранения импульсных помех;
- операция размыкания с вычитанием плавно изменяющегося фона и подчеркиванием выявленных областей посредством линейного контрастирования;

- автоматический поиск связанных областей с подсчетом количества пикселей n_i в каждом объекте;

- расчет площадей S_i связанных областей, где i — порядковый номер области, согласно формуле $S_i = n_i \times \Delta x \times \Delta y$. Здесь $\Delta x \approx 3.11 \text{ nm}$ и $\Delta y \approx 3.24 \text{ nm}$ линейные размеры пикселя АСМ изображения;

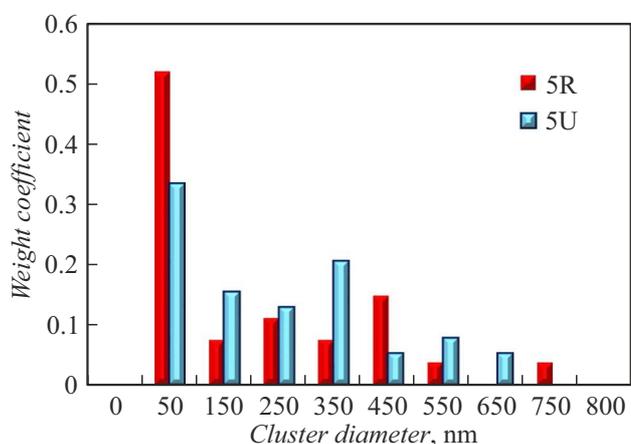
- нахождение эффективного радиуса кластеров по формуле $r_i = \sqrt{\frac{S_i}{\pi}}$.

Отметим, что в силу того, что минимальный размер фильтра составляет 3×3 пикселя, то при помощи данной методики возможно выделение кластеров с эффективным радиусом не менее 5.37 nm .

Анализируя распределение кластеров радиационных дефектов, приведенное на рис. 2, можно заключить, что кластеры большего размера возникают при нейтронном воздействии, но плотность расположения кластеров выше для случая воздействия гамма-излучения, что также непосредственно следует из данных, приведенных в табл. 1.

Таблица 1. Статистические характеристики поверхности образцов до и после облучения

Параметр	Образец		
	5N	5U	5R
Среднеквадратичная шероховатость, μm	100.4	219.4	391.3
Средняя шероховатость, μm	81.85	187.1	318.7
Шероховатость по 10 точкам, μm	257.8	609.8	759.4
Максимальная развитость рельефа, μm	514.0	839.1	1950.0
Среднее расстояние между пиками профиля рельефа, nm	267.7	296.5	439.1
Среднее расстояние между минимумами профиля, nm	139.1	76.71	63.07
Среднеквадратичный наклон объектов, $^\circ$	0.121	0.254	0.367
Средний наклон объектов, $^\circ$	0.085	0.192	0.268

**Рис. 2.** Диаграмма средних размеров кластеров в образцах после гамма- и гамма-нейтронного воздействия.

Качественный анализ электронной составляющей псевдо-МДП вольт-амперных характеристик, приведенных на рис. 3, показывает, что, во-первых, величина тока стока после облучения уменьшилась на два порядка, во-вторых, уменьшилось значение объемных утечек и подвижности дырок. Встроенный заряд, как видно из табл. 2, изменил знак. Величина встроенного заряда и подвижности немного выше для структур, подвергавшихся воздействию гамма-нейтронного излучения. Также следует отметить более гладкий вид вольт-амперной характеристики для случая воздействия гамма-излучения. На вольт-амперной характеристике после воздействия гамма-нейтронного излучения наблюдаются изменения наклона в области напряжений более 30 В.

