

04.08.09

Транспорт заряда в нитриде кремния, облученного ионами бора

© В.А. Гриценко^{1,2}, Ю.Н. Новиков^{1,¶}, А.А. Гисматулин¹

¹ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

¶ E-mail: nov@isp.nsc.ru

Поступила в Редакцию 20 марта 2026 г.

В окончательной редакции 27 марта 2026 г.

Принята к публикации 1 апреля 2026 г.

Наблюдалось увеличение проводимости аморфного нитрида кремния Si_3N_4 примерно на три порядка в результате облучения его ионами бора с энергией 100 keV и дозой $3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^2$. Отжиг облученных образцов возвращал проводимость к исходному значению. Увеличение проводимости облученного Si_3N_4 объясняется образованием радиационных дефектов. Перенос заряда в исходном (до облучения) образце Si_3N_4 удовлетворительно описывается многофононным механизмом ионизации изолированных ловушек с термической энергией $W_t = 1.6 \text{ eV}$. После облучения ионами перенос заряда в Si_3N_4 ограничивается фонон-облегченным туннелированием между соседними ловушками с $W_t = 1.45 \text{ eV}$.

Ключевые слова: многофононная ионизация, фонон-облегченное туннелирование, радиационные дефекты, ловушки, Si–Si-связи.

DOI: 10.61011/FTT.2026.04.63318.9277

1. Введение

Оксид кремния (SiO_2) и нитрид кремния (Si_3N_4) являются ключевыми диэлектриками в микроэлектронике и широко используются в базовых процессах планарной технологии [1]. Слои SiO_2 и Si_3N_4 используются в качестве маскирующих покрытий при диффузии и ионной имплантации примесей. Во время имплантации ионов через диэлектрик в полупроводник образуются радиационные дефекты, которые могут изменить его физические свойства, в т.ч. проводимость. Изучение влияния ионного облучения на проводимость диэлектриков представляет научный и практический интерес. В работе [2] показано, что имплантация ионов В или Р в Si_3N_4 приводит к образованию ловушек, способных захватывать заряд. В работе [3] показано, что имплантация ионов N^+ в подзатворный диэлектрик приводит к образованию в нем электронных ловушек. В работе [4] показано, что протонное облучение Si_3N_4 приводит к увеличению проводимости.

Целью настоящей работы является экспериментальное и теоретическое изучение влияния облучения ионами B^+ на перенос заряда в Si_3N_4 .

2. Методика эксперимента и расчета

Аморфные пленки Si_3N_4 синтезированы из смеси силана SiH_4 и аммиака NH_3 при температуре 850 °С в соотношении $\text{SiH}_4:\text{NH}_3 = 1:100$ [5]. Si_3N_4 облучался ионами B^+ с энергией 100 keV и дозой $3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Отжиг облученного Si_3N_4 осуществлялся в атмосфере азота при температуре 700 °С в течение 30 min. Для

измерения температурных и вольт-амперных характеристик на Si_3N_4 были напылены алюминиевые электроды (Al). Для описания переноса электронов в Si_3N_4 использовалась одномерная однозонная модель:

$$\begin{cases} \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} - \sigma v n(x, t) (N_t - n_t(x, t)) \\ \quad + n_t(x, t) P(x, t) \\ \frac{\partial n_t(x, t)}{\partial t} = \sigma v n(x, t) (N_t - n_t(x, t)) - n_t(x, t) P(x, t) \\ \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} = -\frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} = -e \cdot \frac{n_t(x, t) + n(x, t)}{\epsilon \epsilon_0} \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $n(x, t)$ и $n_t(x, t)$ — концентрации свободных и захваченных на ловушки электронов, N_t — начальная концентрация ловушек, $\sigma = 5 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$ — сечение захвата, $\epsilon = 7$ — низкочастотная диэлектрическая постоянная Si_3N_4 , e — заряд электрона, $U(x, t)$ и $F(x, t)$ — величина потенциала и электрического поля в Si_3N_4 соответственно, $v = 10^7 \text{ cm/s}$ — дрейфовая скорость. Граничным условием для уравнения Пуассона является величина внешнего напряжения U , приложенного к Al; для уравнения, описывающего перенос заряда, граничным условием был инжекционный ток электронов из подложки Si, который рассчитывался на основе механизма Фаулера–Нордгейма.

