НА ПРАВАХ РУКОПИСИ

And

АЗАРОВ Александр Юрьевич

НАКОПЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ В ОБЛУЧАЕМОМ ИОНАМИ КРЕМНИИ ПРИ ПОНИЖЕННОЙ ПЛОТНОСТИ КАСКАДОВ СМЕЩЕНИЙ

специальности: 01.04.10 – физика полупроводников и 01.04.04 – физическая электроника

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2004 Работа выполнена на кафедре физической электроники ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук,
	профессор Титов А.И.
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук,
	доцент Александров О.В. (СПбГЭТУ)
	доктор физико-математических наук,
	профессор Козловский В.В. (СПбГПУ)
Ведущая организация:	Нижегородский Государственный университет
	им. Н.И. Лобачевского

Защита состоится 23 декабря 2004 г. в 16-00 часов на заседании диссертационного Совета Д 212.229.01 в ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, II уч. корпус, ауд. 470.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан ноября 2004 г.

ученый секретарь диссертационного совета Д 212.229.01 доктор физико-математических наук, профессор

Водоватов И.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследований

В последние несколько десятилетий ионная имплантация является одним из основных технологических процессов при производстве полупроводниковых приборов. Следует ожидать, что в и обозримом будущем использование ионной имплантации будет расширяться.

Ионная имплантация позволяет модифицировать свойства полупроводникового материала, контролируя глубину залегания, профиль распределения и концентрацию легирующей примеси. Известно, что ионная бомбардировка всегда приводит к образованию радиационных повреждений, влияющих практически на все свойства полупроводникового материала. Этот факт, в большинстве практических приложений ионной имплантации являющийся существенным недостатком, открывает возможность модифицировать свойства твердого тела посредством контролируемого введения радиационных дефектов.

На сегодняшний день кремний является основным материалом в полупроводниковой промышленности. Несмотря на то, что процессы дефектообразования в Si интенсивно изучаются в течение многих лет, до сих пор нет полного понимания процессов, происходящих в кремниевой матрице под воздействием ионного облучения. Необходимо отметить, что наиболее детально изучены процессы, происходящие в Si под воздействием ионов средних энергий (десятки-сотни кэВ), т.е. в энергетическом диапазоне, до недавнего времени наиболее востребованном в полупроводниковой технологии. Это, в первую очередь, относится к случаям внедрения тяжелых ионов, когда каскады смещений, создаваемые бомбардирующими ионами являются достаточно плотными и процессы вторичного дефектообразования не играют существенной роли. Механизмы формирования устойчивых нарушений при имплантации легких ионов в этом диапазоне энергий разработаны существенно менее детально и целый ряд эффектов еще требует адекватной интерпретации. Это же можно сказать и о процессах, происходящих в Si при имплантации легких ионов низких энергий (до 10 кэВ), а также ионов высоких энергий (~ 1 МэВ), когда плотность каскадов смещений не очень велика и вторичное дефектообразование играет большую роль в формировании устойчивых нарушений. Однако, в последнее время наблюдается стабильный рост интереса к ионной имплантации в этих энергетических диапазонах.

Подобный интерес связан с тем обстоятельством, что имплантация ионами столь низких энергий позволяет получать устройства, в которых толщина легированного слоя не превышает двух-трех десятков нанометров. Потребность в таких устройствах назревает в связи с уменьшением геометрических размеров элементов современной микроэлектроники и переходу к нанометровым технологиям. В то время как имплантация ионами высоких энергий позволяет не только получать сверхглубокие *p-n* переходы, но и изменять свойства полупроводниковой матрицы на значительную глубину контролируемым введением радиационных дефектов. В полупроводниковой технологии для создания определенных структур или получения определенных свойств материала зачастую целесообразно использование молекулярных ионов. Имплантация молекулярными ионами и кластерами является одним из способов увеличения интенсивности ионного пучка, а также снижения энергии имплантируемых атомов. Кроме того, имплантация такими ионами позволяет путем подбора химического состава молекулы совмещать получение слоев заданного типа проводимости с процессами пассивирования и геттерирования дефектов. Хорошо известно, что эффективность ряда явлений в расчете на один упавший атом может отличаться при облучении в эквивалентных условиях атомарными и молекулярными ионами. Этот эффект получил название молекулярного эффекта (МЭ). Далее мы будем рассматривать только МЭ при накоплении радиационных повреждений. Хотя процессы, сопровождающие имплантацию молекулярных ионов в полупроводники, исследуются, по крайней мере, более трех десятилетий, более-менее реалистичные теории дефектообразования существуют только для бомбардировки молекулярными ионами тяжелых элементов низких энергий.

