

УДК 621.315.592

Распределение по энергии атомов отдачи и формирование радиационных дефектов в пленках карбида кремния при протонном облучении

© А.М. Иванов[¶], В.В. Козловский⁺, Н.Б. Строкан, А.А. ЛебедевФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия⁺ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 7 июня 2010 г. Принята к печати 22 июня 2010 г.)

Проведено численное моделирование рассеяния протонов в пленке карбида кремния. Получены гистограммы распределения энергии, передаваемой атомам отдачи. При анализе гистограмм рассмотрены две области энергий. В первой области „малых“ энергий создаются одиночные пары Френкеля с близко расположенными компонентами. Атомы отдачи второй области обладают энергией, достаточной для возникновения каскада смещений. В результате возникают микроскопические по объему области с высокой плотностью вакансий и различного рода их комплексов.

1. Введение и постановка задачи

Ранее в работе [1] было проведено сопоставление результатов облучения электронами и протонами пленок SiC политипа 4H, полученных методом CVD (chemical vapor deposition). Отмечались как схожие результаты, так и различие в энергетическом спектре уровней возникающих радиационных центров. Последнее связывалось с различием структуры „первичных“ пар Френкеля (ПФ) при используемых энергиях бомбардирующих частиц. Так, электроны (энергия 900 кэВ) передают атомам решетки малую энергию и могут создать лишь единичные близко расположенные ПФ. Протоны (энергия 8 МэВ) способны передать до 1/3 от значения своей энергии и вызывать каскады столкновений с активным участием атомов отдачи в образовании „вторичных“ ПФ. В этом случае расстояния между компонентами ПФ могут быть значительными.

В настоящей работе для выявления количественной стороны приведенных выше соображений проведено с помощью программы TRIM [2] численное моделирование торможения протонов в пленке SiC. Очевидно, что столкновения протона с передачей малых порций энергии (E_r) будут также преобладающими. Это следствие обратно-квадратичной зависимости от E_r дифференциального сечения ($d\sigma$) в виде $d\sigma \propto dE_r/(E_r)^2$. В задаче входило выявить, какую долю составляют случаи передачи энергии, достаточной для развития каскада. С этой целью находилось распределение по энергии атомов отдачи (кремния и углерода) для двух энергий протонов — 8 и 15 МэВ. Протоны с энергией 15 МэВ привлекаются к анализу, поскольку способны полнее (по сравнению со случаем 8 МэВ) выявить роль актов рассеяния с каскадом смещений атомов решетки SiC.

2. Методика эксперимента

В ходе численного моделирования, кроме гистограммы распределения по энергии атомов отдачи, определялось количество вакансий в подрешетках кремния и углерода, а также полное число вакансий в расчете на падающий на пленку протон. Для пороговой энергии смещения атомов (E_d) были взяты сравнительно новые в литературе значения 24 и 18 эВ для кремния и углерода соответственно [3,4]. Толщина пленки принималась равной 50 мкм согласно используемым в эксперименте образцам.

Для сравнения электронного и протонного воздействий важны значения средней (E_{mean}) и максимальной (E_{max}) энергий атомов отдачи при облучении электронами с энергией E . Эти величины определялись из аналитических выражений

$$E_{\text{max}} = 2E(E + 2mc^2)/Mc^2, \quad (1)$$

$$E_{\text{mean}} = [E_d E_{\text{max}} / (E_{\text{max}} - E_d) \ln(E_{\text{max}}/E_d)], \quad (2)$$

где c — скорость света, m — масса электрона, M — масса атома.

Протоны с энергией 15 МэВ также использовались для экспериментального наблюдения дефектов. Облучение проводилось на циклотроне МГЦ-20 при комнатной температуре. Дефекты вводились равномерно по объему пленки, поскольку ее толщина была значительно меньше длины пробега протонов. Плотность тока пучка протонов составляла от 10 до 100 нА·см⁻². После облучения образцов определялись (аналогично случаю протонов с энергией 8 МэВ в работе [1]) скорость удаления носителей заряда из зоны проводимости и система уровней возникающих дефектов.

Изменения проводимости пленок определялись по вольт-фарадным характеристикам при температуре

[¶] E-mail: alexandr.ivanov@mail.ioffe.ru

$T = 300 \text{ К}$ (на частоте 1 кГц). Энергетические состояния образующихся дефектов контролировались методикой нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS).

3. Результаты и их обсуждение

Полученные данные для системы возникающих центров $E1-E4$ представлены в табл. 1, содержащей энергетическое положение уровней дефектов (E_T) и сечение захвата электронов (σ_n).

Отметим, что параметры системы уровней практически совпадают с результатами работы [1], полученными при облучении протонами с энергией 8 МэВ . Подчеркнем также, что система центров в табл. 1 не содержит центров, приведенных в [5] для случая облучения электронами.

