

# Влияние кислорода на сегрегационное перераспределение редкоземельных элементов в аморфизованных имплантацией слоях кремния

© О.В. Александров<sup>¶</sup>

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 16 ноября 2005 г. Принята к печати 14 января 2006 г.)

Развита модель сегрегационного перераспределения примесей редкоземельных элементов при твердофазной эпитаксиальной кристаллизации слоев кремния, аморфизованных имплантацией. В основе модели лежит образование на межфазной границе со стороны *a*-Si переходного слоя с высокой подвижностью атомов, ширина которого определяется диффузионной длиной вакансий в *a*-Si. В рамках модели проанализированы концентрационные профили Eг в кремнии при его соимплантации с кислородом. Показано, что при больших дозах имплантации редкоземельных ионов необходимо учитывать образование кластеров  $R_m$  ( $m = 4$ ), где R — атом редкоземельного элемента, а при соимплантации ионов кислорода — образование комплексов  $RO_n$  ( $n = 3-6$ ), влияющих на ширину переходного слоя и коэффициент сегрегации.

PACS: 61.72.Cc, 61.72.Ji, 61.72.Tt, 66.30.Jt, 64.75+g

## 1. Введение

При отжиге слоев кремния, аморфизованных ионной имплантацией, (*a*-Si) происходит их твердофазная эпитаксиальная (ТФЭ) кристаллизация (*c*-Si), которая сопровождается сегрегационным перераспределением примесей редкоземельных элементов (РЗЭ): Eг, Ho, Yb и Pr [1–5]. На характер перераспределения влияют условия имплантации: температура подложки, энергия и доза ионов РЗЭ [6], а также соимплантация ионов кислорода [2,4–6]. В рамках предложенной нами количественной модели [7] это явление объясняется образованием в аморфном кремнии, прилегающем к межфазной границе, переходного слоя с высокой подвижностью атомов примеси. В отношении сегрегации такой переходный слой является аналогом жидкой зоны в методе зонной кристаллизации, и поэтому к нему оказались применимы соответствующие уравнения баланса примеси [7]. Условия имплантации влияют на ширину переходного слоя (зоны), что связывалось с изменением степени дефектности аморфизованного слоя [6]. В процессе ТФЭ кристаллизации коэффициент сегрегации примеси РЗЭ ( $m_s$ ) возрастал от  $m_{s\min} \approx 0.005-0.02$  до  $m_{s\max} \approx 0.2-1.8$  [2,4–7].

В качественной модели работы [2] изменение коэффициента сегрегации РЗЭ объяснялось изменением состояния примеси в переходном слое, диффундирующей, по предположению авторов, аналогично примесям переходных металлов — по междоузлиям с захватом на ловушки. Согласно модели [2], при малой концентрации вся примесь связана на ловушках в переходном слое *a*-Si, прилегающем к межфазной границе; в этом случае  $m_s \ll 1$ . При больших концентрациях, когда все ловушки в переходном слое *a*-Si насыщены, большая часть примеси диффундирует по междоузлиям и может свободно

переходить в *c*-Si; в этом случае  $m_s = 1$  [2]. Заметим, однако, что в отличие от примесей переходных металлов коэффициенты диффузии примесей РЗЭ в кремнии весьма малы [8,9] и не превосходят коэффициенты диффузии основных легирующих примесей (B, P, As, Sb). Таким образом, диффузия примесей РЗЭ больше похожа на диффузию основных легирующих примесей замещения, чем на быструю диффузию примесей переходных металлов, являющихся преимущественно примесями внедрения. Кроме того, нами было показано, что коэффициент сегрегации является функцией не концентрации РЗЭ, а толщины перекристаллизованного слоя [7].

Соимплантация ионов кислорода приводит к значительному увеличению коэффициента сегрегации примесей РЗЭ [2,4–6]. Авторами работы [2] этот эффект связывается с уменьшением плотности ловушек для РЗЭ Eг в *a*-Si. Более вероятной причиной, однако, представляется образование комплексов состава Eг–O, на существование которых указывается в целом ряде работ (см., например, [10–13]).

Для объяснения установленного в [7] роста коэффициента сегрегации примесей РЗЭ с толщиной закристаллизовавшегося слоя нами была предложена модель сегрегации РЗЭ [14], в которой учитывается генерация собственных точечных дефектов — вакансий на движущейся межфазной границе *a*-Si/*c*-Si. В рамках этой модели образование переходного слоя с высокой подвижностью атомов примеси РЗЭ связывалось с накоплением вблизи межфазной границы вакансий, а рост коэффициента сегрегации — с образованием комплексов вакансий с примесями РЗЭ, захватываемых надвигающимся фронтом ТФЭ кристаллизации.

