

ПЕРЕНОС НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА ЧЕРЕЗ ФОРМИРУЮЩИЙСЯ КЛАСТЕР РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В СУБМИКРОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

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

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

Введение

В соответствии с дорожной картой развития приборов и систем, представленной институтом инженеров электротехники и электроники [1], одним из приоритетных направлений развития современной цифровой электроники, является уменьшение размеров рабочих областей элементов микросхем. Это приводит к усилению влияния неоднородности дефектообразования и ионизации при воздействии проникающих излучений [2].

В настоящее время накоплен обширный теоретический и практический материал по вопросам воздействия проникающих излучений на полупроводниковые структуры с характерными рабочими областями свыше 180 нм. Однако для элементов с меньшими характерными размерами рабочей области исследования их функционирования при воздействии проникающих излучений только начинаются.

Известно, что воздействие проникающих излучений приводит к образованию различного рода дефектов и ионизации полупроводника. В частности, при нейтронном облучении в результате развития каскада смещений атомов помимо точечных дефектов образуются разупорядоченные области – кластеры радиационных дефектов (КРД), состоящие из более мелких и плотных образований – субкластеров радиационных дефектов (СКРД). Такие объекты окружены пространственным зарядом и препятствуют движению электронов и дырок. При этом рассеяние носителей заряда, температура которых находится в равновесии с температурой кристаллической решетки, происходит на кластерах в целом, а горячих электронов и дырок – на отдельных СКРД.

При уменьшении активной области полупроводниковой структуры изменяется характер переноса носителей заряда в ней. При этом стоит отметить, что существенно меняется и набор факторов, влияющих на подвижность электронов и дырок в активной области. Для кремниевых структур с характерными размерами активных областей более 180 нм, реализация единичных СКРД слабо изменяла характеристики элемента в целом. При уменьшении размеров активной области до размеров, характерных для квазибаллистического пролета носителей заряда (16...150 нм в случае кремния [2]), уже отдельные реализации СКРД могут нарушить функционирование элемента.

Данная работа посвящена разработке моделей расчета параметров, влияющих на перенос носителей заряда в кремниевых полупроводниковых структурах с учетом наличия КРД для двумерного и трехмерного моделирования.

Оценка изменения температуры при образовании области разупорядочения

При рассмотрении задачи оценки изменения температуры кристалла, необходимо оценить характерные времена пролета первичного атома отдачи для оценки времени формирования разупорядоченных областей. При этом стоит учитывать, что времена, используемые при моделировании подобных структур физико-топологическими методами не превышают значений порядка 10^{-13} с, так как при меньших значениях времен не определено понятие температуры и нет возможности корректно задавать параметры, влияющие на результат моделирования.

Для оценки времени пролета первичного атома отдачи в структуре была проведена следующая оценка. Пусть первичный атом отдачи получил некоторую энергию E_1 при взаимодействии с нейтроном. Тогда можно допустить, что вся энергия, переданная первичному атому вследствие взаимодействия с нейтроном будет являться кинетической и ее можно выразить как $E_1 = (mv^2)/2$. Таким образом, можно

найти примерное значение начальной скорости движущегося первичного атома отдачи. В дальнейшем, при взаимодействии с кристаллической решеткой он будет терять данную энергию, а как следствие, и скорость. В случае, если для оценки дефектообразования используется система моделирования TRIM [3], то можно получить координаты взаимодействия данного первичного атома отдачи с кристаллической решеткой, тем самым, найти пройденное расстояние r между взаимодействиями и грубо оценить время между соударениями. Просуммировав эти времена, получим общее время движения первичного атома отдачи для оценки времени образования разупорядоченных областей до начала фазы стабилизации и отжига дефектов. В рамках работы, данные были усреднены по 1000 реализациям структурных повреждений, полученных при помощи пакета моделирования TRIM. Результаты расчетов для

кремния при различных начальных энергиях первичного атома отдачи приведены в табл. 1.