Расчет вероятности ионизации ловушек в Si_3N_4 производился с использованием трех моделей: эффекта Френкеля [6,7], с учетом термически облегченного туннелирования (thermally assisted tunneling, TAT) (рис. 1, a), многофононного механизма ионизации [8,9], (рис. 1, b)

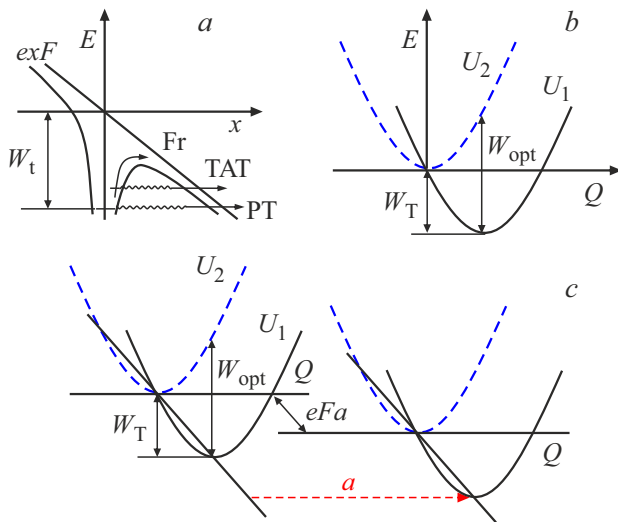


Рис. 1. Энергетические диаграммы трех моделей ионизации ловушек: а) эффект Френкеля, где введены обозначения: Fr — эффект Френкеля, ТАТ — термически облегченное туннелирование, РТ — чистое туннелирование, W_t — энергия кулоновской ловушки; F — электрическое поле; б) многофононный механизм ионизации; U_1 — потенциальная энергия ловушки с электроном, U_2 — потенциальная энергия пустой ловушки, Q — конфигурационная координата, W_T и W_{opt} — термическая и оптическая энергии ионизации ловушки, соответственно; в) фонон-облегченное туннелирование (модель NG), a — расстояние между ловушками.

и фонон-облегченного туннелирования (рис. 1, в) или модель Насырова–Гриценко (NG) [10,11].

Согласно эффекту Френкеля [6], вероятность ионизации ловушки определяется как

$$P_F = \nu \cdot \exp\left(-\frac{W_t - \beta\sqrt{F}}{k_B T}\right); \quad \beta = \sqrt{\frac{e^3}{\pi\epsilon_\infty\epsilon}}. \quad (2)$$

Здесь W_t — энергия ловушки, β — постоянная Френкеля, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\epsilon_\infty = 4.0$ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, ϵ — электрическая постоянная, ν — частотный фактор. Для расчета вероятности ионизации из возбужденного состояния с энергией W использовался ТАТ [9]:

$$P_{TAT} = \frac{\nu}{k_B T} \int_0^{W_t - \beta\sqrt{F}} dW \times \exp\left(-\frac{W}{k_B T} - \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{m^*(eV(x) - W)}\right), \quad (3)$$

$$V(x) = W_t - \frac{e}{4\pi\epsilon_\infty\epsilon} Fx.$$

Здесь $V(x)$ — кулоновский барьер, x — координата, m^* — туннельная эффективная масса, \hbar — постоянная

Планка. Классические точки поворота x_1, x_2 рассчитывались по формуле

$$x_{1,2} = \frac{W_t - W}{2eF} \left(1 \pm \left(\frac{eF}{\pi\epsilon_\infty\epsilon(W_t - W)^2}\right)^{1/2}\right). \quad (4)$$

Вероятность ионизации по механизму Френкеля с учетом ТАТ рассчитывалась по формуле [9]

$$P_{F,TAT} = P_F + P_{TAT}. \quad (5)$$

Для вычисления вероятности ионизации с учетом модели многофононной ионизации или модель Макрама–Эбейда и Ланноо (MEL) использовалась формула [8,9]

$$P_{MF} = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \exp\left[\frac{nW_{ph}}{2k_B T} - S \cdot \coth \frac{W_{ph}}{2k_B T}\right] \times I_n\left(\frac{S}{\sinh(W_{ph}/(2k_B T))}\right) P_i(W_T + nW_{ph}), \quad (6)$$

$$P_i(W) = \frac{eF}{2\sqrt{2m^*W}} \cdot \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m^*}}{3\hbar eF} W^{3/2}\right),$$

$$S = \frac{W_{opt} - W_T}{W_{ph}},$$

где W_T и W_{opt} — термическая и оптическая энергия ионизации ловушки соответственно, W_{ph} — энергия фона, I_n — функция Бесселя n -го порядка.