Цель настоящей работы заключалась в развитии модели [14] на случай больших доз имплантации РЗЭ и соимплантации кислорода, когда необходимо учитывать взаимодействие атомов РЗЭ с атомами кислорода и кластеризацию атомов обеих примесей.

<sup>¶</sup> E-mail: Aleksandrov@svs.ru

## 2. Описание модели

При ТФЭ кристаллизации аморфизованного имплантацией РЗЭ слоя кремния происходит движение межфазной границы  $a\text{-Si}/c\text{-Si}$  от первоначальной границы аморфизованного слоя ( $x = x_{a0}$ ) к поверхности ( $x = 0$ ). При этом на межфазной границе со стороны  $a\text{-Si}$  происходит накопление атомов РЗЭ, из которых только часть переходит в  $c\text{-Si}$  вследствие процесса сегрегации с  $m_s < 1$ . Как показано в [4–7] для примесей РЗЭ Er, Ho, Yb, коэффициент сегрегации на начальном участке ТФЭ кристаллизации падает от 1 до некоторого минимального значения  $m_{s \min}$ , а затем растет до  $m_{s \max} \approx 1$ . Такое поведение коэффициента сегрегации в процессе ТФЭ кристаллизации аморфного слоя кремния связывается нами с генерацией на межфазной границе собственных точечных дефектов — вакансий [14].

Образование избыточных вакансий в процессе ТФЭ кристаллизации аморфного слоя обусловлено тем, что плотность кристаллизующегося  $a\text{-Si}$  меньше плотности  $c\text{-Si}$  (на 1.74% по данным [15]). Это положение о генерации вакансий на межфазной границе в процессе ТФЭ кристаллизации аморфизованного кремния является естественным дополнением к положению о поглощении вакансий при росте аморфной фазы, используемом в ряде моделей аморфизации (см., например, [16,17]). Избыточные вакансии диффундируют от межфазной границы в  $a\text{-Si}$  и  $c\text{-Si}$ , захватываясь на ловушки — радиационные нарушения (РН) в  $a\text{-Si}$ , а также стекая на внешние поверхности слоя  $a\text{-Si}$  и подложки  $c\text{-Si}$ . При подходе фронта кристаллизации вакансии, захваченные на РН в слое  $a\text{-Si}$ , прилегающем к межфазной границе, освобождаются, давая тем самым рост скорости их генерации на межфазной границе

$$G_V = T_{Vas}U, \quad (1)$$

где  $T_{Vas}$  — концентрация ловушек на межфазной границе в  $a\text{-Si}$ , захвативших вакансии,  $U$  — скорость ТФЭ кристаллизации. Рост скорости генерации вакансий приводит к тому, что концентрация вакансий на межфазной границе непрерывно растет с толщиной закристаллизованного слоя.

В результате роста концентрации вакансий перед фронтом ТФЭ кристаллизации в  $a\text{-Si}$  образуется переходный слой с повышенной подвижностью примесных атомов РЗЭ. Вакансии в  $a\text{-Si}$  представляют собой ненасыщенные связи, которые могут захватывать свободные атомы РЗЭ, препятствуя их оттоку от надвигающейся межфазной границы и тем самым способствуя их переходу через межфазную границу. Доля атомов примеси РЗЭ, перешедших через межфазную границу, пропорциональна, таким образом, концентрации вакансий. В состоянии равновесия, когда концентрация вакансий на межфазной границе со стороны  $a\text{-Si}$  равна термодинамически равновесной,  $C_{Vas} = C_{Va}^*$ , коэффициент сегрегации атомов РЗЭ равен равновесному,  $m_s = m_{s0}$ , поэтому

выражение для коэффициента сегрегации свободных атомов РЗЭ принимает вид

$$m_s = \frac{(C_{fs})_c}{(C_{fs})_a} = \frac{m_{s0}a_{Vas}}{1 + m_{s0}a_{Vas}}, \quad (2)$$

где  $(C_{fs})_c$  и  $(C_{fs})_a$  — концентрации свободных атомов РЗЭ на межфазной границе со стороны  $c\text{-Si}$  и  $a\text{-Si}$  соответственно,  $a_{Vas}$  — относительная концентрация вакансий на межфазной границе со стороны  $a\text{-Si}$ ,  $a_{Vas} = C_{Vas}/C_{Va}^*$ .