Таблица 1

Время распространения первичного атома отдачи для различных энергий

Энергия первичного атома отдачи, кэВ	Время распространения первичного атома отдачи в структуре, с
10	$2,72 \cdot 10^{-13}$
50	$4,53 \cdot 10^{-13}$
100	$5,89 \cdot 10^{-13}$

Как известно из литературы [4, 5], температура разупорядоченной области непосредственно после взаимодействия первичного атома отдачи с решеткой полупроводника может составлять порядка 1300 °С, что будет существенно влиять на параметры структуры, такие как, к примеру, время релаксации энергии, теплопроводность, теплоемкость и т. д. В качестве оценки рассмотрим классическую задачу распространения тепла в сферических координатах [6]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u, \quad (2.1)$$

где u – температура, a – коэффициент температуропроводности, определяемый как $a^2 = k/(c \cdot \rho)$, k – теплопроводность, c – удельная теплоемкость, ρ – плотность.

Начальные условия для решения задачи Коши данного уравнения будут представлены как $u(r, 0) = Q$, где Q – энергия, выделившаяся в результате взаимодействия с кристаллической решеткой первичного атома отдачи.

Общим решением для подобных задач является решение в виде функции Грина [6]

$$G(r, t) = \frac{Q}{c\rho} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi a^2 t}} \right)^3 e^{-\frac{r^2}{4a^2 t}} \quad (2.2)$$

Исходя из характерных времен, используемых для моделирования полупроводниковых приборов, построим зависимость температуры от расстояния от точки энерговыделения для трех характерных времен: 10^{-13} с, 10^{-12} с, 10^{-11} с, рис. 1.

Из рис. 1 видно, что при временах порядка 10^{-13} с локальная температура полупроводника может достигать значений порядка 1000 °С. Однако, на временах порядка 10^{-12} ... 10^{-11} с дополнительный разогрев падает до значений порядка десятков-единиц градусов и им можно пренебречь при расчетах на подобных временах. Также стоит учитывать, что точность определения макропараметров полупроводника и их калибровка на модели с учетом радиационного воздействия является достаточно грубой, так как

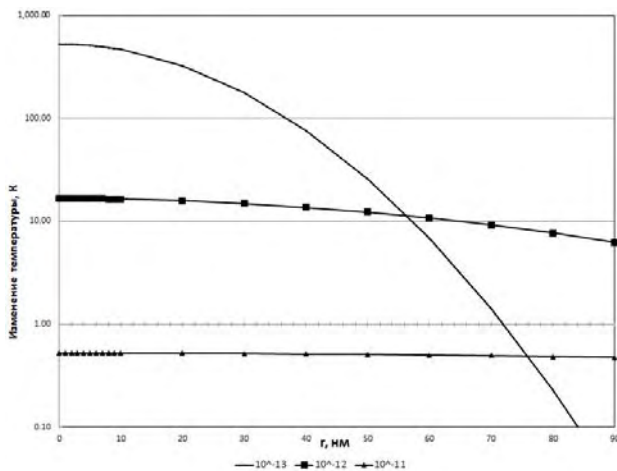


Рис. 1. Изменение температуры при образовании разупорядоченной области (модельная задача)

погрешности определения экспериментальных флюэнсов, а как следствие и данных, составляют порядка 20 % величины.

Диффузионная модель отжига радиационных дефектов

Для более полного учета внутренней структуры разупорядоченных областей необходим анализ как непосредственно размеров КРД и СКРД, так и моделирование процесса отжига, происходящего при стабилизации образовавшихся областей разупорядочения. При этом, стоит отметить, что точный учет данного процесса на данный момент дают только системы, связанные с методами молекулярной динамики [7]. Однако, для больших областей (размерами свыше $100 \times 100 \times 100$ нм) данная задача с расчетными временами порядка 100 пс является исключительно ресурсоемкой (времена расчета порядка недели с использованием ресурсов суперкомпьютера «Лобачевский») и не может подходить для проведения оптимизационного моделирования в рамках оценки реакции перспективных гетеронаноструктур на воздействии проникающих излучений.

