

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В КРЕМНИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПРОНИКАЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

И. Ю. Забавичев, К. А. Насеткин, А. А. Потехин, А. С. Пузанов

Филиал РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю. Е. Седакова», г. Нижний Новгород

Введение

Известно, что дефектообразование приводит к изменению электрофизических параметров полупроводниковых материалов под действием проникающих излучений, в частности, потоков мгновенных нейтронов спектра деления. Нейтроны при упругом взаимодействии с атомами вещества выбивают их из узлов кристаллической решетки, что приводит к образованию разупорядоченных областей, называемых кластерами радиационных дефектов (КРД), которые являются эффективными центрами рассеяния основных носителей заряда в полупроводниковых структурах. На макроскопическом уровне это приводит к снижению подвижности, численные значения которой в зависимости от флюенса нейтронов широко представлены в литературе, например, в монографии [1]. В свою очередь КРД можно рассматривать как совокупность субкластеров радиационных дефектов (СКРД) произвольной формы и размеров, расположенных на разных расстояниях друг от друга.

Уменьшение размеров полупроводниковых структур приводит к усилению эффектов, связанных с «горячими» носителями заряда, подвижность которых значительно превышает равновесное значение, в условиях квазибаллистического переноса [2]. В этом случае носители заряда рассеиваются не на КРД в целом, а на отдельных СКРД. В этих условиях значительную роль начинает играть форма потенциала отдельных СКРД из состава КРД.

Экспериментально процесс формирования разупорядоченной области радиационных дефектов на начальной стадии еще не изучен [3], хотя предложены оригинальные способы для решения данной задачи на основе анализа спектра излучения в терагерцовом диапазоне частот [4] или при помощи фемтосекундной съемки в режиме реального времени [5]. Таким образом, единственной возможностью анализа данного процесса является теоретическое моделирование образования кластера радиационных дефектов и представляет значительный интерес для построения математических моделей реакции приборов микро- и нанoeлектроники на радиационное воздействие. В настоящее время существует широкий спектр методов моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе [3], которые можно разделить на 4 класса: квантово-механические

методы «из первых принципов», методы классической молекулярной динамики [6], методы парных взаимодействий (алгоритмы Монте-Карло) и континуальные методы, основанные на законах теплопереноса в сплошной среде. Однако необходима разработка методики анализа пространственного распределения субкластеров радиационных дефектов, позволяющей оценивать средние размеры и расстояния между субкластерами. Точная оценка данных параметров позволит корректно моделировать изменение подвижности носителей заряда в субмикронных полупроводниковых структурах после радиационного воздействия.

Математическая модель

Предлагаемый в данной работе метод исследования структуры КРД включает в себя моделирование процесса образования дефектов с последующим анализом пространственного распределения радиационных дефектов внутри кластеров, образованных при воздействии потока нейтронов. Общий алгоритм анализа топологии дефектов отображен в блок-схеме на рис. 1.

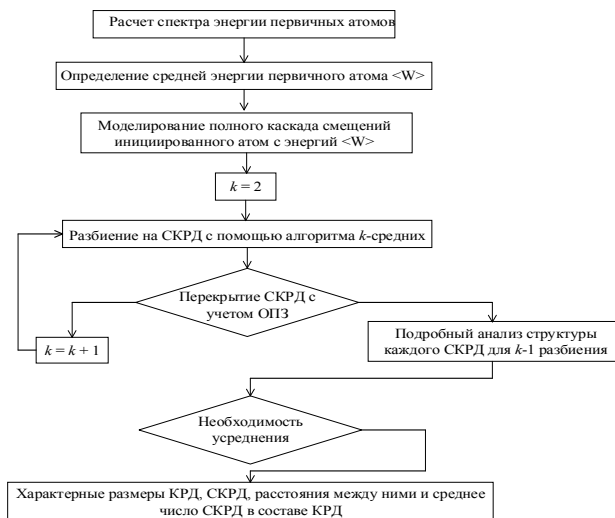


Рис. 1. Блок-схема алгоритма анализа топологии кластера радиационных дефектов

Спектр мгновенных нейтронов спектра деления является непрерывным и простирается от единиц килоэлектронвольт до 18 МэВ со средней энергией около 2 МэВ. На основании экспериментальных измерений Кранбергом [7] была предложена следующая формула, описывающая спектр мгновенных нейтронов деления:

$$\phi(E_n) = 0,453 \cdot \left[sh(2,29E_n)^{0,5} \right] \exp\left(\frac{-E_n}{0,965}\right) \quad (1)$$