Эффект Френкеля с учетом ТАТ и многофононный механизм ионизации применимы при достаточно малой концентрации ловушек $N_t < 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. В случае высокой концентрации ловушек, $N_t > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, расстояние между ловушками становится малым (рис. 1, в), и ионизация описывается с использованием модели NG [10] фонон-облегченного туннелирования между соседними ловушками:

$$P_{NG} = \frac{2\hbar W_T \sqrt{\pi}}{m^* \alpha^2 \sqrt{2k_B T (W_{opt} - W_t)}} \cdot \exp\left(-\frac{W_{opt} - W_T}{2k_B T}\right) \times \exp\left(-\frac{2s\sqrt{2m^*W_T}}{\hbar}\right) \cdot \sinh\left(\frac{eFa}{2k_B T}\right). \quad (7)$$

Здесь параметр $\alpha = N_t^{-1/3}$.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 представлены вольт-амперные характеристики (ВАХ) Si_3N_4 : исходного образца (квадраты), облученного ионами B^+ (треугольники), после отжига в атмосфере азота при 700°C (круги). Облучение Si_3N_4 ионами B^+ с дозой $3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^2$ приводит к экспоненциальному возрастанию проводимости примерно на три порядка. Отжиг Si_3N_4 , облученного ионами B^+ , приводит к уменьшению проводимости до величины, соответствующей проводимости исходного, необлученного Si_3N_4 (рис. 2).

На рис. 3 показаны экспериментальные зависимости плотности тока от обратной температуры ($J-T$) исходного Si_3N_4 (квадраты), после облучения Si_3N_4 ионами B^+ (треугольники), после отжига (круги), и $J-T$ -

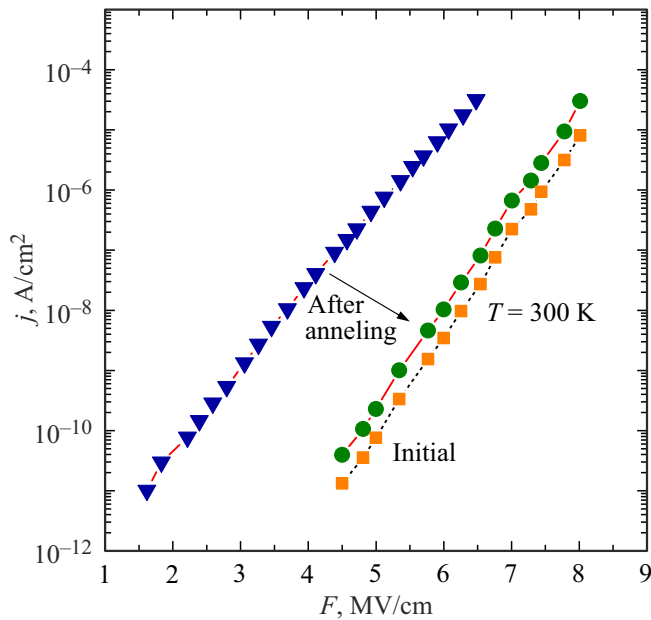


Рис. 2. ВАХ исходного Si_3N_4 (квадраты), облученного ионами B^+ с дозой $3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ и энергией ионов 100 keV (треугольники), и после отжига (круги).