В качестве более простого и менее ресурсоемкого метода предлагается модель учета отжига дефектов на базе данных, получаемых в среде моделирования TRIM.

Данный пакет позволяет получить данные о непосредственном формировании разупорядоченных областей с конечными координатами смещенных атомов. Исходя из этих данных, а также данных о «разбегании» скоплений дефектов размером менее 5 нм с дальнейшим их преобразованием в точечные дефекты, либо рекомбинацией, возникает необходимость построения адекватной модели учета отжига дефектов с последующей оценкой пространственного распределения оставшихся КРД.

На данный момент существует несколько разновидностей алгоритмов кластеризации, основанных на оценке «похожести» сравниваемых объектов.

В качестве такого критерия для алгоритмов, связанных с кластеризацией статистических данных выступает среднее расстояние между объектами.

В данной работе в качестве алгоритма кластеризации был выбран так называемый алгоритм пространственной кластеризации с учетом плотности. Данный алгоритм имеет ряд преимуществ. В частности, он позволяет разделять расположенные близко области СКРД, а также устойчив к наличию удаленных точек (выбросов по расстоянию), соответствующих одиночным дефектам. Также для данного алгоритма нет необходимости в задании начального числа кластеров в области, так как для любой реализации областей разупорядочения это число является случайной величиной.

Рассмотрим более подробно алгоритм пространственной кластеризации с учетом плотности. На первом шаге входные данные оцениваются по наличию рядом «соседей» – объектов, находящихся не более чем на минимальном удалении от заданного объекта. Если число таких точек достигает величины, которая указана в качестве нижней границы для данного типа объектов, то точка считается принадлежащей кластеру. Точки, имеющие недостаточное количество соседей, считаются шумовой компонентой и исключают-

ся из дальнейшего рассмотрения. После исключения шумовой компоненты производится кластеризация – оставшийся объем точек разделяется в соответствии со стандартным алгоритмом кластеризации по расстоянию. Результаты работы алгоритма приведены на рис. 2.

Как видно из рис. 2, все мелкие образования отождислись, тем самым произведен учет «разбегающихся» кластеров, а также дефектов, которые с большой долей вероятности проведут рекомбинацию.

Данный алгоритм был применен к различным одиночным реализациям, полученным в среде TRIM для различных энергий первичных атомов. Для каждой энергии были проведены по 100 реализаций каскадов смещений и результаты отжига были усреднены. В качестве начальных энергий первичных атомов отдачи были использованы следующие значения: 50 кэВ, 75 кэВ, 100 кэВ и 150 кэВ.

Для данных энергий был посчитан процент дефектов, исключаемых из рассмотрения в дальнейшем относительно первично образованных.

Как следует из рис. 3, процент отжигаемых дефектов в случае взаимодействия атома азота с структурой нитрида галлия стремится к 100 %. Это явление

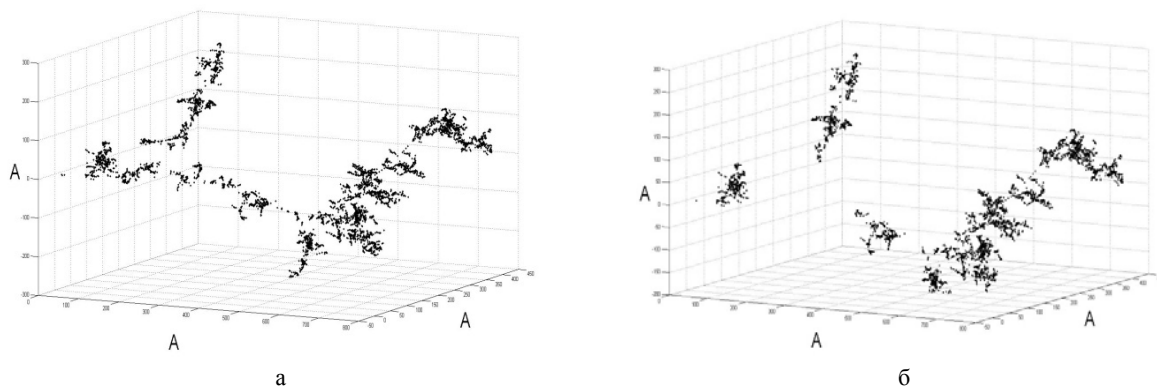


Рис. 2. Результаты работы метода оценки отжига, основанного на алгоритме пространственной кластеризации с учетом плотности: а – до работы алгоритма; б – после работы алгоритма