Цель настоящей работы направлена на изучение и объяснение закономерностей накопления нарушений устойчивых при низких и комнатных температурах при радиационном повреждении Si в условиях, когда генерируемые внедряемыми ионами каскады атомных смещений имеют пониженную плотность. Если рассматривать цель более подробно, то она распадается на ряд конкретных задач, а именно:

- развитие физической модели накопления структурных нарушений в Si в окрестности межфазной границы c-Si / SiO₂, в частности, при облучении его медленными лёгкими ионами, а также рассмотрение возможности приложения этой модели к другим полупроводникам;
- исследование накопления разупорядочения при имплантации в Si быстрых тяжелых атомарных и молекулярных ионов при температуре жидкого азота;
- исследование молекулярного эффекта в Si на легких ионах при комнатной температуре, выявление роли плотности потока ионов;

Научная новизна диссертационной работы

1.1 Предложена физическая модель накопления структурных нарушений в Si при облучении его медленными лёгкими ионами при комнатной температуре. Данная модель базируется на представлении о миграции генерируемых ионами мобильных точечных дефектов к поверхности и последующих процессах их сегрегации на межфазной границе, а также учитывает то, что переход из кристаллического в аморфное состояние происходит спонтанно при достижении критического уровня дефектов.

1.2 Создана математическая модель этого процесса. Компьютерное моделирование дало хорошее соответствие расчётов экспериментальным данным, полученными различными исследовательскими группами.

1.3 Приложение этой модели к случаю бомбардировки GaAs подобными ионами пока-

зало, что она может быть применена и для других типов полупроводниковых материалов.

2.1 Получены данные о радиационном повреждении Si при имплантации в него атомарных и молекулярных ионов висмута с энергией 0.5 МэВ/атом при температуре жидкого азота. Результаты показывают, что при данных условиях облучения распределение устойчивых нарушений по глубине в Si имеет ярко выраженный бимодальный характер.

2.2 Показано, что в данных условиях облучения повреждение в Si, происходящее в объеме, может быть описано в рамках модели перекрытия частично разупорядоченных областей. Установлено, что данная модель должна быть модифицирована по сравнению с более ранними ее приложениями введением критического уровня дефектов, при достижении которого происходит спонтанный переход из кристаллического в аморфное состояние.

2.3 Объяснена и промоделирована кинетика повреждения в поверхностном максимуме дефектов на распределениях структурных нарушений по глубине на основе разработанной модели для кинетики роста поверхностного аморфного слоя при облучении Si медленными легкими ионами.

2.4 Обнаружен молекулярный эффект в образовании устойчивых дефектов и предложено физическое объяснение его природы.

3.1 Двумя независимыми экспериментальными методами обнаружена зависимость эффективности молекулярного эффекта от плотности потока ионов при внедрении в кремний лёгких ионов.

3.2 Показано, что традиционный механизм, привлекаемый для объяснения молекулярного эффекта на легких ионах и основанный на концепции нелинейных энергетических пиков, возникающих при перекрытии отдельных субкаскадов, в действительности, в случае облучения Si легкими ионами не дает существенного вклада.

3.3 Предложен новый физический механизм молекулярного эффекта, основанный на нелинейности процессов вторичного дефектообразования в кремнии, и на его базе проведено численное моделирование экспериментальных данных. Результаты расчетов показали, что данный механизм может играть определяющую роль в процессах накопления устойчивых нарушений при облучении Si легкими молекулярными ионами.

Практическая значимость работы

В работе предложены и разработаны физические модели, которые позволяют предсказывать результаты использования ионных пучков для модификации и анализа свойств подложек из кремния, а так же и ряда других полупроводниковых материалов. К основным из таких моделей можно отнести:

- модель роста поверхностного аморфного слоя при имплантации медленных легких ионов в кремний, базирующаяся на миграции генерируемых ионами мобильных точечных дефектов к поверхности и последующих процессах их сегрегации на межфазной границе;

- модифицированная модель накопления структурных нарушений, основанная на перекрытии частично разупорядоченных областей, когда при достижении критического уровня дефектов происходит спонтанный переход из кристаллического в аморфное состояние, примененная для описания радиационного накопления при низкотемпературном облучении кремния быстрыми тяжелыми ионами;

- Предложена оригинальная методика для расчета толщины тонкого поверхностного аморфного слоя по спектрам распределения дефектов по глубине, полученными методом резерфордовской спектроскопии.

Положения, выносимые на защиту:

1. Накопление устойчивых нарушений в кремнии при имплантации медленных легких ионов, а также в поверхностном пике на распределении дефектов при внедрении быстрых ионов, может быть описано в рамках модели, основанной на диффузии генерируемых ионами мобильных точечных дефектов к поверхности и последующих процессах их сегрегации на межфазной границе аморфный слой / кристалл.

2. Повреждение в объеме кремния при низкотемпературной имплантации быстрых тяжелых ионов может быть описано в рамках модифицированной модели перекрытия частично разупорядоченных областей, когда при достижении критического уровня дефектов происходит спонтанный переход из кристаллического в аморфное состояние.

3. При низкотемпературном облучении кремния быстрыми тяжелыми ионами, в эквивалентных условиях молекулярные ионы производят в приповерхностной области больше устойчивых дефектов в расчете на одну упавшую частицу, чем атомарные ионы, т.е. имеет место молекулярный эффект.

4. Эффективность молекулярного эффекта зависит от плотности потока ионов в случае имплантации легких ионов в кремний при комнатной температуре.

5. Традиционный механизм, привлекаемый для объяснения молекулярного эффекта на легких ионах и основанный на концепции нелинейных энергетических пиков, возникающих при перекрытии отдельных субкаскадов, не дает существенного вклада в случае облучения Si легкими ионами. Молекулярный эффект в этом случае может быть объяснен в рамках нового физического механизма, основанного на нелинейности процессов вторичного дефектообразования в кремнии.