Кластеры радиационных дефектов, образующихся в результате миграции первичных дефектов, могут иметь проводимость, отличную от проводимости основного объема материала. Величина потенциального барьера, возникающего в результате обеднения области про-

Таблица 2. Значения электрофизических характеристик структур „кремний на изоляторе“ после гамма- и гамма-нейтронного излучений

t сутки	0		20		27		34	
Вид воздействия	N	U	R	U	R	U	R	
$\mu_p, \text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$	250	34	30	50	70	60	90	
$Q_{\text{tot}}, 10^{10} \text{cm}^{-2}$	-5	8	6	7	4	7	3	
$D_{\text{it}}, 10^{11} \text{eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$	3,2	2	2	2	2	2	2	

Примечание: μ_p — подвижность дырок в приборном слое, Q_{tot} — фиксированный заряд в захороненном диэлектрике, D_{it} — плотность поверхностных состояний на границе захороненного диэлектрика и приборного слоя кремния.

странственного заряда свободными носителями из-за захвата заряда на глубокие энергетические уровни дефектов в разупорядоченной области, определяется размерами и степенью зоны повреждения и концентрацией в ней электрически активных примесей. Таким образом, повышается вероятность захвата неосновных носителей, а основных — падает. Размер областей обеднения кластеров лежит в пределах от 5 до 50 nm, они обогащены вакансиями и их ассоциациями типа дивакансий, тривакансий и т.д. Являясь центрами рассеяния и захвата носителей, разупорядоченные области оказывают существенное влияние на электрофизические характеристики полупроводниковых материалов. Из данных, приведенных в табл. 2 и на рис. 2 и 3, следует, что на электрофизические характеристики оказывает более заметное влияние размер кластера, а не плотность их расположения.

Из данных, приведенных в табл. 2, видно, что плотность поверхностных состояний и подвижность дырок спустя длительное время после облучения не отличаются для гамма- и гамма-нейтронного воздействий. Разли-

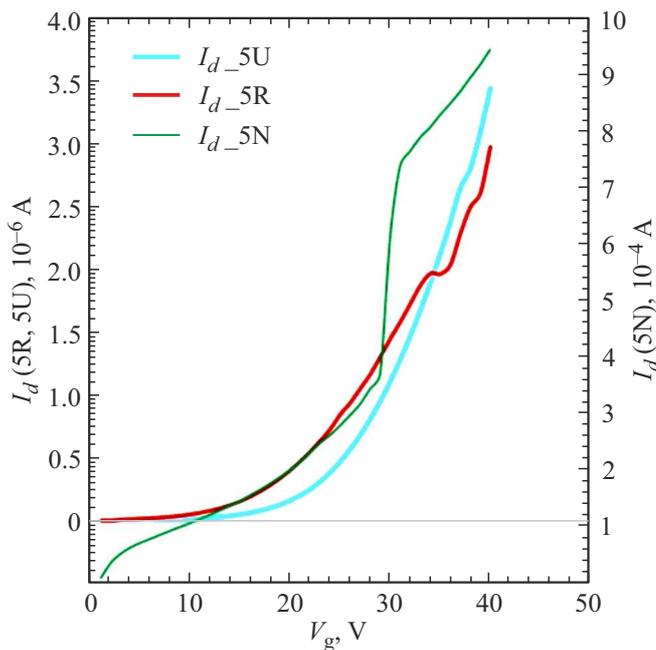


Рис. 3. Вольт-амперные характеристики образцов типа 5N, 5R, 5U, полученные методом псевдо-МДП транзистора (электронная составляющая).

чия отклика на радиационное воздействие существенны для подвижности электронов.

Одним из возможных механизмов трансформации микрорельефа при радиационном воздействии является процесс дефектообразования, при котором в твердом теле формируются точечные дефекты. Взаимодействие образованных при радиационном воздействии первичных точечных дефектов с исходными дефектами полупроводниковой структуры (границами пор, дислокациями и др.) является причиной формирования вторичных радиационных дефектов, в том числе устойчивых комплексов из разупорядоченных областей, называемыми кластерами, образованными одним или несколькими каскадами атомных столкновений. Кластер имеет разветвленную структуру из первично и вторично смещенных атомов. В точке остановки смещенных атомов образуется субкластер. Совокупность субкластеров, ветвей и изолированных дефектов будем называть суперкластером. Размеры суперкластера могут достигать долей микрона.