Под действием избыточной концентрации вакансий происходит также активация процессов массопереноса примеси РЗЭ через межфазную границу. Как и в [4], полагаем, что коэффициент массопереноса возрастает экспоненциально с толщиной закристаллизованного слоя ( $W = Ut$ , где  $t$  — время):

$$h_s = h_{s0} \exp(W/L_h), \quad (3)$$

где  $h_{s0}$  — начальный коэффициент массопереноса,  $L_h$  — характеристическая длина. С учетом массопереноса эффективный коэффициент сегрегации свободных атомов РЗЭ принимает вид [4]

$$m_e = \frac{m_s h_s + U}{h_s + U}. \quad (4)$$

При увеличении коэффициента массопереноса кинетический захват атомов примеси ( $m_e = 1$  при  $h_s \ll U$ ) сменяется процессом равновесной сегрегации ( $m_e = m_s$  при  $h_s \gg U$ ).

При высоких концентрациях, превышающих предел растворимости, часть атомов РЗЭ в переходном слое  $a\text{-Si}$  может связываться в кластеры (предвыделения) типа  $R_m$ , где  $R$  — атом РЗЭ, а  $m$  — число атомов РЗЭ в кластере. Полагаем, что процесс образования–распада кластеров  $R_m$  происходит достаточно быстро, так что соответствующая реакция находится в равновесии и выражение для концентрации кластеров РЗЭ имеет вид

$$C_R = k_R C_{fs}^m, \quad (5)$$

где  $k_R$  — константа равновесия реакции кластерообразования,  $C_{fs}$  — концентрация свободных атомов РЗЭ в переходном слое  $a\text{-Si}$ .

При наличии кислорода в высокой концентрации его атомы могут взаимодействовать с атомами РЗЭ с образованием РЗЭ-кислородных комплексов  $RO_n$ , где  $n$  — число атомов кислорода в комплексе [18]. Полагаем, что процесс образования–распада комплексов  $RO_n$  в переходном слое  $a\text{-Si}$  происходит достаточно быстро, так что соответствующая реакция находится в равновесии, и выражение для концентрации РЗЭ-кислородных комплексов имеет вид

$$C_{RO} = k_{RO} C_O^n C_{fs}, \quad (6)$$

где  $k_{RO}$  — константа равновесия реакции комплексообразования,  $C_O$  — концентрация кислорода.

При фазовом переходе  $a\text{-Si} \rightarrow c\text{-Si}$  на фронте кристаллизации выделяется энергия  $\sim 0.12$  эВ/атом [15]. Полагаем, что этой энергии достаточно для развала кластеров  $R_m$ , но недостаточно для развала комплексов  $RO_n$ , имеющих большую энергию связи. При подходе фронта кристаллизации кластеры  $R_m$  распадаются, не переходя через межфазную границу, тогда как комплексы  $RO_n$  сохраняются и кинетически переходят в растущий эпитаксиальный слой  $c\text{-Si}$ . В этом случае эффективный коэффициент сегрегации принимает вид

$$m_{\text{eff}} = \frac{(C_{fs} + C_{RO})_c}{(C_{fs} + C_R + C_{RO})_a} = \frac{m_e + k_{RO}C_O^n}{1 + k_R C_{fs}^{m-1} + k_{RO}C_O^n}. \quad (7)$$

Распределение вакансий по глубине может быть найдено из решения системы диффузионно-кинетических уравнений для вакансий в аморфной ( $a$ ) и кристаллической ( $c$ ) фазах с движущейся межфазной границей  $a\text{-Si}/c\text{-Si}$  с учетом захвата вакансий на РН в аморфной фазе и их генерации на межфазной границе:

$$\frac{\partial C_{Va}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{Va} \frac{\partial C_{Va}}{\partial x} \right) - k_{Va}(T_{Va0} - T_{Va})(C_{Va} - C_{Va}^*), \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_{Vc}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{Vc} \frac{\partial C_{Vc}}{\partial x} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\partial T_{Va}}{\partial t} = k_{Va}(T_{Va0} - T_{Va})(V_{Va} - C_{Va}^*), \quad (10)$$

где  $C_V$  и  $C_V^*$  — текущие и термодинамически равновесные концентрации вакансий соответственно (принимались  $C_{Va}^* = 10^5 \text{ см}^{-3}$ ,  $C_{Vc}^* = 10^3 \text{ см}^{-3}$ ),  $D_{Vc}$  и  $D_{Va}$  — коэффициенты диффузии вакансий в  $c$ - и  $a$ -фазах соответственно (полагались  $D_{Va} = D_{Vc} = 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$ ),  $T_{Va0}$  и  $T_{Va}$  — начальная концентрация пустых и текущая концентрация заполненных ловушек, связанных с РН в  $a\text{-Si}$ ,  $k_{Va}$  — скорость взаимодействия вакансий с РН в  $a\text{-Si}$ ,  $k_{Va} = 4\pi R_{Va} D_{Va}$ ,  $R_{Va}$  — радиус взаимодействия вакансий с РН в  $a\text{-Si}$ ; нижние индексы  $a$  и  $c$  указывают на принадлежность параметров к  $a$ - или  $c$ -фазе соответственно.