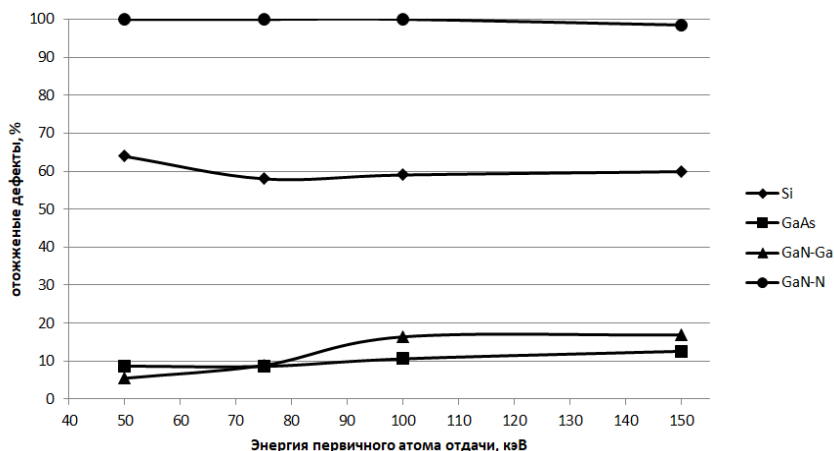


Рис. 3. Зависимость отношения дефектов, исключаемых из дальнейшего рассмотрения к общему числу смоделированных дефектов

ние объясняется тем, что атом азота имеет значительно меньшую атомную массу по сравнению с атомом галлия, следовательно при прямом взаимодействии с атомом галлия, азот не может передать достаточное количество энергии для формирования вторичного атома отдачи с энергией порядка 1 кэВ, которые, как известно из литературы, и образуют скопления дефектов.

В случае образования первичных атомов отдачи в бинарных полупроводниках расчет показал, что процент отжигаемых дефектов мал и при малых энергиях будет составлять 6...18 % в диапазоне энергий 50...150 кэВ.

Абсолютно иная ситуация наблюдается для кремния. В данном материале происходит отжиг до 60 % всех дефектов вне зависимости от начальной энергии первичного атома отдачи. Это объясняется тем, что при увеличении начальной энергии первичного атома отдачи происходит увеличение скорости движения атома, что влечет уменьшение времени взаимодействия с узлами кристаллической решетки и уменьшение доли энергии, которая идет на образование вторичных атомов отдачи. Также выбитые атомы будут иметь меньшую энергию, по сравнению со случаями, когда первичный атом отдачи будет иметь значительно меньшую энергию. Это в свою очередь, будет приводить к увеличению доли энергии, которая тратится на взаимодействие первичного атома отдачи с электронами. Такое изменение обусловлено тем, что электроны имеют значительно меньшую массу и необходимо гораздо меньшее количество энергии на разрыв связи электрона с кристаллической решеткой, нежели на образование пары Френкеля. На основе данных моделирования TRIM была получена зависимость линейной передачи энергии от

энергии первичного атома отдачи для кремния. При этом рассматривались оба механизма передачи энергии – как атомам, так и электронам.

Из рис. 4 видно, что при увеличении энергии первичного атома отдачи до величин выше 100 кэВ происходит увеличение линейной передачи энергии для взаимодействия электронов с первичным атомом отдачи и уменьшение величин энергии, которая тратится на взаимодействие первичного атома отдачи с атомами. Это означает, что при прочих равных с увеличением энергии первичного атома все большую роль будет играть ионизация.