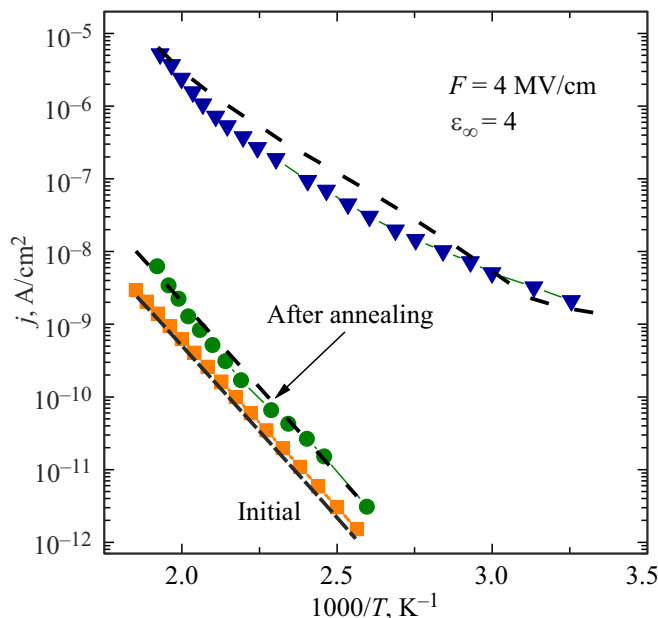


Рис. 3. Экспериментальные $J-T$ -зависимости для исходного Si_3N_4 (квадраты), облученного ионами B^+ (треугольники) и отожженного Si_3N_4 (круги). Рассчитанные $J-T$ -зависимости по модели Френкеля с учетом ТАТ (пунктирные линии). Параметры расчета: $\nu = 10^{10} \text{ s}^{-1}$, $m^* = 3.0m_e$ (для всех $5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $W_t = 1.29 \text{ eV}$; после отжига: $N_t = 7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $W_t = 1.72 \text{ eV}$).

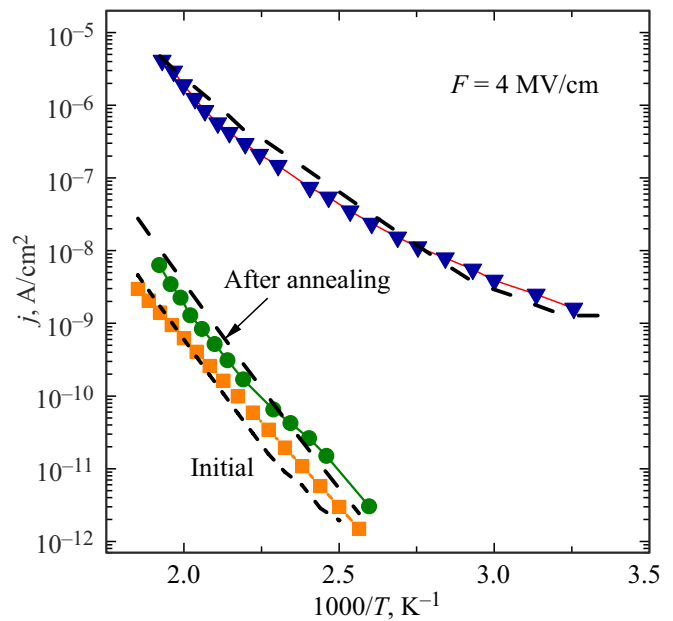


Рис. 4. Экспериментальные $J-T$ -зависимости для исходного Si_3N_4 (квадраты), облученного ионами B^+ (треугольники), и отожженного Si_3N_4 (круги). Рассчитанные $J-T$ -зависимости на основе модели MEL (пунктирные линии). Параметры расчета: исходный Si_3N_4 — $N_t = 9.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 0.6m_e$, $W_t = 1.6 \text{ eV}$; после облучения — $N_t = 9 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 6.5m_e$, $W_t = 1.30 \text{ eV}$; после отжига — $N_t = 9.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 0.6m_e$, $W_t = 1.55$.

зависимости, рассчитанные на основе модели Френкеля с учетом ТАТ (пунктирные линии). Для согласия эксперимента с расчетом необходимо использовать anomalно малое значение частотного фактора ($\sim 10^{10} \text{ s}^{-1}$) и anomalно большое значение эффективной массы электрона ($\sim 3m_0$). В оригинальной работе Френкеля [6] частотный фактор оценивался как $\sim 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Anomalно большое значение эффективной массы электрона было получено в работе [9]. Таким образом, модель Френкеля не описывает перенос заряда в исходном Si_3N_4 , облученном ионами B^+ , до и после отжига.

