

УГОЛ СВЯЗИ Si—O—Si В МОНОКРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

В. И. Сорока, М. В. Арцимович, И. Ф. Могильник

Институт ядерных исследований Академии наук Украины, 252650, Киев, Украина
(Получена 12.11.1991. Принята к печати 13.02.1992)

Метод резонансного обратного рассеяния и каналирования использован для исследования кристаллов кремния, легированного кислородом. Уточнено местоположение кислорода в решетке кремния, что позволило определить угол связи Si—O—Si равным 163° .

Согласно модели, предложенной в работе [1], изолированный кислород в кремнии в промежуточном положении располагается вдоль оси $\langle 111 \rangle$, прерывая и сгибая связи Si—Si. При этом возможны шесть эквивалентных положений атома кислорода (рис. 1, а). Антисимметричная колебательная мода вдоль направления $\langle 111 \rangle$ ответственна за известную полосу поглощения 9 мкм в инфракрасном спектре. Действительность описанной модели подтверждена многочисленными экспериментами разного типа. Следует, однако, обратить внимание на противоречивость имеющихся сведений об угле связи Si—O—Si: например, 100° — в работах [1, 2], 162° — в работе [3]. Величина угла существенна для более полного понимания происходящих в кристалле процессов. В конечном итоге, очевидно, вопрос сводится к уточнению местоположения кислорода в кремнии, что и явилось целью настоящей работы.

Для определения местоположения использован метод резонансного обратного рассеяния и каналирования. Резонанс $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}$ при энергии α -частиц вблизи 3.05 МэВ по своим параметрам удовлетворяет необходимым требованиям к экспериментам такого типа [4, 5]. Чтобы однозначно определить местоположение примеси, обычно необходимо исследовать каналирование для нескольких кристаллографических направлений. В отдельных случаях, если поиск ограничен дополнительными условиями, достаточно выбрать одно подходящее направление. Общепринятая модель кислорода в кремнии может служить таким условием. На рис. 1, б показана проекция осевого канала $\langle 100 \rangle$ монокристалла кремния на перпендикулярную к нему плоскость. Сторона квадрата — это проекция на ту же плоскость показанного на рис. 1, а участка оси $\langle 111 \rangle$. Кислород может располагаться ближе или дальше от оси канала $\langle 100 \rangle$, что зависит от величины угла Si—O—Si. Поэтому кажется оправданным выбор для исследования осевого каналирования в направлении $\langle 100 \rangle$.

В качестве мишени использованы пластины кристалла кремния, выращенного по методу Чохральского. После полировки и химического травления кремний легировался кислородом. Энергия имплантации ионов кислорода — 150 кэВ, доза — $1.7 \cdot 10^{17}$ ат/см². Послеимплантационный отжиг осуществлялся при температуре 750°C . Состояние кислорода затем проверялось по спектрам ИК поглощения.

Ориентационные зависимости выхода обратнорассеянных α -частиц на кислороде в области максимума его распределения показаны на рис. 2, а, б. Угол обратного рассеяния — 164° . Профиль распределения кислорода измерялся предварительно путем зондирования мишени по глубине частицами резонансной энергии. Два исследованных образца различались только продолжительностью

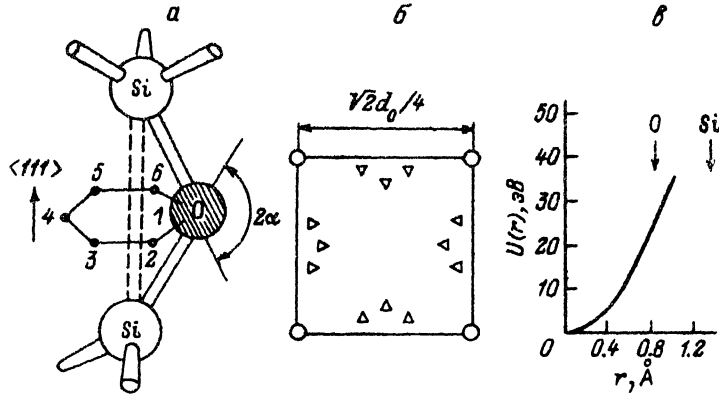


Рис. 1. Схематическое представление промежуточного положения кислорода в кремнии (а); проекция эквивалентных положений атома кислорода на плоскость, перпендикулярную к осевому каналу $\langle 100 \rangle$ (б); гармонический потенциал в центральной области осевого канала $\langle 100 \rangle$ (в). Кружки — Si, треугольники — O.

отжига. Некоторая тенденция уменьшения выхода при переходе от отрицательных углов наклона мишени к положительным объясняется, по-видимому, потерей энергии налетающих частиц в слое углерода, нагорающем на поверхности мишени в процессе длительного сканирования пучком. Это постепенно смещало зондируемый резонансом участок мишени с максимума распределения кислорода к поверхности. Ориентационные зависимости рассеяния на кремнии, необходимые для фиксирования канала $\langle 100 \rangle$, также приведены на рис. 2. При этом дискриминировался участок спектра обратного рассеяния, соответствующий кремнию, расположенному глубже слоя имплантации. Измеренный экспериментально половинный угол осевого $\langle 100 \rangle$ каналирования, равный приблизительно 0.35° , хорошо согласуется с расчетом.