Публикации и апробация работы

Содержание диссертации раскрыто в 19 работах, опубликованных по теме диссертации, 3 из которых опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах. Список работ приведен в конце автореферата.

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на 2 Всероссийских семинарах, а также 10 Международных конференциях и симпозиумах:

XV International conference "Ion Beam Analysis" (Cairns, Australia 2001); VI и VII Всероссийские семинары "Физические и физико-химические основы ионной имплантации" (Нижний Новгород 2002, 2004); 20th and 21th International Conferences on Atomic Collisions in Solids (Toshali Sands, Puri, India 2003, Genova, Italy 2004); XXXI, XXXII и XXXIV Международные конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 2001, 2002, 2004), XV и XVI Международные конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью" (Звенигород 2001, 2003), 8th Japan-Russia International Symposium on Interaction of Fast Charged Particles with Solids (2002), 10th International Conference "Desorption" (Saint Petersburg 2004).

Личный вклад автора.

Основные результаты работы получены автором лично. Экспериментальные данные получены как лично самим автором, так и его коллегами. Теоретические исследования и разработка физических моделей выполнены совместно с научным руководителем. Построение алгоритмов и программ, а также проведение вычислений выполнено автором самостоятельно.

Структура и объем диссертационной работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений. Диссертация содержит 101 страницу, в том числе 37 рисунков. Список литературы включает 127 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, перечислены полученные в диссертации новые результаты, их практическая значимость и представлены положении, выносимые на защиту. Содержатся сведения об апробации работы.

В первой главе дается краткий обзор литературных данных по современному состоянию затронутых в диссертации проблем. В частности, рассмотрены общие представления о взаимодействии ускоренных ионов с веществом, влияние вида и условий облучения на процессы накопления дефектов в Si, а также состояние современных представлений о молекулярном эффекте (МЭ) в полупроводниках. Кроме того, рассмотрены основы экспериментальных методов анализа уровня повреждения кристаллической решетки, использованных в данной работе, а именно, метода спектроскопии резерфордовского обратного рассеяния (RBS), а также метода анизотропии неупругого обратного рассеяния электронов (АНОРЭ).

При облучении кремния легкими ионами налетающий ион генерирует в основном отдельные точечные дефекты. Хорошо известно, что при облучении такими ионами, распределение по глубине стабильных дефектов является бимодальным т.е. наряду с объемным максимумом дефектов (ОМД), присутствует и поверхностный максимум дефектов (ПМД). Кинетика накопления устойчивых дефектов различна для ОМД и ПМД, в ОМД дозовые зависимости концентрации дефектов имеют характерный *S*-образный вид. Известно, что в случае облучения кремния легкими ионами плотность потока ионов значительно влияет на скорость введения устойчивых дефектов. При облучении тяжелыми ионами образуются разупорядоченные области (РО), содержащие большое количество дефектов. Однако изменение параметров и условий облучения очень сильно влияет на характер генерации и, следовательно, накопления дефектов. В случае облучении Si тяжелыми ионами достаточно хорошо изучены и поняты процессы накопления дефектов при средних энергиях внедряющихся ионов, в отличие от случая облучения такими ионами высоких энергий.

Сведения о структурных изменениях при бомбардировке легкими ионами с низкими энергиями (≤ 10 кэВ) весьма ограничены. В настоящее время имеются экспериментальные данные, о том, что накопление дефектности при облучении полупроводников медленными легкими ионами протекает как постепенное расширение аморфного слоя (AC), начинающееся от границы между естественным слоем окисла и собственно полупроводником. Однако на сегодняшний день нет единого понимания механизмов приводящих к накоплению разупорядочения при бомбардировке полупроводников ионами столь низких энергии, равно, как и целостной общепринятой теории, позволяющей описывать процессы такого накопления.

Если n_{dk} – число (концентрация) стабильных дефектов, создаваемых молекулярным ионом X_k^+ , состоящим из k атомов типа X, а n_d – аналогичная величина для одноатомных ионов X^+ , то величина МЭ может быть выражена следующим соотношением:

$$g = \frac{n_{d\,k}}{k \cdot n_d} \tag{1}$$

Природа МЭ традиционно описывается в рамках модели нелинейных энергетических пиков. Считается, что при достижении порогового значения концентрации смещенных атомов в пике смещений или средней энергии, приходящейся на атом каскада в термическом пике, процессы в них становятся нелинейными, что и приводит к МЭ. Такие представления удовлетворительно объясняют МЭ для тяжелых ионов невысоких энергий. При изучении МЭ на легких ионах ситуация становится сложнее как в постановке эксперимента, так и в интерпретации его результатов. Привлечение концепции энергетических пиков, по крайней мере, в ее общеупотребительной форме для объяснения МЭ на легких ионах, становится некорректным. Литературных данных по МЭ на легких ионах не много и в целом данные, полученные разными исследовательскими группами, весьма противоречивы, что, в частности, связано с некорректностью проведения экспериментов. Предполагают, что, хотя для ионов малой массы средние индивидуальные каскады в целом не являются нелинейными, условия нелинейности могут выполняться для отдельных субкаскадов, на которые разбивается каждый индивидуальный. Таким образом, на сегодняшний день, вопросы о том, какова величина МЭ для легких ионов, а главное, каков его механизм остаются открытыми.