На рис. 4 показаны экспериментальные $J-T$ -зависимости до (квадраты) и после облучения Si_3N_4 ионами B^+ (треугольники), после отжига (круги), и $J-T$ -зависимости, рассчитанные на основе модели MEL (пунктирные линии). Модель MEL не описывает перенос заряда в Si_3N_4 , облученного ионами B^+ , т.к. в расчетах необходимо использовать anomalно высокую величину эффективной массы ($m^* = 6.5m_e$). Модель MEL удовлетворительно описывает перенос заряда в Si_3N_4 в исходном образце, а также после облучения и последующего отжига. Концентрация ловушек в исходном Si_3N_4 , после облучения и последующего отжига, полученная из моделирования, составляет $9.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Параметры модели для исходного и отожженного после облучения Si_3N_4 сопоставимы с параметрами для пиролитического Si_3N_4 [9].

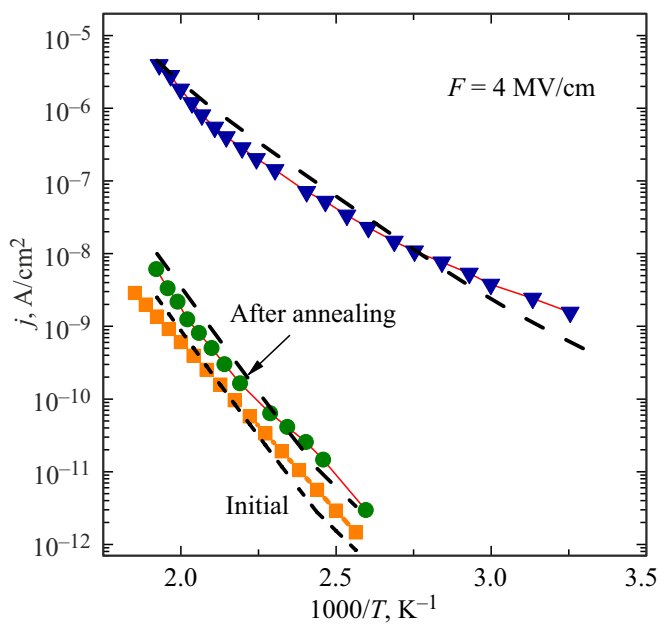


Рис. 5. Экспериментальные J – T -зависимости для исходного Si_3N_4 (квадраты), облученного ионами B^+ (треугольники) и отожженного (круги). Рассчитанные J – T -зависимости по модели NG — пунктирные линии. Параметры расчета: исходный Si_3N_4 — $N_t = 1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 1.5me$, $W_t = 1.85 \text{ eV}$; после облучения — $N_t = 5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 1.6me$, $W_t = 1.45 \text{ eV}$; после отжига — $N_t = 1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $m^* = 1.5me$, $W_t = 1.8 \text{ eV}$.

Облучение Si_3N_4 приводит к увеличению проводимости, что может указывать на увеличение концентрации ловушек. Этот вывод подтверждается численными расчетами на основе модели NG (рис. 5). Концентрация ловушек, согласно результатам расчета с использованием модели NG, после облучения Si_3N_4 ионами B^+ составляет $5.0 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

Модель NG не описывает механизм переноса заряда в исходных Si_3N_4 и после отжига облученных образцов, поскольку количественное соответствие между экспериментальными данными и данными теоретической модели было достигнуто при энергии (1.8 eV) и концентрации ($N_t = 1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$) ловушек, не характерной для Si_3N_4 . В то же время, модель NG описывает механизм переноса заряда в Si_3N_4 , облученном ионами B^+ , с разумными параметрами ловушек (рис. 5, треугольники).