Основной особенностью при подобном рассмотрении отжига является полное отсутствие возможности учета формирования мелких одиночных дефектов, так как для подобного анализа необходимо моделирование с использованием методов молекулярной динамики, что недопустимо с точки зрения использования подобных алгоритмов в задачах оптимизационного моделирования при разработке полупроводниковых приборов.

Стоит отметить, что рассеяние на подобных дефектах, а как следствие, и снижение подвижности, происходит только у носителей заряда с малой энергией. В переносе «горячих» носителей заряда мелкие одиночные дефекты играют малозначительную роль, так как заряды точечных дефектов вносят несущественные искажения в их траектории движения.

В общем случае, в современных гетеронаноструктурах преобладают именно горячие носители, поэтому рассмотрением точечных дефектов можно пренебречь.

В качестве алгоритма нахождения минимального эллипсоида, описывающего точки СКРД был выбран алгоритм Хачияна [8]. Этот алгоритм позволяет

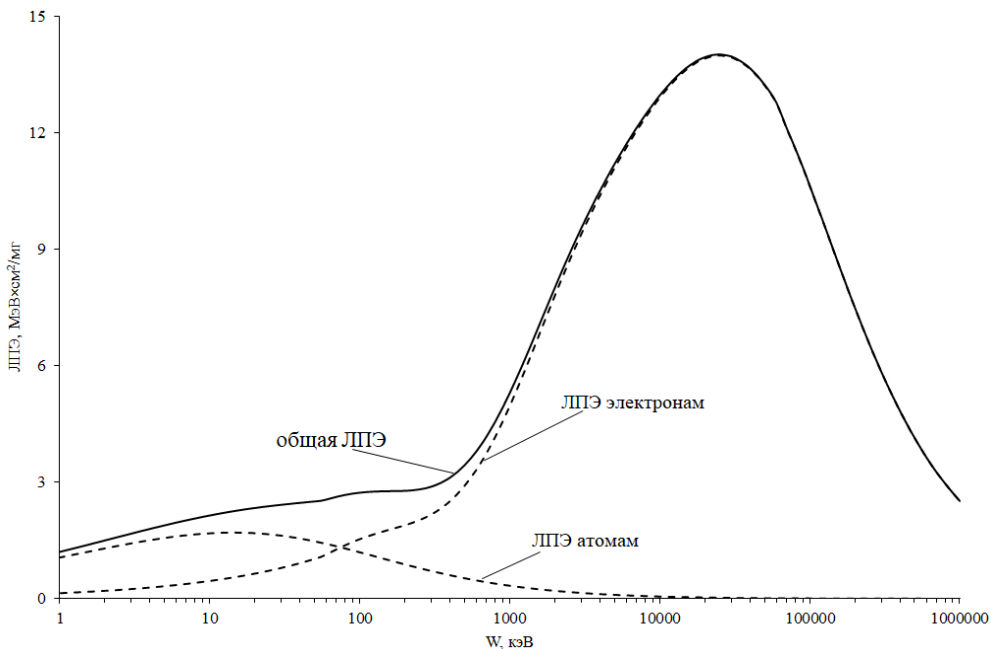


Рис. 4. Результат аппроксимации отожженных дефектов эллипсами для GaAs. Энергия первичного атома отдачи 150 кэВ

проводить аппроксимацию в случае, если неизвестны ни полуоси эллипса, ни его центр. Данный алгоритм обладает быстрой сходимостью для относительной погрешности определения положения эллипса относительно аппроксимируемых точек порядка 10^{-2} . При уменьшении этого показателя до величин порядка 10^{-5} и менее значительно увеличивается время расчетов из-за увеличения количества оптимизационных итераций данного алгоритма.

В результате после применения данного алгоритма к точкам, полученным после отжига можно определить характерные размеры КРД и СКРД, которые необходимы для дальнейших расчетов. Пример работы данного алгоритма представлен на рис. 5.