В настоящее время существует широкий спектр методов моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе [5], которые можно разделить на 4 класса: квантово-механические методы „из первых принципов“, методы классической молекулярной динамики, стохастические методы (алгоритмы Монте-Карло) и континуальные методы, основанные на законах теплопереноса в сплошной среде. Представленные алгоритмы имеют различную вычислительную сложность, которая определяется пространственным и

временным разрешением при сохранении требуемой точности решения.

В основе квантово-механических методов „из первых принципов“ лежит определение траекторий движения ядер кристаллической решетки и электронов на основе решения многочастичного нестационарного уравнения Шредингера. Для упрощения задачи перемещение электронов рассматривается как движение независимых частиц в потенциале, создаваемом другими электронами и атомными ядрами. Однако, в силу вычислительной сложности метод ограничен системами, состоящими из нескольких сотен атомов, чья динамика моделируется в течение нескольких фемтосекунд [6]. Поэтому в настоящее время квантово-механический метод на практике для моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе не применяется.

Следуя по пути упрощения задачи, можно рассматривать электронную и атомную подсистему отдельно друг от друга. В этом случае возможно отказаться от квантово-механического описания развития каскада атомных столкновений, заменив уравнение Шредингера законами классической механики. Метод молекулярной динамики основан на использовании II закона Ньютона для каждого атома системы.

Пространственные и временные ограничения метода молекулярной динамики обусловлены теми же причинами, что и у квантово-механических методов, и позволяют моделировать образование кластеров радиационных дефектов в объемных областях с линейным размером по каждой из координат до сотен нанометров в течение нескольких сотен пикосекунд [7]. Шаг временного интегрирования должен соответствовать динамике протекающих процессов и может изменяться в течение процедуры моделирования для увеличения эффективности вычислений.

Для дальнейшего увеличения пространственных и временных масштабов моделирования процесса формирования разупорядоченной области радиационных дефектов необходимо перейти от детерминированного подхода для описания протекающих явлений к стохастическому.

При моделировании методом Монте-Карло траектория каждого атома начинается с введения его положения, направления движения и энергии [8,9]. Затем прослеживается последовательность столкновений с атомами вещества, а между столкновениями свободный пробег атома предполагается прямолинейным. На пути каждого свободного пробега энергия частицы уменьшается на величину электронных потерь энергии, а затем после столкновения, — на ядерные или упругие потери энергии, т. е. на величину энергии, переданной атому мишени при столкновении. Если атом вещества получает энергию, которая превышает предварительно заданное значение, то его называют вторичным атомом отдачи и его поведение прослеживается таким же образом, как и поведение налетающего. Это же остается справедливым для любых последующих атомов отдачи. Траектория

атома отдачи обрывается, если его энергия уменьшается до предварительно заданного значения.

Для моделирования процессов отжига радиационных дефектов на больших пространственных и временных масштабах применяются континуальные методы. Более пространственное и временное разрешение в этом случае достигается за счет перехода от рассмотрения отдельных атомов (как движущихся, так и связанных в кристаллическую решетку) исследуемого материала к непрерывной (сплошной) среде, бесконечно малому объему которой можно приписать определенные значения термодинамических переменных.

Анализ представленных методов показывает, что в настоящее время квантово-механические методы практически неприменимы для моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе, ввиду экстремально высокой вычислительной сложности. Таким образом, наиболее предпочтительным представляется комбинация методов классической молекулярной динамики (для плотных кластеров радиационных дефектов) и Монте-Карло (для разреженных кластеров радиационных дефектов) на стадии формирования каскада смещений ($t < 10^{-12}$ s) с методами тепломассопереноса на стадии быстрого отжига радиационных дефектов ($t < 10^{-9}$ s). В дальнейшей части работы подробно рассматривается применение метода классической молекулярной динамики для моделирования процесса формирования каскада атомных смещений вблизи поверхности полупроводника под действием потока мгновенных нейтронов спектра деления.