Вторая глава посвящена разработке модели, способной как качественно, так и количественно описывать накопление разупорядочения в кремнии и арсениде галлия при имплантации легких ионов низких энергий.

Экспериментальные результаты, используемые в данном исследовании, были получены В.С. Беляковым и А.И. Титовым и описаны в [1]. В этих экспериментах образцы (100) Si

(КДБ 15), облучались при комнатной температуре (T_k) ионами Ne⁺ с энергией 10 кэВ при плотности ионного потока $F = 6.2 \cdot 10^{11}$ см⁻² с⁻¹ или $F = 6.2 \cdot 10^{12}$ см⁻² с⁻¹. Анализ толщины поверхностных АС осуществлялся методом АНОРЭ.

На рис. 1 показана зависимость толщины AC h от дозы облучения Φ для двух плотностей ионного тока. Легко заметить, что, во-первых, нарастание AC не зависит в выбранных пределах изменения величины от F, а во-вторых, существует пороговая доза Φ_{th} для начала эффективного роста AC.

Разработанная модель исходила из предположения, что рост AC на границе SiO₂ / *c*-Si является результатом диффузии мобильных точечных дефектов. Для упрощения расчетов



Рис. 1 Зависимость толщины AC на поверхности образца (100) Si от дозы облучения при T_k ионами Ne⁺ с энергией 10 кэВ. Символы – экспериментальные результаты. Сплошная и пунктирная линия – расчет по простой модели и модели с насыщаемыми стоками; соответственно.

предполагалось, что для точечных дефектов выполняется условие квазистационарности, кроме того, в качестве таких дефектов рассматривались только вакансии. Функция генерации вакансий g(x), где x – глубина, была рассчитана с помощью стандартной программы TRIM 95 [8] и аппроксимирована гауссианой. Учитывая рекомбинацию мобильных дефектов на ненасыщаемых стоках со средним временем жизни τ , можно записать уравнение:

$$D\frac{d^{2}n}{dx^{2}} - \frac{n}{t} + g(x)F = 0, \qquad (2)$$

с граничными условими n = 0 при $x \to \infty$ и x = h, где D -коэффициент диффузии мобильных точечных дефектов, а h = h(t) -координата внутренней границы АС.

Наконец, считалось, что для перехода в аморфную фазу кристалла единичного объема требуется накопление в нем относительной концентрации дефектов n_c , при достижении которой структура спонтанно переходит из кристаллического состояния в аморфное. Тогда $dh/d\Phi$, может быть записана как:

$$\frac{dh}{d\Phi} = \frac{D}{n_0 n_c F} \frac{dn}{dx} \bigg|_{x=h},$$
(3)

где n_0 – концентрация атомов в мишени, а $\Phi = Ft$ – доза облучения.

Можно показать, что в данной модели диффузионная длина рассматриваемых точечных дефектов $L_d = (D \tau)^{1/2}$ является единственным подгоночным параметром.

Пороговая доза Φ_{th} на первом этапе бралась из экспериментальных результатов. В этом случае к дозе, которая использовалась при расчете $h(\Phi)$, надо добавить пороговую дозу Φ_{th} .

Результаты модельных расчетов при $L_d = 20$ нм представлены на рис. 1 сплошной линией.

На следующем этапе мы считали, что наличие Φ_{th} связано с насыщаемыми стоками, присутствующими в образце до облучения, роль которых играют ростовые дефекты. А, дозу, при которой достигается насыщение таких стоков, мы рассматривали в качестве Φ_{th} .

Результаты численных расчетов по разработанной модели, учитывающей наличие насыщаемых стоков в образце, представлены на рис. 1 пунктирной линией, хорошо видно, что теоретические кривые удовлетворительно описывают ход экспериментальных зависимостей.

Аналогичные расчеты были проведены для описания результатов, полученных другими авторами [3,4] для случаев облучения Si, а также случаев облучения GaAs [1] медленными ионами. Как и в рассмотренном случае, результаты модельных расчетов показали хорошее согласие с экспериментальными результатами при разных значениях подгоночных параметров.

Третья глава посвящена изучению МЭ на легких ионах в Si при T_k и выяснению влияния плотности потока ионов (*F*) на его эффективность.

Облучение образцов, а также измерения методом RBS в сочетании с каналированием (RBS/C) осуществлялось автором в ГУП НПП "Электрон-Оптроник", на ускорителе ионов фирмы "High Voltage Engineering Europe", позволяющего ускорять положительно заряженные ионы в энергетическом диапазоне от 10 до 500 кэВ. Следует отметить, что оборудование для резерфордовской спектроскопии в ГУП НПП "Электрон-Оптроник", начиная с начала 90-х годов до настоящего времени никак не использовалось. Автором, в сотрудничестве с коллегами с кафедры физической электроники СПбГПУ, была проделана работа по ремонту и налаживанию методики RBS на базе имеющегося оборудования. Исходя из этого, в диссертации довольно подробно описывается установка для ионной имплантации и RBS, а также калибровка масштаба по глубине, учитывающая нелинейный характер электронных потерь при используемых в эксперименте энергиях анализирующего пучка. Измерения методом АНОРЭ, проводились на кафедре физической электроники СПбГПУ.