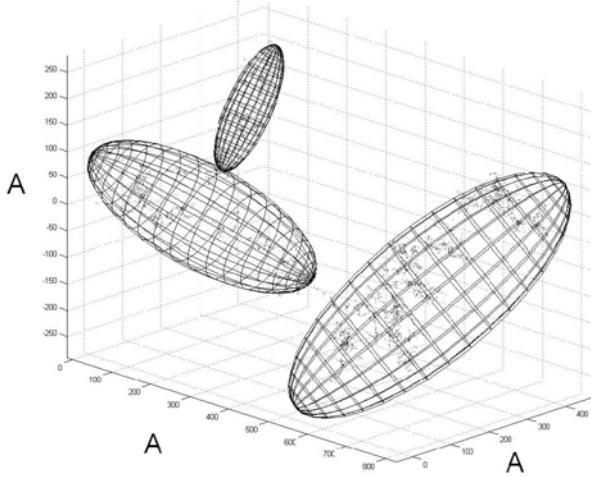


Рис. 5. Результат аппроксимации отоженных дефектов эллипсами для GaAs. Энергия первичного атома отдачи 150 кэВ

Данные алгоритмы были интегрированы в единый программный пакет, позволяющий на основании данных, генерируемых в TRIM, получать значительный объем данных для дальнейшего анализа. В случае реализации КРД и СКРД через введение дополнительных зарядов в уравнение Пуассона, массивы точек, полученных после реализации алгоритма пространственной кластеризации с учетом плотности, можно непосредственно использовать в качестве входных параметров.

Расчет электрофизических параметров кластеров радиационных дефектов

При этом, для определения времен релаксации, а как следствие, и подвижности, необходимо нахождение вероятности перехода электрона из одного состояния в другое, в следствие рассеяния на дефекте решетки или примеси. Здесь и далее эта задача будет рассматриваться в приближении сферически симметричной долины.

В общем случае задача нахождения вероятности перехода электрона в другое состояние является задачей квантовой теории рассеяния. Она решается на

основе метода нестационарной теории возмущений [9, 10]. Гамильтониан для материала представим в виде

$$\hat{H}_T = \hat{H} + \hat{H}' \quad (4.1)$$

где \hat{H}' описывает взаимодействие электрона с примесями и фононами, а \hat{H} является невозмущенным гамильтонианом и в нашем случае описывается гамильтонианом электрона в идеальной решетке, \hat{H} считается малым возмущением.

Стационарное решение для невозмущенного \hat{H} описывается как

$$\Psi_n(t) = \psi_n \exp(-i\varepsilon_n t / \hbar) \quad (4.2)$$

где ψ_n и ε_n – собственные функции и собственные числа решения уравнения

$$\hat{H}\psi_n = \varepsilon_n \psi_n \quad (4.3)$$

В общем случае, решив уравнение Шредингера для возмущенной задачи, и, учтя (4.3), а также то, что рассеивающий центр является заряженным, получим значение матричного элемента гамильтониана, отвечающего за вероятность перехода из невозмущенного состояния в возмущенное:

$$\hat{H}'_{kk'} = \int_0^\infty V(r) \frac{\sin(|k-k'|r)}{|k-k'|} dr. \quad (4.4)$$

Тогда дифференциальное сечение рассеяния можно определить как:

$$\sigma(\theta) = \left[\frac{Vm}{2\pi\hbar} \hat{H}'_{kk'} \right]^2. \quad (4.5)$$

Рассмотрим уравнение движения носителей заряда в условии пренебрежения тепловым движением:

$$\frac{d}{dt}(mv_d) + \frac{mv_d}{\tau_m} = eE, \quad (4.6)$$

где t – время, mv_d – импульс носителей заряда, а τ_m – определяется как среднее время релаксации импульса.

При этом, второе слагаемое уравнения описывает «трение», испытываемое носителями заряда о кристаллическую решетку при направленном движении под действием внешнего поля. Среднее время релаксации зависит от частоты колебаний кристаллической решетки, и, как следствие, определяет зависимость среднего времени релаксации от температуры. С точки зрения микроскопической теории данное «трение» обусловлено взаимодействием носителей заряда с несовершенствами кристаллической решетки – дефектами, примесями и колебаниями решетки.