Поскольку на кривых выхода для кислорода в пределах углов каналирования проявляются двойные пики, интерпретация экспериментальных данных упрощается [6]. Известно, что благодаря эффекту перераспределения частиц в канале существует взаимнооднозначное соответствие между углом наклона кристалла, под которым наблюдается максимум выхода, и местоположением примеси. Если принять потенциал в центральной области канала гармоническим,

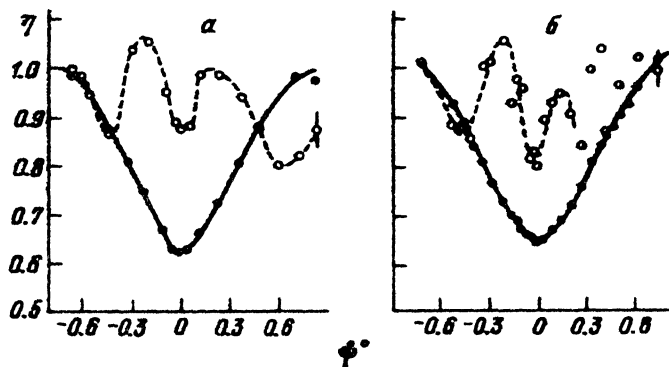


Рис. 2. Ориентационные зависимости выхода η обратного рассеяния α -частиц относительно оси $\langle 100 \rangle$ монокристалла кремния, легированного кислородом. а — время послеимплантационного отжига при температуре 750°C — 2 ч, б — продолжительность отжига при тех же условиях — 5 ч. Темные кружки — Si, светлые — O.

$$U(r) = \frac{nz_1z_2e^2(ca)^2}{db^4} r^2, \quad (1)$$

то положение максимума потока частиц в канале можно оценить, воспользовавшись равенством

$$E_{\perp} = E\psi_{\text{вх}}^2 = U(r), \quad (2)$$

где r — расстояние от оси канала, n — количество формирующих канал цепочек атомов, z_1 и z_2 — заряды налетающей частицы и ядра атомов матрицы, $c = \sqrt{3}$, a — параметр экранирования, d — расстояние между атомами в цепочке, b — радиус канала, E — энергия налетающей частицы, E_{\perp} — поперечная энергия частицы на входе в канал, $\psi_{\text{вх}}$ — угол между направлениями пучка и оси канала, соответствующий максимуму на кривой выхода. На рис. 1, в показана форма потенциала $U(r)$ и отмечены положения атомов кремния и максимума потока.

В результате расчетов для расстояния Si—O получено значение 1.20 Å, что определяет угол связи Si—O—Si $2\alpha = 163^\circ$. При расчете предполагалось, что расстояние между атомами кремния в решетке не меняется от присутствия атома кислорода и остается равным $\sqrt{3} d_0/4$, где $d_0 = 5.431$ Å — постоянная решетки. Неопределенность результата в основном зависит от точности определения положений максимумов на кривой выхода и не превышает 4° в данном эксперименте. Следует добавить к этому, что в месте расположения примеси потенциал может отличаться от гармонического, хотя, как видно из рис. 2, $\psi_{\text{вх}} < \psi_{1/2} \approx \psi_{\text{кр}}$, где $\psi_{1/2}$ и $\psi_{\text{кр}}$ — половинный и критический углы каналирования. Обращает также на себя внимание большая размытость угловой зависимости выхода для образца с более длительным временем отжига.

В заключение отметим, что известна работа [7] по определению местоположения кислорода в кремнии методом каналирования, в которой делается вывод, что кислород внедрения занимает положение более низкой симметрии, а именно тетраэдральное междоузлие. При общей идентичности подхода к решению задачи и близости условий эксперимента цитируемой работы и настоящей укажем на различие условий легирования (доза $1 \cdot 10^{17}$ ат/см²) и отжига (температура 350° в процессе имплантации).

Авторы благодарят В. П. Мельника, В. Н. Романюка и В. Н. Павловича за предоставление образцов и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] W. Kaiser, P. H. Kech, C. J. Lange. Phys. Rev., 101, 1264 (1956).
- [2] C. Claeys, J. Vanhellefont. Proc. II Int. Aut. Meet: «Gettering and Defect Engineering in the Semiconductor Technology», 3. Gadget (1987).
- [3] D. R. Bosomworth, W. Hayes, A. R. L. Spray, G. D. Watkins. Proc. Roy. Soc. A, 317, 133 (1970).
- [4] J. R. Cameron. Phys. Rev., 90, 839 (1953).
- [5] J. A. Leavitt, L. C. McIntyre, M. D. Ashbaugh, J. G. Oder, Z. Lin, B. Dezfouly-Arjomandy. Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res., 44, 260 (1990).
- [6] М. А. Кумахов. УФН, 115, 425 (1975).
- [7] Ю. Ю. Крючков, Ю. А. Тимошенко, И. П. Чернов, Н. В. Славин, Б. С. Азиков. ФТП, 11, 1409 (1977).