В рассматриваемых экспериментах образцы (111) Si (КДБ 1), подвергались облучению при T_k ионами N₁⁺ и N₂⁺ с энергией 40 кэВ/атом. Для соблюдения эквивалентности облучения плотности потока ионов N₁⁺ и N₂⁺ в каждом эксперименте была одинаковой в единицах ат. см⁻² с⁻¹ и выбиралась в пределах $F = 2.8 \ 10^{11} - 6.2 \ 10^{12}$ ат. см⁻² с⁻¹. Для подавления как осевого, так и плоскостного каналирования облучение осуществлялось в направлении, составляющем 11.5° с (111) в плоскости {128}.

На рис. 2, в качестве примера, представлены RBS/C спектры для самой низкой из используемых в эксперименте *F*. Хорошо видно, что спектры имеют бимодальный характер, что характерно для дефектообразования в Si под воздействием облучения при T_k для легких ионов. Кроме того, легко заметить, что в области между ПМД и ОМД ионы N_2^+ создают большее количество дефектов в расчете на одну атомную частицу, чем ионы N_1^+ , т.е. наблюдается МЭ в накоплении устойчивых нарушений с $\gamma > 1$. На рис. 3 представлены зависимости величины МЭ γ от глубины *x* для различных *F*. Видно, что для всех, кроме максимального, значений *F* величина МЭ максимальна вблизи поверхности и уменьшается с глубиной. Кроме того, с ростом *F* наблюдается уменьшение γ , и для наивысшей *F* величина МЭ в рамках статистического разброса равна 1.



Рис. 2 RBS/C спектры образцов Si, облученных при T_k ионами N₁⁺ и N₂⁺ с энергией 40 кэВ/атом и $F = 2.8 \cdot 10^{11}$ ат./(см² с) и двух различных доз Ф. Уровень для аморфного образца соответствует ≈ 1380 счетов.

Рис. З Зависимость величины МЭ от глубины для различных F для случая облучения Si при T_k ионами N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом.

Зависимость $\gamma(F)$, а также стремление $\gamma \kappa \approx 1$ при увеличении *F*, свидетельствует о том, что традиционные механизмы, привлекаемые для объяснения МЭ в действительности, в случаи облучения Si легкими ионами не дают существенный вклад в МЭ, так как они не зависят от *F*.

Нами предлагается новый механизм, основанный не на нелинейности процессов при термализации энергетических пиков, а на нелинейности процессов вторичного дефектообразования.

Для подтверждения того, что подобный подход действительно будет приводить к падающей с ростом F зависимости $\gamma(F)$, было проведено компьютерное моделирование этого процесса. Для этого мы полагали, что образующийся в результате развития каскадов атомных столкновений кластер первичных дефектов является вакансионным, а из всех возможных реакций с участием вакансий рассматривали только диффузию вакансий с коэффициентом D, рекомбинацию вакансий на ненасыщыемых стоках, характеризуемое временем жизни τ , а также образование устойчивых дивакансионных комплексов с концентрацией $n_{2\nu}$, характеризуемое кинетической константой α . Последние и полагались устойчивыми дефектоми, регистрируемыми экспериментально. Процесс моделирования можно описать следующим образом. На области Γ , на которой производится моделирование, последовательно с шагом по времени, соответствующим рассматриваемой F случайно с равномерной плотностью ве-



Рис. 4 Экспериментальные и расчетные зависимости $\gamma(F)$ в Si на глубине 30 нм

время т после начала облучения. Таким образом, полное повреждение, создаваемое k атомарными $A^{(a)}$ или молекулярными $A^{(m)}$ ионами за конечное время t_{end} , равно:

$$A^{a(m)}(k) = \iint_{\Gamma} n_{2\nu}(t_{end}) dx dy$$
⁽⁵⁾

а величина МЭ в данном случае определяется как:

$$g = \frac{A^m(k)}{A^a(2k)} \tag{6}$$

На рис. 4 представлены экспериментальные результаты, полученные методами RBS/C и AHOPЭ, зависимости $\gamma(F)$ в Si на глубине 30 нм. Результат моделирования по представленной выше методике показан на рис. 4 линиями: сплошной – в предположении о полном перекрытии, а пунктирной – в предположении частичном перекрытии каскадов атомных смещений, создаваемых компонентами молекулярного иона. Видно, что качественно предложенная модель дает уменьшение γ с ростом F, т.е. она действительно предсказывает не только появление МЭ для легких ионов, но и поведение зависимости $\gamma(F)$. Количественные различия между экспериментальными данными и нашей оценкой не должны вызывать удивление, поскольку нами рассматривалась двумерная модель, которая является существенным упрощением по сравнению с 3-х мерным явлением. Кроме того, в процессе моделирования мы рассматривали только один тип устойчивых дефектов, а именно дивакансии. Однако наше моделирование показывает, что предложенный механизм действительно "работает".

Четвертая глава посвящена изучению накопления дефектов в объеме, а также непосредственно вблизи поверхности при имплантации в Si быстрых тяжелых ионов при температуре жидкого азота.