Известно, что необлученный Si_3N_4 содержит высокую концентрацию ($\sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) глубоких ($\sim 1.5 \text{ eV}$) электронных и дырочных ловушек [1,9,12,13]. Как правило, в качестве ловушек в Si_3N_4 в литературе рассматриваются [14]: оборванные связи кремния, кремний-кремниевые связи. В работах [9] было показано, что проводимость в необлученном Si_3N_4 ограничена многофононным механизмом. В работе [5] было показано, что облучение Si_3N_4 ионами B^+ приводит к разрыву Si–N-связей и образованию Si–Si- и N–N-связей, т.е. образованию радиационных дефектов. Образовавшиеся радиационные дефекты увеличивают концентрацию ло-

вушек. Как показывают расчеты, увеличение концентрации ловушек приводит к тому, что ловушки ионизируются не в разрешенную зону (многофононный механизм), а на соседнюю ловушку (механизм фонон-облегченного туннелирования). В результате отжига Si–Si- и N–N-связи образуют Si–N-связи [5], т.е. отжиг приводит к уничтожению радиационных дефектов в облученном Si_3N_4 . Как показывает расчет, проводимость в исходных и отожженных (после облучения ионами B^+) образцах Si_3N_4 лучше описывается в рамках многофононного механизма ионизации ловушек.

4. Заключение

Было изучено влияние облучения ионами B^+ на перенос заряда в аморфном Si_3N_4 . Облучение ионами B^+ увеличивает проводимость примерно на три порядка. Отжиг в атмосфере азота при $700 \text{ }^\circ\text{C}$ уменьшает проводимость до исходных значений. Можно предположить, что увеличение проводимости во время облучения обусловлено радиационными дефектами. Механизм переноса заряда, до облучения Si_3N_4 и после отжига, описывается в рамках модели многофононной ионизации ловушек. Модель фонон-облегченного туннелирования между соседними ловушками описывает механизм переноса заряда в Si_3N_4 , облученном B^+ . Энергия ионизации ловушки в исходном образце Si_3N_4 и облученном-отожженном образце Si_3N_4 находится в диапазоне от 1.5 до 1.6 eV.

Финансирование работы

Работа поддержана гос. заданием Института физики полупроводников СО РАН No. FWGW-2025-0010.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.А. Гриценко. Структура и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП-структурах. Наука, М. (1993). 278 с.
- [2] G. Li, H. San, X.-Y. Chen. *J. Appl. Phys.* **105**, 12, 124503 (2009).
- [3] Y. Yu, W. Li, P. Wu, C. Jiang, X. Xiao. *Appl. Phys. Lett.* **109**, 19, 193505 (2016).
- [4] А.А. Гисматулин, В.А. Гриценко. *Scripta Materialia* **270**, 116968 (2026).
- [5] В.А. Гриценко, Ю.Н. Новиков, А.А. Гисматулин. *ФТТ* **67**, 11, 2117 (2025).
- [6] Я.И. Френкель. *ЖЭТФ* **8**, 12, 1292 (1938). [*Ya.I. Frenkel. Sov. Phys. — JETP* **8**, 12, 1292 (1938). (in Russ.)]
- [7] S.M. Sze. *J. Appl. Phys.* **38**, 7, 2951 (1967).
- [8] S.S. Makram-Ebeid, M. Lannoo. *Phys. Rev. B* **25**, 10, 6406 (1982).
- [9] Yu.N. Novikov, V.A. Gritsenko. *J. Non-Crystal. Solids* **582**, 121442 (2022).

- [10] K.A. Nasyrov, V.A. Gritsenko. J. Appl. Phys. **109**, 9, 093705 (2011).
- [11] A.A. Gismatulin, Yu.N. Novikov, N.V. Andreeva, D.S. Mazing, V.A. Gritsenko. Appl. Phys. Lett. **125**, 6, 062901 (2024).
- [12] L. Hückmann, J. Cottom, J. Meyer. Adv. Phys. Res. **3**, 2, 2300109 (2024).
- [13] C. Wilhelmer, D. Waldhör, L. Cvitkovich, D. Milardovich, M. Waltl, T. Grasser. Phys. Rev. B **110**, 4, 045201 (2024).
- [14] В.А. Гриценко, Ю.Н. Новиков, А.В. Шапошников, Ю.Н. Морокон. ФТП **35**, 9, 1041 (2001). [V.A. Gritsenko, Yu.N. Novikov, A.V. Shaposhnikov, Y.N. Morokov. Semiconductors **35**, 9, 997 (2001).]

Редактор Е.В. Толстякова