Граничные условия для вакансий на внешних поверхностях  $a$ -слоя (при  $x = 0$ ) и  $c$ -подложки (на конце области решения) определяются их поверхностной рекомбинацией:

$$D_V \partial C_V / \partial x = S_V (C_V - C_V^*), \quad (11)$$

где  $S_V$  — скорость поверхностной рекомбинации вакансий (бралось значение  $S_V = 0.1 \text{ см}/\text{с}$ ). Поскольку вакансии в обеих фазах подвижны, граничные условия для них на движущейся межфазной границе (при  $x = x_{a0}$ ) соответствуют равновесной сегрегации:

$$D_{Vc} \partial C_{Vc} / \partial x + UC_{Vc} = D_{Va} \partial C_{Va} / \partial x + UC_{Va} + G_V; \quad (12)$$

$$C_{Vc} = m_{sV} C_{Va},$$

где  $m_{sV}$  — коэффициент сегрегации вакансий на межфазной границе (принимался  $m_{sV} = 0.01$ ).

При однородном начальном распределении ловушек ( $T_{Va0} = \text{const}$ ) и малой степени их заполнения в начале ТФЭ кристаллизации ( $T_{Va} \ll T_{Va0}$ ) концентрация вакансий на межфазной границе растет по экспоненциальному закону:  $C_{Vas} = C_{Va}^* \exp(W/L_a)$ , где  $L_a$  — характеристическая длина,  $L_a = \sqrt{D_{Va}/k_{Va}T_{Va0}}$ .

Изменение суммарной концентрации РЗЭ в переходном слое  $a\text{-Si}$ ,  $C_{as} = C_{fs} + C_R + C_{RO}$ , во времени описывается уравнениями баланса примеси при зонной и направленной кристаллизации соответственно [7]:

$$\frac{dC_{as}}{dt} = \frac{(C_{a0} - m_{\text{eff}} C_{as})U}{L} \quad \text{при } L \leq x \leq x_a, \quad (13)$$

$$\frac{dC_{as}}{dt} = \frac{(m_{\text{eff}} - 1)C_{a0}}{L - W} \quad \text{при } 0 \leq x \leq L, \quad (14)$$

где  $C_{a0}$  — начальное распределение примеси в аморфном слое до ТФЭ кристаллизации,  $L$  — ширина переходного слоя. Концентрация примеси в  $c\text{-Si}$  после ТФЭ кристаллизации находится из выражения

$$C_c = m_{\text{eff}} C_{as}. \quad (15)$$

В качестве ширины переходного слоя с высокой подвижностью атомов принимаем диффузионную длину вакансий в  $a\text{-Si}$ ,  $L = L_{Va}$ . Последняя определяется захватом вакансий на радиационные нарушения и их рекомбинацией на кластерах  $R_m$  и комплексах  $RO_n$  в  $a\text{-Si}$ :