Образцы (100) Si (КЭФ 5-10) при температуре жидкого азота (-196 °C) подвергались

кулярным ионам. Эволюция первичных и вторичных дефектов описывается следующими кинетическими уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = D\frac{d^{2}n}{dx^{2}} + D\frac{d^{2}n}{dy^{2}} - \frac{n}{t} - an^{2}, \\ \frac{dn_{2v}}{dt} = \frac{1}{2}an^{2}, \end{cases}$$

с начальными условиями $n |_{t=0} = 0$, $n_{2v} |_{t=0} = 0$, где n – концентрация вакансий. Граничные условия были выбраны циклическими. Для того чтобы исключить влияние переходных процессов, при расчете величины полного повреждения, необходимо не учитывать повреждение, создаваемое за

бомбардировке ионами ²⁰⁹Вi₁ и ²⁰⁹Вi₂ с энергией E = 0.5 МэВ/атом в диапазоне доз от $1 \cdot 10^{12}$ ат/см² до $1.8 \cdot 10^{13}$ ат/см² при плотности ионного потока $F \approx 6 \cdot 10^9$ ат/(см² с) в направлении, составляющем 7° с направлением (100), для подавления эффекта каналирования.

Все экспериментальные работы по облучению и снятию спектров RBS осуществлялись С.О. Кучеевым в Австралийском национальном университете, г. Канберра, Австралия.

На рис. 5 представлены профили распределения относительной концентрации дефектов по глубине в Si облученном ионами ²⁰⁹Bi₁ и ²⁰⁹Bi₂ дозой $\Phi = 8 \cdot 10^{12}$. Хорошо видно, что спектры имеют ярко выраженный бимодальный характер. Кроме того, из рис. 5 хорошо видно,





Рис. 5 Профили распределения относительной концентрации дефектов по глубине в Si облученном при температуре -196 °C ионами ²⁰⁹Bi₁ и ²⁰⁹Bi₂ с энергий 0.5 МэВ/атом.

Рис. 6 Зависимость относительной концентрации устойчивых нарушений в максимуме ОМД от дозы ионов $^{209}Bi_1$ и $^{209}Bi_2$. Пунктирная линия – теория.

что в области, расположенной между ПМД и ОМД, имплантация ионов Bi₂ приводит к более сильному повреждению полупроводниковой матрицы в расчете на одну упавшую атомную частицу, чем внедрение ионов Bi₁, т.е. в приповерхностной области Si наблюдается МЭ в накоплении устойчивых нарушений с γ > 1.

На основании данных о средних параметрах индивидуального каскада смещений, полученных из статистического анализа большого количества каскадов смещений, распределение смещенных атомов в которых было получено при помощи стандартной программы TRIM 95 [2], можно заключить, что традиционные механизмы, основанные на концепции нелинейных энергетических пиках, в данных условиях облучения неприменимы. Кроме того, *S* – образный вид зависимости относительной концентрации дефектов в максимуме ОМД n_{dm} от дозы облучения Ф, показанный на рис. 6, свидетельствует о том, что накопление разупорядочения при низкотемпературном облучении Si быстрыми тяжелыми ионами нельзя рассматривать как перекрытие полностью аморфных РО. Для описания подобных зависимостей $n_{dm}(\Phi)$ может быть применена модель перекрытия PO с не полностью нарушенной кристаллической структурой, когда для достижения полной аморфизации вещества необходимо k – кратное перекрытие таких областей [5]. В такой модели среднее по площади относительное повреждение n_d может быть записано, как:

$$n_d = 1 - \exp\left(-a\Phi\right) \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} I_k \frac{(a\Phi)^k}{k!} \right],\tag{7}$$

где $\lambda_k = 1$ - n_k , где n_k – относительная концентрация дефектов в (k-1) – кратно перекрытой РО. Естественно предположить, что n_k линейно растет с увеличением числа перекрытий, т.е. $n_k = ck$, где c – уровень относительного повреждения в результате однократного попадания. В отличие от более ранних приложений данной модели, нами предполагалось, что рост n_k продолжается до тех пор, пока n_k внутри РО на данной глубине не достигнет критического уровня n_c (в наших расчетах полагалось $n_c = 0.1$), при достижении которого происходит спонтанный переход из кристаллического в аморфное состояние. При этом, естественно, $n_k = 1$, а $\lambda_k = 0$. Результаты расчетов по представленной модели показаны на рис. 6 пунктирной линией.

Таким образом, в данном случае возможное объяснение МЭ может быть связано с нелинейными энергетическими пиками, возникающими в области пространственного перекрытия (относительно плотных) субкаскадов, на которые разделяется каждый индивидуальный каскад или же с увеличением эффективности кластерообразования при увеличении плотности каскадов в случае облучения молекулярными ионами по сравнению с облучением атомарными ионами, подробно рассмотренный в главе 3.



Рис. 7 Зависимость толщины AC на поверхности (100) Si от дозы облучения при температуре –196 °С ионами ²⁰⁹Bi₁ и ²⁰⁹Bi₂ с энергией 0.5 МэВ/атом. Точки – экспериментальные результаты. Пунктирная линия – расчет.

Однако для того чтобы ответить на вопрос, какие именно процессы ответственны за МЭ в Si под воздействием низкотемпературного облучения быстрыми тяжелыми ионами, необходимы дальнейшие исследования.