Сравнительные данные по проявлению дефектов в компенсации проводимости для трех использованных видов радиации с привлечением результатов [1] представлены в табл. 2.

Активность в удалении носителей из зоны проводимости η_e весьма показательна для характеристики радиационных дефектов (РД). Данные табл. 2 по η_e становятся более наглядными при нормировании их на отношение

Таблица 1. Характеристики уровней $E1-E4$, определяемых техникой DLTS, после облучения протонами с энергией 15 МэВ

Параметр	$E1$	$E2$	$E3$	$E4$
$E_T, \text{эВ}$	0.39	0.62	0.72	1.08
$\sigma_n, \text{см}^2$	$9 \cdot 10^{-16}$	$1.7 \cdot 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-15}$	$5.6 \cdot 10^{-13}$

Таблица 2. Скорость генерации первичных радиационных дефектов ПФ η_{FP} (расчет) и скорость удаления носителей заряда из зоны проводимости η_e (эксперимент) в карбиде кремния при облучении протонами и быстрыми электронами

Облучение	$\eta_{FP}, \text{см}^{-1}$	$\eta_e, \text{см}^{-1}$
Электроны, 900 кэВ	3.0	0.1
Протоны, 8 МэВ	540	110
Протоны, 15 МэВ	290	45

Таблица 3. Количество вакансий, созданных в первичных и вторичных столкновениях, в расчете на один протон

Энергия протона, МэВ	Подрешетка	Вакансии, созданные протоном	Вакансии, созданные атомами отдачи	Сумма вакансий в подрешетке	Общее число вакансий
8	Si	0.69	1.10	1.79	2.69
	C	0.18	0.72	0.90	
15	Si	0.37	0.61	0.98	1.46
	C	0.09	0.39	0.48	

скоростей введения ПФ (вакансий) протонами и электронами. Так, для РД от протона с энергией 8 МэВ имеем $110/(540/3) = 0.61 \text{ см}^{-1}$. В целом нормированные скорости удаления носителей заряда составляют ряд $0.1, 0.61, 0.46 \text{ см}^{-1}$ по мере роста энергии указанных в таблице излучений. Здесь показателен разрыв (до 6 раз) величин указанных скоростей для случаев электронного и протонного облучений. При этом нормированные скорости для РД, образованных протонами с энергиями 8 и 15 МэВ , различаются не более чем на 30%. Последнее согласуется с отмеченным выше подобием спектров DLTS. Отмеченное отношение нормированных скоростей удаления носителей наблюдается и в случае кремния. Аналогичная изложенной нормировка данных работы [1] дает превышение скорости в 5.04 и 5.034 раза для РД, создаваемых протонами с энергиями 8 и 15 МэВ , по сравнению с облучением электронами. Полученная величина ~ 5.0 близка к среднему значению для карбида кремния $(6.1 + 4.6)/2 = 5.35$.

Что касается непосредственно генерации вакансий протонами, то сравнительные данные для двух использованных энергий приведены в табл. 3. В третьей колонке приведен результат столкновений протонов с атомами Si и C, а следующая отражает количество вакансий, созданных в подрешетках Si и C атомами отдачи. При этом, например, атомы Si могут выбиваться из узлов атомами отдачи любой природы (в равной степени Si и C). В таблице также дается суммарное число вакансий в подрешетках. Общее число составило 2.69 и 1.46 для протонов с энергиями 8 и 15 МэВ соответственно. Отметим, что анализ проводился при статистике 20 тысяч упавших на пленку протонов.

Данные табл. 3 несут в достаточной мере усредненный характер и не позволяют установить заметного различия в образовании вакансий протонами при отношении их энергий в $15/8 = 1.875$ раза. В согласии с законом Резерфордского рассеяния в это число раз должно упасть сечение столкновений σ . Моделирование дает для снижения числа вакансий близкую величину: $2.69/1.46 = 1.84$. Другая характеристика закона — зависимость $\sigma \propto Z^2$ — просматривается в количестве рассеяний протонов на атомах Si и C (см. третью колонку таблицы).