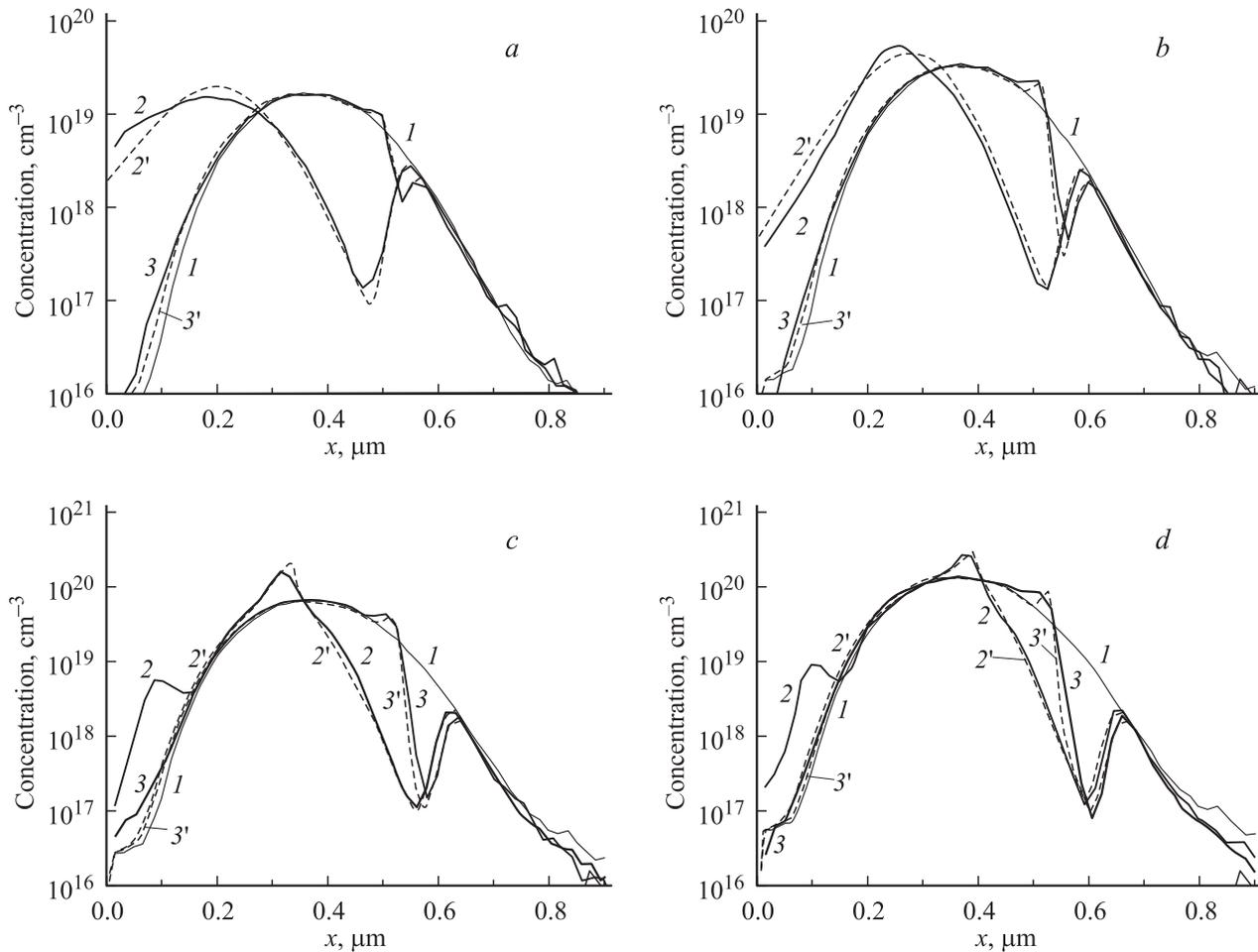
$$L_{Va} = \sqrt{D_{Va}/[k_{Va}(T_{Va0} - T_{Va}) + k_{VR}C_R + k_{VRO}C_{RO}]}, \quad (16)$$

где  $k_{VR}$  и  $k_{VRO}$  — скорости взаимодействия вакансий с кластерами  $R_m$  и комплексами  $RO_n$  соответственно,  $k_{VR} = 4\pi R_{VR} D_{Va}$ ,  $k_{VRO} = 4\pi R_{VRO} D_{Va}$ ,  $R_{VR}$  и  $R_{VRO}$  — соответствующие радиусы захвата вакансий. При изменении диффузионной длины вакансий изменяется и ширина переходного слоя, при этом в соответствии с условием сохранения в нем количества примеси изменяется и концентрация примеси в переходном слое:

$$C_{as}(L + \Delta L) = C_{as}(L) L / (L + \Delta L), \quad (17)$$

где  $\Delta L$  — изменение ширины переходного слоя.

Задача о перераспределении примеси РЗЭ при ТФЭ кристаллизации  $a\text{-Si}$  сводится, таким образом, к решению уравнений (13)–(15) для примеси РЗЭ с шириной переходного слоя  $L$ , определяемой соотношениями (16), (17), и с коэффициентом сегрегации, зависящим от концентрации вакансий и определяемым соотношениями (2), (4) и (7). Концентрация вакансий находится из решения системы уравнений (8)–(10) с граничными условиями (11) и (12). Уравнения (13), (14) решались численно методом Рунге–Кутты, а уравнения (8)–(10) — методом факторизации с использованием неявной разностной схемы и редукции к неподвижным границам.