Как уже упоминалось выше, на экспериментальных RBS/C спектрах, хорошо различим ПМД (см. рис. 5). Обычно подобный поверхностный пик дефектов соответствует тонкому AC. В данной работе толщина этого поверхностного AC h оценивалась путем сравнения реального спектра с результатом свертки модельной и аппаратной функций. Также учитывалось наличие естественного поверхностного слоя SiO₂. Зависимость толщины поверхностного AC от дозы облучения Φ показана на рис. 7 точками. Видно, что h

растет с ростом Φ , причем эффективный рост *h* начинается при достижении определенной пороговой дозы облучения. Также можно сказать, что накопление разрушений в приповерх-

ностной области не зависит в пределах погрешности от того атомарными или молекулярными ионами проводится облучение.

В главе 2 была предложена модель, описывающая кинетику роста AC при облучении Si легкими медленными ионами при T_k . Результат расчетов, выполненных на основании подобной модели для диффузионной длины $L_d = 9$ представлен на рис. 7 пунктирной линией. Видно хорошее соответствие расчетной зависимости экспериментальным результатам.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации:

- 1.1 Предложена физическая модель накопления структурных нарушений в Si при облучении его медленными лёгкими ионами при комнатной температуре. Данная модель базируется на представлении о миграции генерируемых ионами мобильных точечных дефектов к поверхности и последующих процессах их сегрегации на межфазной границе, а также учитывает тот факт, что переход из кристаллического в аморфное состояние происходит спонтанно при достижении критического уровня дефектов. Кроме того, предполагается, что пороговая доза облучения, характерная для случаев облучения кремния, возникает в результате накопления дефектов на насыщаемых стоках, которые существуют в кремнии до облучения и имеют большое сечение захвата мобильных дефектов.
- 1.2 Расчеты, базирующиеся на предложенной модели, дали хорошее согласие с экспериментальными данными, известными в литературе. Показано, что данная модель может быть успешно применена для описания накопления разупорядочения вблизи поверхности в случае облучения Si быстрыми тяжелыми ионами. Кроме того, приложение разработанной модели к случаям бомбардировки GaAs медленными ионами показало, что она может быть применена и для других типов полупроводниковых материалов.
- 2.1 Обнаружено неизвестное ранее явление зависимость величины молекулярного эффекта от плотности потока ионов в случае имплантации легких ионов в кремний, которое не может быть объяснено в рамках существующих представлений.
- 2.2 Отсутствие в пределах погрешности МЭ при большой плотности потока ионов, свидетельствует о том, что традиционный механизм, привлекаемый для объяснения молекулярного эффекта на легких ионах и основанный на концепции нелинейных энергетических пиков, возникающих при перекрытии отдельных субкаскадов, в действительности, в случае облучения Si легкими ионами не дает существенный вклад.
- 2.3 Предложен новый физический механизм МЭ для легких ионов, основанный на нелинейности процессов вторичного образования дефектов. Результаты численного моделирования показали, что предложенная модель, по крайней мере, на качественном уровне способна объяснить различие в накоплении радиационных повреждений в Si при облучении атомарными и молекулярными ионами, а также уменьшение величины МЭ с ростом плотности потока ионов.

- 3.1 Исследовано накопление структурных нарушений в Si при низкотемпературном облучении тяжелыми быстрыми ионами методом RBS/C. Результаты показывают, что при данных условиях облучения распределение устойчивых нарушений по глубине имеет бимодальный характер, кроме того, что в эквивалентных условиях молекулярные ионы производят больше дефектов, чем атомарные.
- 3.2 Показано, что в данных условиях облучения накопление разупорядочения в объеме образца хорошо описывается в рамках модифицированной модели перекрытия разупорядоченных областей с не полностью нарушенной кристаллической структурой, когда для достижения полной аморфизации вещества требуется *k* кратное перекрытие таких областей, кроме того, при достижении критического уровня дефектов происходит спонтанный переход из кристаллического в аморфное состояние.
- 3.3 Молекулярный эффект в данных условиях облучения может быть обусловлен *i*) процессами, связанными с нелинейными энергетическими пиками, возникающими в области пространственного перекрытия (относительно плотных) субкаскадов, на которые разделяется каждый индивидуальный каскад, *ii*) увеличением эффективности кластерообразования с увеличением плотности каскадов в случае облучения молекулярными ионами по сравнению с облучением атомарными ионами.

Цитируемая литература

- 1. Титов А.И. Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.04. Л.: ЛПИ им. М.И. Калинина, 1989. 402 с.
- 2. Biersack J.P., Haggmark L.G. // Nucl. Instr. and Meth. 174 (1980), p. 257.
- Kimura K., Agarwal A., Toyofuku H., Nakajima K., Gossman H.-J. // Nucl. Instr. and Meth. B 148 (1999), p. 284.
- 4. Lohner T., Kotai E., Khanh N.Q., Toth Z., Fried M., Vedam K., Nguyen N.V., Hanekamp L.J., van Silfhout A. // Nucl. Instr. and Meth. B. 85 (1994), p.335.
- 5. Gibbons J.F. // Proceedings of the IEEE, 60 (1972), № 9, p. 1062.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