Подобный тип взаимодействия носителей заряда с решеткой называется рассеянием. Понятие «сече-

ния рассеяния» используется для описания прохождения частиц большой энергии через вещество.

Частота соударений с атомами примеси определяется через концентрацию рассеивающих центров (легирующей примеси) N , их сечением σ_c и скоростью частицы v .

$$\frac{1}{\tau_c} = N\sigma_c v. \quad (4.7)$$

Сечение рассеяния σ_c определяется из дифференциального сечения рассеяния путем интегрирования по телесному углу $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$,

$$\sigma_c = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta, \quad (4.8)$$

где θ – угол отклонения направления движения частицы относительно первоначального направления.

Относительное изменение компоненты скорости частицы равно

$$\frac{v - v \cos\theta}{v} = 1 - \cos\theta. \quad (4.9)$$

Эта же величина определяет изменение соответствующей компоненты импульса (в приближении сохранения эффективной массы неизменной при соударении). Отсюда сечение можно посчитать, как

$$\sigma_c = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (4.10)$$

Также время релаксации импульса можно переписать следующим образом:

$$\frac{1}{\tau_c} = N\sigma_c v = Nv2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (4.11)$$

Для полученных выше формул в качестве определения одного из вариантов решения трехмерной задачи был выбран потенциал Флеминга [11]. Он описывается формулой

$$V(r') = \frac{-qN_{dep}r_2^2}{e\epsilon\epsilon_0} \times \left[\frac{-(r_1')}{r'} - \frac{(r')^2}{2(r_1')^3} - \frac{3}{2} \left(1 - \frac{1}{r_1'} - (r_1')^2 \right) \right], \quad (4.12)$$

для центральной отрицательно заряженной части и

$$V(r') = \frac{-qN_{dep}r_2^2}{e\epsilon\epsilon_0} \left[\frac{1}{r'} + \frac{(r')^2}{2} - \frac{3}{2} \right], \quad (4.13)$$

для области обедненной положительно заряженной примеси. Так как в целом дефект является квазинейтральным, то заряд внутри дефекта должен быть компенсирован зарядом внешней оболочки, то есть

$$\frac{4}{3}\pi r^3 N_{def} = \frac{4}{3}\pi (r_1^3 - r^3) N_a \quad (4.14)$$

где N_a – концентрация примеси, а N_{def} – концентрация дефектов внутри СКРД.

Размеры обедненной области можно посчитать исходя из концентрации примеси и оценки плотности дефектов, равной 10^{20} см^{-3} [12].

Результаты расчета для двух концентраций легирующей примеси приведены в табл. 2.

Таблица 2

Размер кластера радиационных дефектов при различной концентрации легирующей примеси

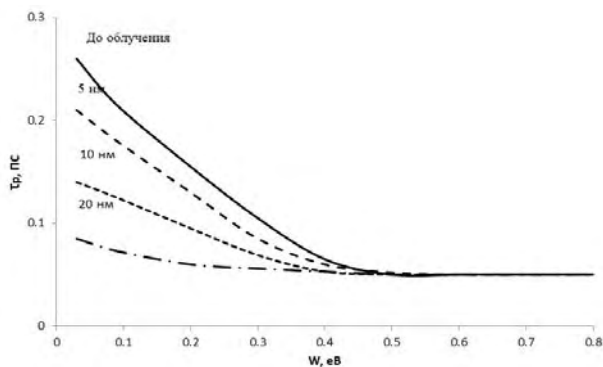
Концентрация примеси, см^{-3}	Размер отрицательно заряженного ядра кластера, нм		
	5	10	15
	Радиус кластера с учетом обедненной области, нм		
10^{16}	107	215	323
10^{17}	49	100	149
10^{18}	23	46	69
10^{19}	10	21	31

Как видно из табл. 2, при низких концентрациях легирующей примеси образование кластера приводит к возникновению достаточно большого объема с локально нескомпенсированным зарядом, что отрицательно влияет на подвижность основных носителей заряда. Только при концентрациях легирующей примеси порядка $10^{18} \dots 10^{19} \text{ см}^{-3}$ области КРД имеют небольшой размер.