Концентрационные профили Er: 1 — после имплантации Er<sup>+</sup>; 2, 2' — после имплантации Er<sup>+</sup> с последующей ТФЭ кристаллизацией; 3, 3' — после соимплантации Er<sup>+</sup> и O<sup>+</sup> с последующей ТФЭ кристаллизацией. Доза имплантации Er<sup>+</sup>, см<sup>-2</sup>: a — 4 · 10<sup>14</sup>, b — 8 · 10<sup>14</sup>, c — 1.6 · 10<sup>15</sup>, d — 3.2 · 10<sup>15</sup>; доза соимплантации кислорода Q(O<sup>+</sup>) = 10Q(Er<sup>+</sup>). (1–3) — эксперимент [6]. (2'–3') — расчет по модели. Параметры расчета: a — T<sub>Va0</sub> = 1.1 · 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>, C<sub>RO</sub> = 5 · 10<sup>19</sup> см<sup>-3</sup>, n = 3; b — T<sub>Va0</sub> = 1.4 · 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>, C<sub>RO</sub> = 8 · 10<sup>19</sup> см<sup>-3</sup>, n = 4; c — T<sub>Va0</sub> = 1.6 · 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>, C<sub>RO</sub> = 1.5 · 10<sup>20</sup> см<sup>-3</sup>, n = 5; d — T<sub>Va0</sub> = 2.0 · 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>, C<sub>RO</sub> = 2.5 · 10<sup>20</sup> см<sup>-3</sup>, n = 6.

### 3. Результаты расчета и их обсуждение

Результаты расчета сравнивались с экспериментальными профилями PЗЭ Er в Si(100) из работы [6], полученными путем имплантации ионов Er<sup>+</sup> при энергии 1 МэВ с дозами, превышающими порог аморфизации, от 4 · 10<sup>14</sup> до 3.2 · 10<sup>15</sup> см<sup>-2</sup>. Соимплантация ионов кислорода проводилась при энергии ионов 280 кэВ, позволяющей получить тот же пробег, что и в случае ионов PЗЭ (R<sub>p</sub> = 0.38 мкм), с дозами, на порядок превосходящими соответствующую дозу Er, Q(O<sup>+</sup>) = 10Q(Er<sup>+</sup>). Имплантация ионов Er<sup>+</sup> и O<sup>+</sup> проводилась при комнатной температуре, а отжиг имплантированных слоев, сопровождаемый ТФЭ кристаллизацией, проводился при температуре 620 °С в течение 30 мин. Профили распределения концентраций Er и O по глубине определялись методом вторично-ионной масс-спектрометрии на установке Cameca IMS-4f.

Расчет проводился при следующих значениях параметров: U = 2.7 · 10<sup>-7</sup> см/с, что соответствует скорости ТФЭ кристаллизации при температуре 620 °С [15]; значения h<sub>s0</sub> = 1.2 · 10<sup>-8</sup> см/с и L<sub>h</sub> = 8 · 10<sup>-7</sup> см определялись по начальному участку спада концентрации от x = x<sub>a0</sub> и были одинаковыми при всех дозах имплантации. Значения T<sub>Va0</sub> и R<sub>Va</sub> определялись из сравнения расчета с экспериментальными профилями Er без соимплантации ионов кислорода, значения k<sub>R</sub> и R<sub>VR</sub> — при больших дозах имплантации, Q(Er) ≥ 1.6 · 10<sup>15</sup> см<sup>-2</sup>, а значения k<sub>RO</sub> и R<sub>VRO</sub> — при соимплантации ионов кислорода.

На рисунке представлены экспериментальные (кривые 1, 2) и расчетные (кривые 2') профили распределения PЗЭ эрбия до (кривые 1) и после (кривые 2, 2') ТФЭ кристаллизации при возрастающих дозах имплантации PЗЭ (без соимплантации кислорода). Как видно из рисунков, с ростом дозы имплантации происходит увеличение начальной толщины a-слоя от x<sub>a0</sub> = 0.56 мкм при Q(Er<sup>+</sup>) = 4 · 10<sup>14</sup> см<sup>-2</sup>

до  $x_{a0} = 0.68$  мкм при  $Q(\text{Er}^+) = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ . Расчет удовлетворительно описывает эксперимент (см. кривые 2 и 2' на рисунке, *c, d*) при сублинейном увеличении концентрации вакансионных ловушек в *a*-слое, определяющей наклон восходящей (после участка спада) части профиля. Концентрация ловушек меняется от  $T_{Va0} = 1.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $Q(\text{Er}^+) = 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  до  $T_{Va0} = 2.0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $Q(\text{Er}^+) = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$  для  $R_{Va} = c$ , где  $c$  — межатомное расстояние в решетке кремния ( $c = 2.35 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ ). Сублинейное увеличение концентрации ловушек и соответствующее уменьшение ширины переходного слоя связывается нами с ростом степени дефектности *a*-слоя при увеличении дозы имплантации РЗЭ выше пороговой дозы аморфизации [6].