Расчет спектра энергии первичных атомов отдачи проводится в приближении упругого взаимодействия быстрого нейтрона с веществом. В этом случае частица передает часть энергии кинетической энергии ядру атома, в результате чего ядро смещается из равновесного положения, увлекая за собой электронную оболочку атома. Однако, в случае, если скорость атома окажется больше скорости орбитальных электронов, может произойти его ионизация. Спектр энергий ядер отдачи зависит от углового распределения рассеиваемых нейтронов. На основании законов сохранения энергии и момента количества движения (модель твердых шаров) кинетическая энергия T_A , передаваемая ядрам атомов, определяется следующим выражением [8]:

$$T_A = \frac{4M_n M_A}{(M_n + M_A)^2} T_n \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \frac{4A}{(1+A)^2} T_n \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \quad (2)$$

где M_n и M_A – массы нейтрона и атома вещества, T_n – кинетическая энергия налетающего нейтрона, ϑ – угол отдачи между направлением движения нейтрона до и после столкновения, A – атомный вес.

При лобовом столкновении ($\vartheta = 180^\circ$) происходит передача максимальной энергии $T_{A\max}$.

$$T_{A\max} = \frac{4M_n M_A}{(M_n + M_A)^2} T_n = \frac{4A}{(1+A)^2} T_n \quad (3)$$

При изотропном рассеянии нейтронов все значения энергий отдачи от 0 до $T_{A\max}$ равновероятны. Тогда средняя энергия, передаваемая нейтроном атомам вещества при столкновении

$$\langle T_A \rangle = \frac{T_{A\max}}{2} \quad (4)$$

Так, при средней энергии быстрых нейтронов порядка $T_n = 2$ МэВ, что имеет место при облучении в стационарном атомном реакторе, для кремния ($A = 28$) будем иметь $T_A = 268$ кэВ, для GaAs ($A \approx 72$) – 110 кэВ. На рис. 2 представлены энергетические спектры первичных атомов в Ge и Si, образованных потоком мгновенных нейтронов спектра деления, который описывается выражением (1).

Моделирование образования каскада атомных смещений, инициированного первичным атомом отдачи, проводилось в приближении парного взаимодействия с помощью программы TRIM [9]. Результатом работы программы является массив, содержащий информацию о пространственных координатах

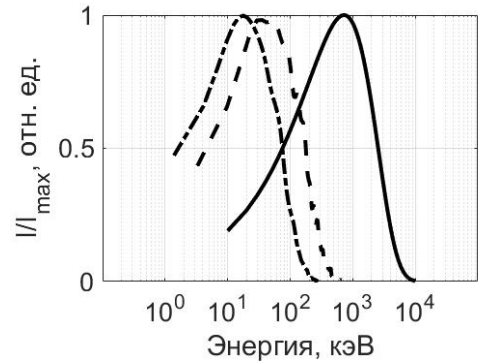


Рис. 2. Энергетические спектры первичных атомов Ge (—) и Si (---), образованных воздействием потока мгновенных нейтронов спектра деления (—)

точных дефектов, сгенерированных вдоль трека прохождения первичного атома. К полученному массиву данных применяется алгоритм кластеризации k -средних [10], с помощью которого кластер радиационных дефектов разбивается на k субкластеров. Затем полученное распределение оценивается на предмет пересечений с учетом размеров области пространственного заряда, которая окружает каждый субкаскад. Если отдельные субкаскады не перекрываются, то процесс повторяется для большего значения k . Данная процедура повторяется до тех пор, пока выше указанное условие не перестает выполняться. В этом случае для $k-1$ разбиения оценивается детальная информация о пространственном распределении субкластеров: их общее число в одном каскаде, геометрические размеры и расстояния между ними. Эти параметры оцениваются для каждой отдельной реализации кластера радиационных дефектов с последующим усреднением по всем реализациям. Полученные таким образом информация необходима для моделирования транспорта носителей заряда, в том числе, с учетом вариации размеров и концентрации рассеивающих областей.