- 1. Титов А.И., Азаров А.Ю., Беляков В.С. Кинетика роста поверхностных аморфных слоев при облучении кремния легкими ионами низких энергий. // ФТП, т. 37 (2003), с. 358-364.
- Titov A.I., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Formation of surface amorphous layers in semiconductors under low-energy light-ion irradiation: Experiment and theory. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 212 (2003), p. 169-178.
- Titov A.I., Kucheyev S.O., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Damage buildup in Si under bombardment with MeV heavy atomic and molecular ions. // J. Appl. Phys., v. 90 (2001), p. 3867-3872
- 4. Азаров А.Ю., Никулина Л.М., Титов А.И. Молекулярный эффект в Si для легких ионов:

эксперимент и модель. // VII Всероссийский семинар "Физические и физико-химические основы ионной имплантации", Нижний Новгород 26-29 октября 2004 г., Тез. докл., Н. Новгород: ННГУ, 2004, с. 70-72.

- Беляков В.С., Азаров А.Ю. Особенности образования дефектов в GaAs, бомбардируемом медленными ионами. // VII Всероссийский семинар "Физические и физико-химические основы ионной имплантации", Нижний Новгород 26-29 октября 2004 г., Тез. докл., Н. Новгород: ННГУ, 2004, с. 65-66.
- Titov A.I., Azarov A.Yu., Belyakov V.S. Damage accumulation in semiconductors bombarded by light keV ions. // Abstracts of the 10th International Conference "Desorption", 2004, August 29 - September 2, Saint Petersburg, Russia, p.83.
- Titov A.I., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Damage Accumulation in GaAs bombarded by keV ions. // Abstracts of the 21th International Conference on Atomic Collisions in Solids, July 4-9 2004, Genova, Italy, p. 146.
- Азаров А.Ю. Кинетика роста поверхностного аморфного слоя при низкотемпературном облучении кремния быстрыми тяжелыми ионами. // XXXIV Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 31 мая – 2 июня 2004 г., Тез. докл., М., изд. МГУ, 2004, с. 74.
- Азаров А.Ю., Беляков В.С. Накопление дефектов в арсениде галлия при облучении медленными ионами. // XXXIV Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 31 мая – 2 июня 2004 г., Тез. докл., М., изд. МГУ, 2004, с. 75.
- Titov A.I., Azarov A.Yu., Belyakov V.S. Damage buildup in Si under low energy light ion irradiation. // Abstracts of the 20th International Conference on Atomic Collisions in Solids, January 19-24 2003, Toshali Sands, Puri, India, p. 100.
- 11. Титов А.И., Никулина Л.М., Азаров А.Ю. Молекулярный эффект в кремнии, облученном ионами азота: роль плотности потока ионов. // Материалы XVI Международной конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью" 25-29 августа 2003 г., Звенигород, Россия, Москва 2003, т. 2, с. 41-44.
- 12. Никулина Л.М., Хуторщиков М.В., Титов А.И., Азаров А.Ю. Влияние плотности ионного тока на эффективность молекулярного эффекта при накоплении нарушений в кремнии, облучаемом ионами азота. // VI Всероссийский семинар "Физические и физикохимические основы ионной имплантации", Нижний Новгород 15-17 октября 2002 г., Тез. докл., Н. Новгород: ННГУ, 2002, с. 19-20.
- 13. Титов А.И., Азаров А.Ю., Беляков В.С. Рост приповерхностных аморфных слоев при облучении кремния медленными легкими ионами. // VI Всероссийский семинар "Физические и физико-химические основы ионной имплантации", Нижний Новгород 15-17 октября 2002 г., Тез. докл., Н. Новгород: ННГУ, 2002, с. 15-16.
- 14. Titov A.I., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Formation of amorphous layers in semiconductors un-

der low energy light ion irradiation. // Proceedings of the 8th Japan-Russia International Symposium on Interaction of Fast Charged Particles with Solids, Kyoto, Japan, 24-30 November 2002, p. 177-181.

- 15. Титов А.И., Азаров А.Ю., Беляков В.С. Образование аморфных слоев в кремнии при имплантации медленных ионов. // XXXII Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, 27-29 мая 2002 г., Тез. докл., М., изд. МГУ, с. 121.
- Titov A.I., Kucheyev S.O., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. The accumulation of damage in Si bombarded with MeV heavy atomic and molecular ion. // Abstracts of XV International conference "Ion Beam Analysis", July 15-20, 2001, Cairns, Australia.
- 17. Титов А.И., Кучеев С.О., Беляков В.С., Азаров А.Ю. Образовании дефектов в кремнии при низкотемпературном облучении атомарными и молекулярными ионами висмута. // XXXI Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, 28-30 мая 2001 г., Тез. докл., М., изд. МГУ, с. 75.
- Titov A.I., Kucheyev S.O., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Molecular effect in Si bombarded by 0.5 MeV/atom Bi ions. // Материалы XV международной конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью" 27-31 августа 2001 г., Звенигород, Россия, Москва 2001, т. 2, с. 46-49.
- 19. Titov A.I., Kucheyev S O., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. Damage accumulation in Si bombarded by fast Bi atomic and molecular ions. // Материалы XV международной конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью" 27-31 августа 2001 г., Звенигород, Россия, Москва 2001, т. 2, с. 50-53.