Для оценки параметров кластеров радиационных дефектов, возникающих на поверхности облучаемой структуры, было проведено численное моделирование методом молекулярной динамики, реализованного в пакете прикладных программ LAMMPS [10]. Размер расчетной области составил $500 \times 500 \times 500$ Å (~ 8000000 атомов), в которой моделировалась эволюция разупорядоченной области атомных смещений в течение 100 ps, образованной первичным атомом отдачи кремния с различной кинетической энергией. Для определения местоположения дефектов в моделируемой системе использовался метод, основанный на построении ячеек Вигнера-Зейтца. В качестве межатомного потенциала взаимодействия был выбран потенциал Стиллера-Вибера (Stillinger-Weber) [11]:

$$U(r) = \sum_i \sum_{j>i} U_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq j \neq i} U_3(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{ijk}),$$

$$U_2(r_{ij}) = \begin{cases} A_{ij} \varepsilon_{ij} \left[B_{ij} \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p^{ij}} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q^{ij}} \right] \exp\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right), & r_{ij} \leq a_{ij} \sigma_{ij} \\ 0, & r_{ij} \geq a_{ij} \sigma_{ij}, \end{cases} \quad (1)$$

$$U_3(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{ijk}) = \lambda_{ijk} \varepsilon_{ijk} \left[\cos(\Theta_{ijk}) + \cos(\Theta_{0ijk}) \right]^2 \times \exp\left(\frac{\gamma_{ij} \sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right) \exp\left(\frac{\gamma_{ik} \sigma_{ik}}{r_{ik} - a_{ik} \sigma_{ik}} \right),$$

где A , B , p , q , a , λ и γ — безразмерные параметры модели; a σ — расстояние отсечки, ε — размерный коэффициент. Использование данного потенциала обусловлено тем, что полученные с его помощью данные хорошо согласуются с теоретическими результатами моделирования и экспериментом [12].

Для учета электронных потерь движущихся атомов, использовалась двухтемпературная модель [13], которая основана на уравнении тепловой диффузии

$$C_e \rho_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla (K_e \nabla T_e) \cdot -g_p \cdot (T_e - T_a) + g_s T_a, \quad (2)$$

где C_e — теплоемкость электронного газа, ρ_e — электронная плотность, K_e — электронная проводимость, g_p — коэффициент электрон-фононного взаимодействия, g_s — коэффициент электронных потерь, T_a и T_e — температуры атомной и электронной подсистемы соответственно. Решив уравнение (2) относительно T_a и T_e , можно вычислить обмен энергией между атомной и электронной подсистемами.

Ранее рассмотренный подход применялся для моделирования процесса образования кластера радиационных дефектов в объеме полупроводника [14]. В настоящей работе в ходе моделирования рассматривались два предельных случая взаимодействия нейтрона с атомом вещества. В первом случае нейтрон взаимодействует с атомом поверхности мишени, образуя первичный атом отдачи, который движется вглубь образца. Другим вариантом является случай, когда нейтрон взаимодействует с атомом в глубине мишени, и в результате упругого рассеяния первичный атом отдачи движется к поверхности образца. Энергия первичного атома отдачи была выбрана в соответствии с распределением быстрых нейтронов спектра деления [15]. Характерные результаты моделирования поверхности мишени в виде изображений электронного сканирующего микроскопа представлены на рис. 4.

Из полученных результатов следует, что на поверхности полупроводникового материала после воздействия потока нейтронов возможны два типа структурных повреждений: точечные дефекты типа пар Френкеля, образующиеся в результате обратного рассеяния атомов, и кластеры точечных дефектов, образующиеся около точки вылета высокоэнергетичного атома отдачи. При этом кластеры могут иметь различную форму, латеральные размеры которых могут достигать десятков нанометров.