Стандартным методом решения кинетического уравнения Больцмана является непрямо́й метод, основанный на процедуре статистических испытаний (метод Монте-Карло). Метод позволяет учесть все особенности взаимодействия электронного газа с кристаллической решеткой полупроводникового материала: особенности дисперсионной картины (многодолинность, непараболичность долин), все механизмы рассеяния носителей заряда для широкого интервала значений напряженности электрического поля и энергий частиц. Учет радиационного воздействия в данном методе моделирования происходит через дополнительный механизм рассеяния на

заряженных скоплениях точечных дефектов. Для расчета частоты рассеяния на кластерах радиационных дефектов, учитывающий форму потенциала рассеяния, заключается в следующем.

Дифференциальное сечение рассеяния $\sigma(E, \theta)$ в приближении независимых рассеивающих центров [11] описывается следующим выражением:

$$\sigma(W, \theta) = |f(W, \theta)|^2,$$

$$f(W, \theta) = \frac{2qm^*}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{\sin(Kr)}{Kr} r^2 V(r) dr, \quad (5)$$

$$K = \frac{4m^*W}{\hbar^2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right),$$

где $f(E, \theta)$ – амплитуда рассеяния, W – энергия электрона, θ – угол рассеяния, m^* – эффективная масса электрона, \hbar – постоянная Планка, r – расстояние от рассеивающего центра до носителя заряда, q – заряд электрона $V(r)$ – потенциал рассеяния.

Для дальнейших преобразований предположим, что функция $V(r)$ является сферически симметричной. Тогда полное сечение рассеяния определяется после интегрирования во всем диапазоне возможных углов рассеяния как:

$$\sigma(W) = 2\pi \int_0^{2\pi} \sigma(W, \theta) \sin(\theta) d\theta. \quad (6)$$

Тогда частота рассеяния $\lambda(W)$ в зависимости от энергии электрона рассчитывается по следующей формуле:

$$\lambda(W) = \sigma(W) N_{dr} v_e. \quad (7)$$

где N_{dr} – концентрация рассеивающих центров, v_e – скорость электрона.

В итоге, выбрав для расчетов функциональную зависимость потенциала рассеяния от расстояния и используя изложенный выше алгоритм, можно оценить деградацию подвижности носителей заряда под действием потока нейтронов. В данной работе были рассчитаны частоты рассеяния для потенциалов рассеяния жесткой сердцевины и потенциала из оригинальной работы Флеминга [12].

Потенциал жесткой сердцевины имеет следующий вид

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (8)$$

где a – радиус сферы бесконечного потенциала. Использование для вычислений потенциала жесткой сердцевины позволяет существенно облегчить расчеты, так как в объемном полупроводнике носители заряда имеют максвелловское распределение по энер-

гии, то есть большинство обладают энергией $\sim \frac{3}{2} k_B T$. В том случае СКРД можно представить как абсолютно непрозрачный рассеивающий центр.

Потенциал Флеминга имеет следующий вид:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{eN_d r_2^2}{3\chi\chi_0} \left(\frac{r_1}{r} + \frac{r_2 r^2}{2r_1^3} - \frac{3}{2} \left(1 - \frac{r_2}{r_1} - \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^2 \right) \right), & r < r_1 \\ -\frac{eN_d r_2^2}{3\chi\chi_0} \left(\frac{r_2}{r} + \frac{r^2}{2r_2^2} - \frac{3}{2} \right), & r_1 < r < r_2 \\ 0, & r > r_2 \end{cases} \quad (9)$$

где r_1 – размер отрицательно заряженной области, r_2 – размер области пространственного заряда, N_d – концентрация донорной примеси, χ – диэлектрическая проницаемость среды, χ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Использование при расчетах потенциала Флеминга позволяет учесть структуру СКРД, который состоит из отрицательно заряженного ядра, содержащего малоподвижные дивансии, и окружающей его области пространственного заряда, образованной ионизированной примесью.