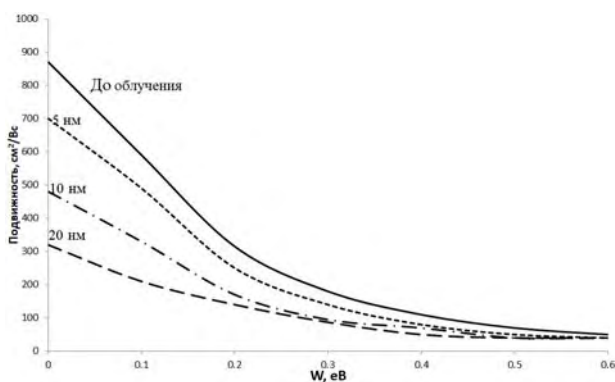
Для потенциала Флеминга были проведены расчеты подвижности и времен релаксации импульса для кремния с целью сравнения с результатами экспериментальных данных. Стоит заметить, что сравнение с экспериментом в данном случае не будет являться полностью корректным, ввиду отсутствия данных о значениях подвижности для горячих носителей заряда. В общем случае не существует прямых методов измерения подвижности, что приводит к невозможности разделения на носители, температура которых находится в равновесии с температурой кристаллической решетки, и «горячие» носители заряда. Это приводит к тому, что оцениваются именно доминирующие области, а как следствие, и СКРД.

Также представленные в литературе измерения для объемного материала проведены для низких концентраций легирующих примесей. Это приводит к тому, что область обедненной примеси вокруг кластера будет иметь достаточно большой объем и будет в доминирующем числе случаев определять конечные значения подвижности всего исследуемого образца. Исходя из этого, предлагается считать значение подвижности, полученной в ходе экспериментов подвижностью, определяемой доминирующим видом СКРД.

На рис. 6 представлены результаты расчета времени релаксации импульса и подвижности, рассчитанные для кремния, а также сравнение с экспериментальными данными, полученными для необлученного образца. Расчеты проводились для размеров ядра кластера, равным 5, 10 и 15 нм.



а



б

Рис. 6. Результаты расчета характеристик Si для модели СКРД Флеминга для различных размеров СКРД: а – время релаксации импульса, б – подвижность

Основной проблемой при подобной постановке задачи является верификация полученных результатов моделирования, так как данные получаемые при анализе опытных образцов не позволяют в полной мере выделить подвижность, связанную с «горячими» носителями.

Из полученных данных, рис. 6б, видно, что подвижность падает с увеличением размера ядра класте-

ра. Также данный расчет встроен в единую систему определения исходных данных для проведения трехмерного моделирования транспорта носителей при радиационном воздействии.

Литература

1. International roadmap for devices and systems: 2018 update. More Moore.
2. Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Перенос носителей заряда через тонкую базу гетеробиполярного транзистора при радиационном воздействии // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49, № 1. С. 71–75.
3. Ziegler J. F., Biersak J. P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. Pergamon, N.Y., 1996.
4. Коноплева Р. Ф., Остроумов В. Н. Взаимодействие заряженных частиц высоких энергий с германием и кремнием. М.: Атомиздат, 1975.
5. Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979.
6. Самарский А. А., Тихонов А. Н. Уравнения математической физики. М.: МГУ, 1999.
7. 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.
8. Khachiyan L. G. Rounding of Polytopes in the Real Number Model of Computation // Mathematics of Operations Research. 1996. Vol. 21, N 2. P. 307–320.
9. Аскеров Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках. М.: Наука, 1985.
10. Зеегер С. Физика полупроводников. М.: Мир, 1977.
11. Fleming R. M., Seager C. H., Lang D. V., Cooper P. J., Bielejec E., Campbell J. M. // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 102. 043711.
12. Cheng L. J., Lori J. Characteristics of neutron damage in silicon // Phys. Rev. 1968. Vol. 171, N 3. P. 856–862.