Основное различие в воздействии сравниваемых излучений на пленки SiC следует искать в величине энергии, передаваемой в актах рассеяния. С этой целью были построены гистограммы распределения энергий, получа-

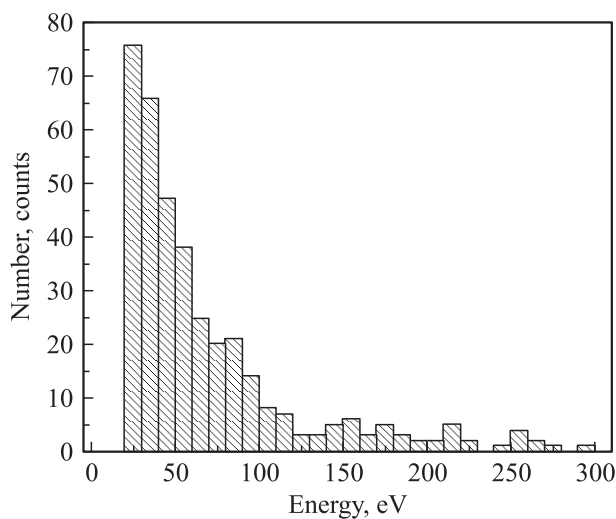
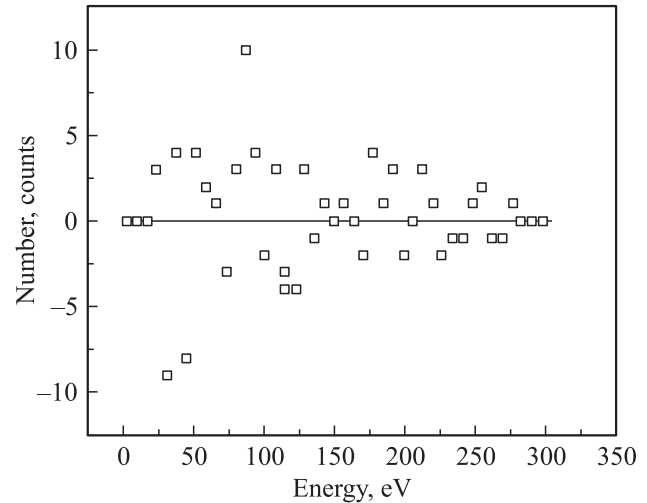
Таблица 4. Суммарная энергия, переданная протонами атомам кремния в пленке карбида кремния в первичных столкновениях (разделены случаи передачи менее и более 130 эВ)

Энергия протона, МэВ	Энергия, кэВ/число актов	Энергия, кэВ/число актов	Средняя энергия, кэВ
	передача \leq 130 эВ	передача $>$ 130 эВ	передача $>$ 130 эВ
8	15.97/320	67.24/80	0.84
15	16.59/325	75.15/75	1.0

емых атомами отдачи при столкновениях с протонами. Гистограммы для протонов с энергиями 8 и 15 МэВ оказались подобными. Основное число случаев сосредоточено в области малых порций энергии, и спадание в сторону больших энергий близко к закону для дифференциального сечения $d\sigma \propto dE_r/(E_r)^2$.

На рис. 1 приведен спектр энергий атомов отдачи Si после рассеяния на них протонов с энергией 15 МэВ. Зафиксированы столкновения, приведшие к возникновению вакансий, т.е. акты передачи малых энергий (сравнительно с порогом смещения атома) не учитываются. Суммарное число столкновений составило 400, что, на наш взгляд, достаточно для выявления общей конфигурации спектра.

Верхняя граница спектра на рис. 1 ограничена значением 300 эВ, чтобы выделить область энергий, характеризующих взаимодействие пленок с электронами. Так, согласно формулам (1), (2), находим: $E_{\text{mean}} = 50$ и 54 эВ, $E_{\text{max}} = 130$ и 306 эВ для атомов Si и C соответственно. Поясним, что наблюдавшиеся в ходе моделирования акты с передачей энергии большими порциями (до десятков кэВ) в поле рис. 1 не попадают и обсуждаются далее.

**Рис. 1.** Низкоэнергетическая часть гистограммы распределения энергий атомов отдачи кремния при облучении SiC протонами с энергией 15 МэВ, полученная из расчетов по программе TRIM.**Рис. 2.** Разность низкоэнергетических (< 300 эВ) частей распределения энергий атомов отдачи кремния для облучения протонами с энергиями 15 и 8 МэВ.

Как отмечалось выше, спектр энергии атомов отдачи Si для случая протонов с энергией 8 МэВ выглядел подобным образом. На рис. 2 приведена разность гистограмм для протонов с энергиями 15 и 8 МэВ, подтверждающая их сходство. Отличие наблюдается только в области энергий, превышающих поле гистограммы.

Для сравнения с рассеянием электронов с энергией 900 кэВ были рассчитаны энергии атомов отдачи Si до значения 130 эВ и выше указанной величины (см. табл. 4). В знаменателе указано число актов для интервала энергий. Можно отметить, что для протонов с энергиями 8 и 15 МэВ различие составляет 16% для средней энергии атома отдачи Si (область выше 130 эВ). Эта величина оказывается недостаточной для изменения энергетического положения радиационных центров: как отмечалось, спектры DLTS после облучения протонами с энергиями 8 и 15 МэВ оказались подобными.