Результаты расчетов

Предложенный алгоритм анализа пространственного распределения субкластеров использовался для исследования характеристик разупорядоченных областей в Si, Ge и GaAs [13]. Среднее число субкластеров в одном кластере (рис. 3а), их размеры (рис. 3б) и расстояния между ними (рис. 3в) в Si, Ge и GaAs при энергиях первичных атомов, соответствующих облучению нейтронами с энергией 2 МэВ представлены на рис. 3.

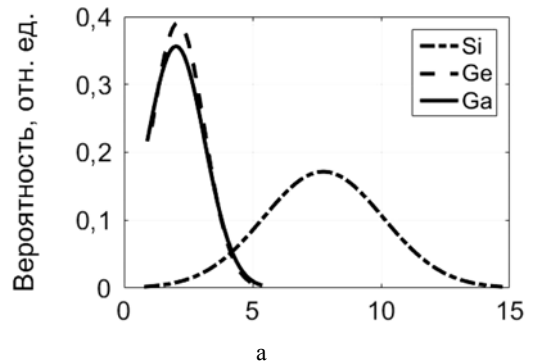


Рис. 3. Параметры разупорядоченных областей при энергиях первичных атомов, соответствующих облучению нейтронами с энергией 2 МэВ: в Si (---), Ge (-.-), GaAs (—); а – среднее число субкластеров в одном кластере, б – их размеры, в – расстояния между ними

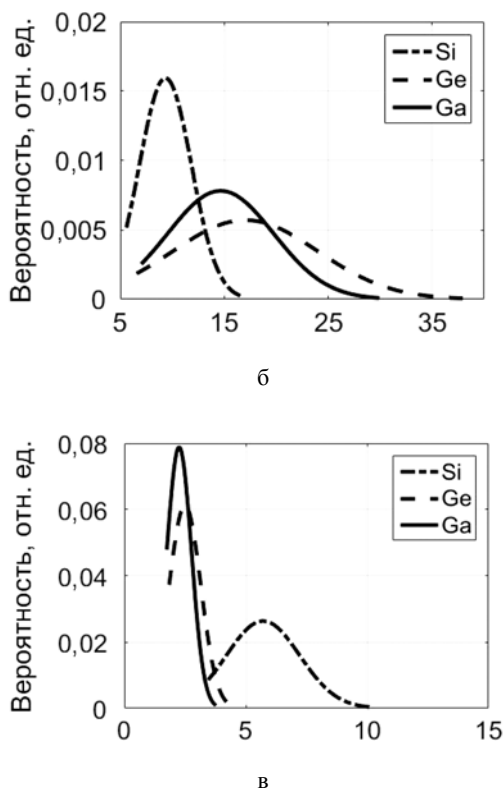


Рис. 3. (Окончание)

Первичный атом Ge и Ga образуют преимущественно плотные каскады атомных смещений, которые не распадаются на отдельные субкластеры, о чем свидетельствуют большие значения размера субкластеров и маленькое среднее расстояние между ними. Согласно полученным теоретическим оценкам, средние размеры ядра субкластера для Si, Ge и GaAs составляют 9, 14 и 17 нм соответственно. Для объемного кремния (удельное сопротивление $\rho_0 = 3 \text{ Ом} \cdot \text{см}^{-1}$) были проведены расчеты частот рассеяния на заряженных кластерах радиационных дефектов для различных моделей потенциала рассеяния с последующим анализом изменения подвижности носителей заряда после радиационного воздействия. Результаты расчета с использованием потенциала рассеяния жесткой сердцевины, Флеминга, а также литературные данные по изменению подвижности носителей заряда в кремнии при облучении быстрыми нейтронами с разной величиной потока частиц [1] представлены на рис. 4.