При сопоставлении результатов моделирования структурных повреждений поверхности при воздействии потока быстрых нейтронов с экспериментальными данными необходимо отметить, что разрешения полученных АСМ изображений недостаточно для обнаружения мелкомасштабных изменений рельефа. Таким образом, изменения

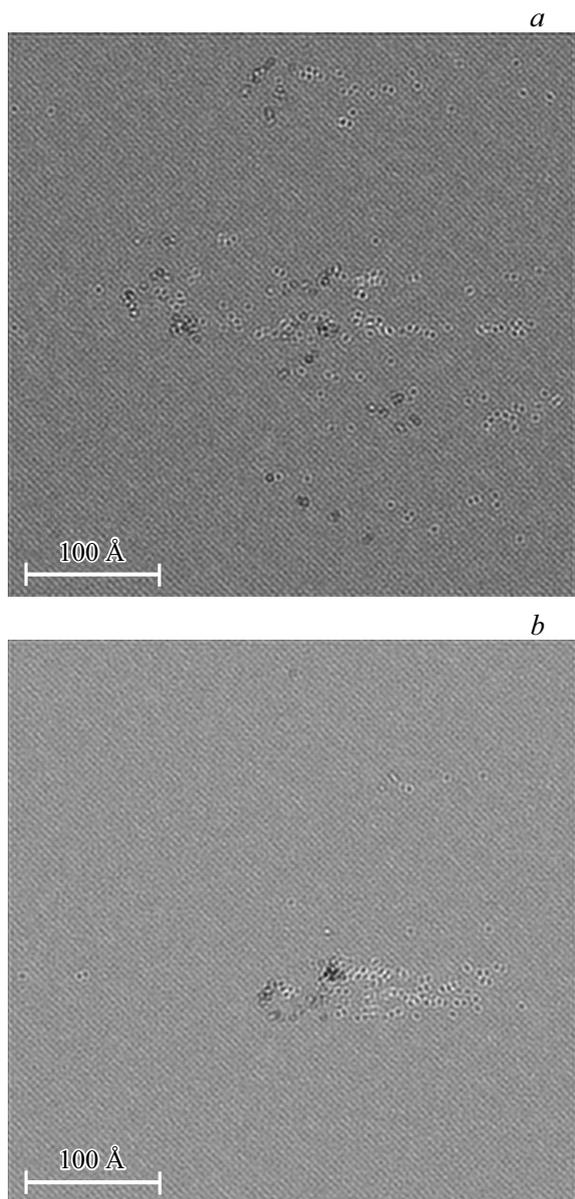


Рис. 4. Характерные изображения поверхности мишени для различных условий формирования кластеров радиационных дефектов: *a* – первичный атом отдачи движется с поверхности вглубь мишени; *b* – первичный атом отдачи движется из мишени в сторону поверхности.

средней шероховатости, наблюдаемые после радиационного воздействия, не связаны с микроструктурными повреждениями поверхности. Исходя из масштаба наблюдаемых неоднородностей поверхности, их появление связано с волновыми далекодействующими процессами, возникающими при воздействии радиации [16–19].

Заключение

Представленные в работе результаты комплексных исследований поверхности образцов структур „кремний

на изоляторе“, подвергнутых воздействию гамма- и гамма-нейтронного излучений, могут быть использованы для анализа параметров элементов интегральных схем после радиационного воздействия. Различные методы анализа АСМ изображений: статистический анализ и поиск связанных областей дают непротиворечивые количественные результаты эффективных размеров ядер кластеров радиационных дефектов при гамма- и гамма-нейтронном облучении. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами численного моделирования дефектообразования на поверхности полупроводника, проведенного методом классической молекулярной динамики. Влияние размеров и плотности кластеров радиационных дефектов на подвижность носителей заряда экспериментально подтверждено псевдо-МДП вольт-амперными характеристиками.