При больших дозах имплантации,  $Q(\text{Er}^+) \geq 1.6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ , в конце восходящей части профиля появляется горб концентрации. В рамках модели появление горба вызвано образованием кластеров РЗЭ  $R_m$ , уменьшающих диффузионную длину вакансий и соответственно ширину переходного слоя. Найдены значения параметров кластеров:  $m = 4$ ,  $C_R = (k_R)^{-(m-1)} = 1 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ,  $R_{VR} = 2.9 \cdot 10^{-9} \text{ см}$ .

Экспериментальные и расчетные профили РЗЭ Er при соимплантации ионов  $\text{O}^+$  показаны на рисунке кривыми 3, 3'. Соимплантация кислорода приводит к увеличению наклона восходящей части концентрационных профилей и образованию „горба“ в его конце. И то и другое в рамках модели объясняется образованием эрбий-кислородных комплексов  $\text{RO}_n$ . Найдены следующие значения параметров комплексов:  $R_{VRO} = 6.8 \cdot 10^{-9} \text{ см}$ ; показатель степени в выражении для концентрации комплексов (6) возрастает с увеличением дозы кислорода от  $n = 3$  при дозе  $Q(\text{O}^+) = 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  до  $n = 6$  при дозе  $Q(\text{O}^+) = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$  при соответствующем возрастании величины  $C_{RO} = (k_{RO})^{-n}$  от  $5 \cdot 10^{19}$  до  $2.5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

Образование кислородных комплексов на атомах РЗЭ  $\text{RO}_n$  приводит к увеличению эффективного коэффициента сегрегации примеси РЗЭ вследствие кинетического захвата комплексов фронтом ТФЭ кристаллизации, что приводит к более крутому подъему восходящей части профиля. Наличие „горба“ в конце восходящей части профиля обусловлено уменьшением ширины переходного слоя при образовании комплексов  $\text{RO}_n$ , являющихся рекомбинационными центрами для вакансий и уменьшающими их диффузионную длину. Рост показателя степени  $n$  и концентрации начала комплексообразования  $C_{RO}$  при увеличении дозы имплантации кислорода связан с укрупнением комплексов  $\text{RO}_n$  по мере увеличения пересыщения твердого раствора кислорода в кремнии.

В области спада концентрации РЗЭ к поверхности при больших дозах имплантации РЗЭ, а также при соимплантации кислорода превышение текущей концентрации РЗЭ (после ТФЭ кристаллизации) над первоначальной (после имплантации) весьма мало, что обусловлено малой шириной переходного слоя. Сохранение малой

ширины переходного слоя или малой диффузионной длины вакансий в области, где концентрации кластеров  $R_m$  и комплексов  $\text{RO}_n$  уменьшаются, может быть связано с образованием протяженных дефектов, прорастающих в эпитаксиальный слой из области максимума кластеризации и комплексообразования. Наличие протяженных дефектов учитывается в модели путем установления  $L_{Va} = \text{const}$  вплоть до самой поверхности с момента падения  $L_{Va}$  до величины  $1 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ . Такими дефектами являются, по-видимому, преципитаты эрбия и V-образные (hairpin) дислокации, наблюдающиеся в слоях кремния, имплантированных ионами  $\text{Er}^+$  и  $\text{O}^+$  [19].

Образование второго „горба“ на спадающей к поверхности части концентрационного профиля Er на глубине  $\sim 0.1$  мкм, наблюдающееся при больших дозах имплантации Er без соимплантации ионов  $\text{O}^+$  (кривые 2 на рисунке *c, d*), может быть объяснено локальным увеличением ширины переходного слоя. Обусловившее его уменьшение концентрации вакансионных ловушек в этой области связано, по-видимому, с прекращением образования преципитатов Er в области спада концентрации. Известно также, что при имплантации ионов высоких энергий в приповерхностной области кремния происходит накопление дефектов вакансионного типа [20], что тоже может приводить к изменению условий роста протяженных дефектов в этой области.