Из зависимостей, представленных на рис. 4, следует, что оба потенциала качественно одинаково описывают изменение подвижности при радиационном воздействии, несмотря на кардинальные различия между рассматриваемыми потенциалами. Это связано с тем, что в объемном полупроводниковом материале носители заряда подчиняются максвелловскому распределению по энергии, при котором большинство носителей заряда имеют сравнительно маленькую энергию. В этом случае при усреднении

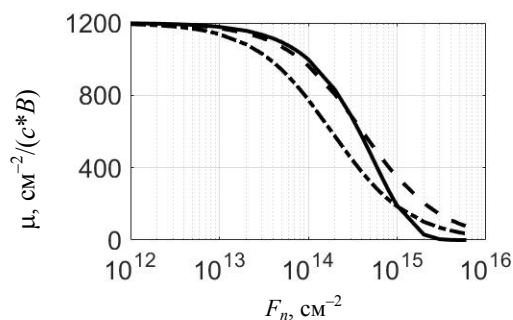


Рис. 4. Изменение подвижности в кремнии после радиационного воздействия: — — литературные данные [1], --- — результаты моделирования с помощью потенциала жесткой сердцевины, — — результаты моделирования с помощью потенциала из работы [12]

влияние внутренней структуры СКРД становится незначительным, так как для подавляющего большинства носителей заряда он представляет собой абсолютно непрозрачную область. Однако использование потенциала жесткой сердцевины для расчета частот рассеяния на субкластерах радиационных дефектов все же позволяет добиться лучшего согласования с экспериментальными данными. Расхождение в области большого потока частиц (10^{15} – 10^{16} см^{-2}) объясняется тем, что при таких значениях флюенса нейтронов происходит перекрытие отдельных кластеров радиационных дефектов, что приводит к более резкому уменьшению подвижности носителей заряда в материале.

Заключение

При оценке деградации подвижности в слоях полупроводникового материала, где транспорт в основном описывается динамикой «горячих» носителей заряда, вид функции потенциала рассеяния может играть существенную роль. Поэтому для большей достоверности дальнейших расчетов необходимо использовать потенциал, полученный с помощью численного решения уравнения Пуассона для разупорядоченной области полупроводникового материала.

Литература

1. Ладыгин Е. А. Действие проникающей радиации на изделия электронной техники. М.: Советское радио, 1980.
2. Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Деградация характеристик биполярных транзисторов на основе GaAs с тонкой базой при возникновении в них нанометровых кластеров радиационных дефектов под действием нейтронного облучения // Физика и техника полупроводников, 2017. Т. 51, № 11. С. 1520–1524.
3. Калинин Б. А. Физическое материаловедение. Том 4. Физические основы прочности. Радиационная

физика твердого тела. Компьютерное моделирование. М.: МИФИ, 2008.

4. Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А., Волкова Е. В., Павельев Д. Г. Высоочастотное детектирование процессов формирования и стабилизации кластера радиационных дефектов в полупроводниковых структурах // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49, № 12. С. 1585–1592.

5. Liang J., Zhu L., Wang L.V. Single-shot real-time femtosecond imaging of temporal focusing // Light: Science & Applications. 2018. Vol. 7, N 42. P. 1–10.

6. Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Моделирование образования каскада смещений и переходных ионизационных процессов в кремниевых полупроводниковых структурах при нейтронном воздействии // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53, № 9. С. 1279–1284.

7. Крамер-Агеев Е. А. Экспериментальные методы нейтронных исследований. М.: Энергоиздат, 1990.

8. Вавилов В. С. Действие излучений на полупроводники. М.: Физматгиз, 1963.

9. Ziegler J. F., Biersak J. P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. Pergamon, N.Y., 1996.

10. Steinhaus H. (1956). Sur la division des corps materiels en parties. Bull. Acad. Polon. Sci., C1. III Vol. IV. P. 801–804.

11. Зеерер К. Физика полупроводников. М.: Мир, 1977.

12. Fleming R. M., Seager C. H., Lang D. V., Cooper P. J., Bielejec E. and Campbell J. M. Effects of defect clustering in neutron irradiated silicon // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 401. P. 491–494.

13. Забавичев И. Ю., Оболенская Е. С., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Транспорт горячих носителей заряда в Si, GaAs, InGaAs и GaN субмикронных полупроводниковых структурах с нанометровыми кластерами радиационных дефектов // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51, № 11. С. 1489–1492.