На процесс релаксации структурных повреждений оказывают влияние механизмы кластеризации, обусловленные различием природы гамма- и гамма-нейтронного излучений. В составных структурах, таких как „кремний на изоляторе“, на релаксацию электрофизических свойств оказывает также дополнительное влияние статические и динамические напряжения на границах раздела фаз [16]. Релаксация имеет с большей вероятностью ионизационную природу и обусловлена кулоновским отталкиванием образовавшихся при облучении ионов во всех компонентах структур „кремний на изоляторе“.

В рамках дальнейших исследований планируется проведение автокорреляционного анализа представленных АСМ изображений и анализ влияния изменения микрошероховатости на время релаксации импульса носителей заряда на микроуровне и их подвижности на макроуровне при различных видах радиационного воздействия.

Финансирование работы

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект „Ядерная и радиационная физика“).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.А. Логинов, Р.В. Логинов, В.В. Логинов, А.В. Логинов. *Nanoindustry*, **12**, 362 (2019).
- [2] С.В. Оболенский, Е.В. Волкова, А.Б. Логинов, Б.А. Логинов, Е.А. Тарасова, А.С. Пузанов, С.А. Королев. *Письма в ЖТФ*, **47** (5), 38 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.05.50676.18608
- [3] Е.В. Волкова, А.Б. Логинов, Б.А. Логинов, Е.А. Тарасова, А.С. Пузанов, С.А. Королев, Е.С. Семёновых, С.В. Хазанова, С.В. Оболенский. *ФТП*, **55** (10), 846 (2021). DOI: 10.21883/FTP.2021.10.51431.19

- [4] D.K. Schroder. *Semiconductor Material and De-vice Characterization* (New Jersey, John Wiley & Sons Inc., 1990)
- [5] Е.Г. Григорьев, Ю.А. Перлович, Г.И. Соловьев, А.Л. Удовский, В.Л. Якушин. Под общей ред. Калина Б.А. *Физическое материаловедение. Физические основы прочности. Радиационная физика твердого тела. Компьютерное моделирование* (МИФИ, М., 2008), т. 4, 696 с.
- [6] D.D. Vvedensky. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **16**, 1537 (2004).
- [7] Y.N. Samolyuk, Y.N. Osetskiy, R.E. Stoller. *J. Nucl. Mater.*, **465**, 83 (2015).
- [8] В.С. Вавилов. *Действие излучений на полупроводники* (Физматгиз, М., 1963), 264 с.
- [9] J.F. Ziegler, J.P. Biersak, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, NY., 1996), 192 p.
- [10] S. Plimton. *J. Comput. Phys.*, **117**, 1 (1995).
- [11] F.H. Stillinger, T.A. Weber. *Phys. Rev. B*, **31** (8), 5262 (1985).
- [12] A. Jay, M. Raine, N. Richard, N. Mousseau, V. Goiffon, A. Hémercyck, P. Magnan. *IEEE Transactions on Nucl. Sci.*, **64** (1), 141 (2017). DOI: 10.1109/TNS.2016.2628089
- [13] D. Duffy, A. Rutherford. *J. Phys.: Condens. Matter*, **19**, 016207 (2007).
- [14] И.Ю. Забавичев, А.А. Потехин, А.С. Пузанов, С.В. Оболенский, В.А. Козлов. *ФТП*, **53** (9), 1279 (2019). DOI: 10.21883/FTP.2019.09.48139.23
- [15] Е.А. Крамер-Агеев. *Экспериментальные методы нейтронных исследований* (Энергоиздат, М., 1990)
- [16] В.М. Воротынцева, В.А. Перевошиков, В.Д. Скупов. *Базовые процессы микро- и наноэлектроники* (Проспект, М., 2017), 358 с.
- [17] П.В. Павлов, Ю.А. Семин, В.Д. Скупов, Д.И. Тетельбаум. *ФТП*, **20** (3), 503 (1986).
- [18] В.Д. Скупов, Д.И. Тетельбаум. *ФТП*, **21** (8), 1495 (1987).
- [19] Ю.А. Семин, В.Д. Скупов, Д.И. Тетельбаум. *ЖТФ*, **14** (3), 273 (1988).