Более определенные выводы табл. 4 позволяют сделать в плане поставленной задачи — сравнения характера актов рассеяния на атомах Si электронов и протонов. Проведем упрощение и всем столкновениям с передачей более 130 эВ припишем, согласно табл. 4, энергии 840 эВ и 1.0 кэВ. Для конкретности выделим атомы Si с энергией 1.0 кэВ, которые создают 13.32 вакансии. Это означает, что на вакансию расходуется ~ 75 эВ и суммарная

энергия атомов отдачи 75.150 кэВ обусловит появление ~ 1000 вакансий. В отличие от 320–325 вакансий, созданных в актах „мягких“ столкновений, подобных рассеянию электронов, эти вакансии уже не являются компонентами одиночных пар Френкеля.

Они сосредоточены в микроскопически малом объеме, который охватывает порождающий их атом отдачи Si с энергией 1 кэВ. В качестве грубой оценки объем можно определить как R^3 , где $R = 24 \text{ \AA}$ — пробег таких атомов. Плотность вакансий (или пар Френкеля) в этом случае по порядку величины близка к 10^{21} см^{-3} . Появление таких областей есть принципиальное различие в воздействии протонов и электронов как в карбиде кремния, так и в кремнии. В областях с высокой плотностью вакансий возрастает вероятность образования комплексов с участием нескольких вакансий. Наиболее вероятным результатом являются дивакансии и их комплексы с примесными атомами.

4. Заключение

Численное моделирование, кроме получения набора количественных данных, привлекательно возможностью корректного учета геометрии образца. В эксперименте мы располагали пленками толщиной 50 мкм, что много меньше пробега использованных протонов. Поэтому следует подчеркнуть, что полученные численные данные (в том числе по нарушениям в подрешетках Si и C) характеризуют случай „тонкой“ мишени, когда энергия налетающей частицы и характер рассеяния незначительно меняются на толщине образца.

Нам представляется, что проведенное моделирование позволяет объяснить как различие спектров уровней РД при облучении *n*-SiC электронами и протонами, так и их схожесть для протонов с энергиями 8 и 15 МэВ.

При обработке гистограмм распределения передаваемой атомам отдачи энергии оказалось достаточно одного шага — разделения случаев передачи до 130 эВ и более этой величины.

Выяснилось, что из 400 рассеяний протона с энергией 15 МэВ на атомах Si с рождением в пленке вакансий только 325 оказываются в плане передаваемой энергии близкими к рассеянию электронов. В остальных актах передается суммарная энергия, достаточная для возникновения 1000 вакансий. Последние сосредоточены в структурно разрушенных микрообластях, хаотично разбросанных по объему пленки. Эти области в плане возникающих в пленке дефектов структуры являются источниками дивакансий и более сложных их комплексов с атомами примесей, присутствующих в пленке.

Работа выполнена при поддержке гранта президента РФ — Ведущие научные школы НШ-3306.2010.2.

Список литературы

- [1] В.В. Емцев, А.М. Иванов, В.В. Козловский, А.А. Лебедев, Г.А. Оганесян, Н.Б. Строкан. ФТП, **44** (5), 706 (2010).
- [2] *Ion Implantation. Science and Technology*, ed. by J.F. Ziegler (Academic Press. Inc., 1984).
- [3] J.W. Steeds, F. Carosella, G.A. Evans, M.M. Ismail, L.R. Danks, W. Voegeli. Mater. Sci. Forum, **353–356**, 381 (2001).
- [4] J.W. Steeds, G.A. Evans, S. Furkert, M.M. Ismail, L.R. Danks, W. Voegeli, F. Carosella. Diamond Relat. Mater., **11**, 1932 (2002).
- [5] В.В. Козловский, В.В. Емцев, К.В. Емцев, Н.Б. Строкан, А.М. Иванов, В.Н. Ломасов, Г.А. Оганесян, А.А. Лебедев. ФТП, **42** (2), 243 (2008).

Редактор Л.В. Шаронова

Distribution on energy of the recoil atoms and formation of radiation defects in silicon carbide films at proton irradiation

A.M. Ivanov, V.V. Kozlovski⁺, N.B. Strokan, A.A. Lebedev

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia
+ St. Petersburg State Polytechnical University,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract Numerical modelling of the proton scattering in a silicon carbide film is realized. Histograms for the energies, transferred to recoil atoms are received. At the analysis of histograms two interval of the energy are considered. In the first — „small“ energy — Frenkel’s individual pairs with close located components are created. Recoil atoms of the second area possess energy, sufficient for occurrence of the cascade of displacements. As a result, there are microscopic-size areas with high density of vacancies and their complexes of various types.