## 4. Заключение

Развита модель сегрегационного перераспределения РЗЭ при ТФЭ кристаллизации аморфизованного слоя кремния, в основе которой лежит образование переходного *a*-слоя с высокой подвижностью атомов примеси вследствие генерации вакансий на межфазной границе; ширина переходного слоя определяется диффузионной длиной вакансий. В рамках модели проанализировано влияние дозы имплантации ионов РЗЭ  $\text{Er}^+$  и соимплантации ионов  $\text{O}^+$  на сегрегационное перераспределение эрбия при ТФЭ кристаллизации аморфизованных слоев кремния. Показано, что все профили РЗЭ Er описываются одной системой параметров с учетом изменения начального положения границы *a*-слоя при увеличении дозы имплантации ионов РЗЭ  $\text{Er}^+$  и  $\text{O}^+$ . При больших дозах имплантации РЗЭ ( $Q(\text{Er}^+) \geq 1.6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ ) необходимо учитывать образование кластеров РЗЭ  $R_m$  ( $m = 4$ ), которые приводят к уменьшению диффузионной длины вакансий и соответственно ширины переходного слоя. Влияние соимплантации ионов кислорода на перераспределение РЗЭ Er объясняется образованием в переходном *a*-слое эрбий-кислородных комплексов  $\text{RO}_n$  ( $n = 3-6$ ), которые кинетически захватываются двигающейся *c*-фазой, давая вклад в сегрегацию. Являясь рекомбинационными центрами для вакансий в *a*-Si, они также уменьшают ее диффузионную длину.

## Список литературы

- [1] D. Mountonnet, H. L'Haridon, P.N. Favennec, M. Salvi, M. Gauneau, F.A. D'Avitaya, J. Chroboczek. *Mater. Sci. Eng. B*, **4**, (1/4), 75 (1989).
- [2] J.S. Custer, A. Polman, H.M. Pinxtern. *J. Appl. Phys.*, **75** (6), 2809 (1994).
- [3] J.F. Suyver, P.G. Kik, T. Kimura, A. Polman, G. Franzo, S. Coffa. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, **B148**, 497 (1999).
- [4] О.В. Александров, Ю.А. Николаев, Н.А. Соболев. *ФТП*, **34** (1), 3 (2000).
- [5] О.В. Александров, Ю.А. Николаев, Н.А. Соболев, R. Asomaza, Yu. Kundriavtsev, A. Villegas, A. Godines. *ФТП*, **37** (12), 1409 (2003).
- [6] О.В. Александров, Ю.А. Николаев, Н.А. Соболев. *ФТП*, **33** (1), 114 (1999).
- [7] О.В. Александров, Ю.А. Николаев, Н.А. Соболев. *ФТП*, **32** (12), 1420 (1998).
- [8] Д.Э. Назыров, Г.С. Куликов, Р.Ш. Малкович. *ФТП*, **25** (9), 1653 (1991).
- [9] F.J.G. Ren, J. Michel, Q. Sun-Paduano, B. Zheng, H. Kitagawa, D.C. Jacobson. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **301**, 87 (1993).
- [10] В.Ф. Мастеров, Ф.С. Насрединов, П.П. Серегин, Е.И. Теруков, М.М. Мездрогина. *ФТП*, **32** (6), 708 (1998).
- [11] A. Terrasi, G. Franzo, S. Coffa, F. Priolo, F. D'Acapito, S. Mobilio. *Appl. Phys. Lett.*, **70** (13), 1712 (1997).
- [12] J.D. Carrey, R.C. Barklie, J.F. Donegan, F. Priolo, G. Franzo, S. Coffa. *Phys. Rev. B*, **59** (4), 2773 (1999).
- [13] M. Hashimoto, A. Yanaza, H. Narima, H. Katayama-Yoshida. *Physica B*, **308–310**, 378 (2001).
- [14] О.В. Александров. *Конденсированные среды и межфазные границы*, **1** (4), 283 (1999).
- [15] S. Roorda, J.S. Custer, W.C. Sinke, J.M. Poate, D.C. Jacobson, A. Polman, F. Spaepen. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, **B59/60**, 344 (1991).
- [16] И.А. Аброян, В.С. Беляков, А.И. Титов. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **58** (10), 59 (1994).
- [17] A.I. Titov, S.O. Kucheyev. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, **B168**, 375 (2000).
- [18] О.В. Александров, А.О. Захарьин, Н.А. Соболев. *ФТП*, **39** (7), 776 (2005).
- [19] Н.А. Соболев, А.М. Емельянов, Ю.А. Николаев, В.И. Вдовин. *ФТП*, **33** (6), 660 (1999).
- [20] E. Chason, S.T. Picraux, J.M. Poate, J.O. Borland, M.I. Current, T. Diaz de la Rubia, D.J. Eaglesham, O.W. Holland, M.E. Law, C.W. Magee, J.W. Mayer, J. Melngailis, A.F. Tasch. *J. Appl. Phys.*, **81** (10), 6513 (1997).

*Редактор Л.В. Шаронова*

## The influence of oxygen on segregation redistribution of the rare-earth elements in silicon layers amorphized by impantation

*O.V. Aleksandrov*

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,  
197376 St. Petersburg, Russia