

ФИЛИАЛ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИТАРНОГО ПРЕДПРИЯТИЯ  
«РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ»  
«НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ИМЕНИ  
Ю.Е. СЕДАКОВА»

*На правах рукописи*

Скупов Антон Владимирович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ЛЕГИРОВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР  
«КРЕМНИЙ НА САПФИРЕ» И ОБЛУЧЕНИЯ НЕЙТРОНАМИ ГЕТЕРОСТРУКТУР С  
НАНООСТРОВКАМИ Ge(Si)**

01.04.10 – Физика полупроводников

Диссертация  
на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: Оболенский С.В., д.т.н., профессор

Нижний Новгород – 2019

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Список сокращений и условных обозначений .....	4
Введение.....	5
Глава 1. Гетероструктуры в современной полупроводниковой микроэлектронике .....	14
1.1 Гетероструктуры «кремний на сапфире».....	14
1.1.1 Особенности строения и свойств гетероструктур «кремний на сапфире».....	16
1.1.2 Влияние особенностей строения гетероструктур «кремний на сапфире» на протекание технологических процессов при изготовлении интегральных схем на их основе .....	23
1.1.3 Методы повышения структурного совершенства приборных слоев гетероструктур «кремний на сапфире» .....	30
1.1.4 Выводы к разделу 1.1. Постановка задач по гетероструктурам «кремний на сапфире» .	34
1.2 Наноразмерные гетероструктуры в современной полупроводниковой электронике .....	35
1.2.1 Особенности радиационных эффектов в наноразмерных гетероструктурах.....	38
1.2.2 Радиационные эффекты в наноразмерных гетероструктурах с самоформирующимися nanoостровками .....	40
1.2.3 Радиационные эффекты в гетероструктурах с самоформирующимися nanoостровками Ge(Si)/Si(001).....	41
1.2.4 Выводы к разделу 1.2. Постановка задач по гетероструктурам Ge(Si)/Si(001) .....	44
Глава 2. Моделирование имплантации ионов в гетероструктуры «кремний на сапфире».....	45
2.1 Влияние переходного слоя у границы раздела кремний/сапфир на параметры профилей пространственного распределения примесей и радиационных дефектов в гетероструктурах «кремний на сапфире» при ионной имплантации.....	45
2.1.1 Введение.....	45
2.1.2 Компьютерная программа TRIS .....	46
2.1.3 Модели переходного слоя у границы раздела кремний/сапфир.....	50
2.1.4 Результаты расчета профилей пространственного распределения имплантируемых ионов и радиационных дефектов с учетом переходного слоя, отличающегося по плотности и химическому составу от кремния .....	52
2.1.5 Модель влияние ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» на процессы, происходящие при ионной имплантации .....	59
2.1.6 Результаты расчета профилей пространственного распределения имплантируемых ионов и радиационных дефектов с учетом влияния ростовых дефектов кристаллической структуры .....	65

2.2 Моделирование процесса аморфизации приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» имплантацией ионов кремния или кислорода.....	68
2.3 Выводы к главе 2 .....	75
Глава 3. Моделирование диффузии легирующих примесей в гетероструктурах «кремний на сапфире» при постимплантационном отжиге .....	77
3.1 Введение.....	77
3.2 Модели диффузии легирующих примесей в гетероструктурах «кремний на сапфире».....	78
3.3 Результаты расчета профилей пространственного распределения бора в « <i>p</i> -кармане» <i>n</i> -канальных МОП/КНС транзисторов .....	84
3.4 Моделирование влияния режимов ионно-лучевого легирования « <i>p</i> -кармана» на образование канала токов утечки <i>n</i> -канальных МОП/КНС транзисторов вблизи границы раздела Si/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> при воздействии ионизирующих излучений .....	88
3.5 Оптимизация режимов операций технологического процесса изготовления КМОП/КНС БИС по результатам моделирования.....	94
3.6 Выводы к главе 3 .....	98
Глава 4. Образование радиационных дефектов в гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001) в каскадах атомных смещений .....	100
4.1 Введение.....	100
4.2 Компьютерная программа TRISQD.....	102
4.3 Моделирование процессов образования радиационных точечных дефектов и каскадного перемешивания в одиночном наноструктуре Ge(Si)/Si(001) .....	103
4.4 Моделирование процессов образования радиационных точечных дефектов в гетероструктурах с многослойным массивом самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001).....	106
4.5 Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства гетероструктур с многослойным массивом самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001).....	111
4.5.1 Зависимость от флюенса нейтронов.....	112
4.5.2 Поле упругих напряжений разупорядоченной области .....	113
4.5.3 Электрическое поле разупорядоченной области .....	115
4.5.4 Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства наноструктур... ..	117
4.6 Выводы.....	120
Заключение .....	123
Список литературы .....	127
Приложение А. Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.....	144
Приложение Б. Акт внедрения результатов диссертационной работы .....	146

**СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ**

(Б)ИС – (большие) интегральные схемы

ВИМС – масс-спектрометрия вторичных ионов

КМОП – комплементарный металл – окисел – полупроводник

КНС – кремний на сапфире

КНИ – кремний на изоляторе

КТ – квантовая точка

КЯ – квантовая яма

МОП – металл – окисел – полупроводник

НПЭ – неупругие потери энергии

ПАО – первичным атомом отдачи

ПДС – примесно-дефектный состав

РО – разупорядоченная область

РСД – радиационно-стимулированная диффузия

РТД – радиационные точечные дефекты (вакансии и междоузельные атомы)

СНА – смещений на атом

ФЛ – фотолюминесценция

УПЭ – упругие потери энергии

ЭЛ – электролюминесценция

ЭВМ – электронно-вычислительная машина

$E_d$  – пороговая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки

$E_{ии}$  – начальная энергия имплантируемых ионов

$d$  – толщина приборного слоя КНС

$N_d(x)$  – концентрация ростовых дефектов кристаллической структуры в КНС

$N_{at}$  – концентрация атомов

$k_B$  – постоянная Больцмана

$T$  – температура

$q$  – заряд электрона ( $1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл)

$\epsilon_0$  – абсолютная диэлектрическая проницаемость ( $8,85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м)

## ВВЕДЕНИЕ

### **Актуальность темы исследований и степень ее разработанности**

В современных приборах микро- и наноэлектроники применяется широкий спектр гетероструктур, образованных сопряжением материалов с различным кристаллографическим строением и физико-химическими свойствами. На кремнии – основном материале микроэлектроники – были созданы одни из первых гетероструктур «кремний на диэлектрике», в которых подложками служили либо монокристаллический сапфир («кремний на сапфире», КНС), либо аморфный слой диоксида кремния («кремний на изоляторе», КНИ). Применение этих гетероструктур изначально было обусловлено необходимостью обеспечения безотказного функционирования электронной компонентной базы радиоэлектронной аппаратуры, используемой в аэрокосмической технике, атомной энергетике и других отраслях, где требуется радиационная стойкость.

С развитием традиционных и разработкой новых технологий выращивания монокристаллов полупроводниковых соединений, подготовки из них подложек с высококачественной поверхностью, эпитаксиального наращивания гомо- и гетерослоев, легирования и других связано создание нового класса гетероструктур с уникальными физическими свойствами. Именно на гетероструктурах полупроводниковых соединений удалось воспроизводимо наблюдать квантоворазмерные эффекты и практически их реализовать путем формирования квантовых ям, нитей, точек и сверхрешеток. На основе твердых растворов AlGaAs/GaAs, InGaAs/GaAs, InGaAs/AlGaAs, GaN/AlN, Ge/Si созданы сверхвысокочастотные транзисторы, лазеры, фотоприемники и другие активные компоненты, составляющие элементную базу СВЧ-электроники и оптоэлектроники.

Анализ объективных причин отказов функционирования дискретных приборов и интегральных схем с гетеропереходами показывает, что основную роль в деградационных процессах играют локализованные вблизи межфазных границ в переходных областях дефекты кристаллической структуры и упругие напряжения. Важно отметить, что такие процессы происходят не только при эксплуатации в экстремальных условиях, но и во время проведения технологических радиационных воздействий, например, ионно-плазменном осаждении или травлении, ионно-лучевом легировании материалов, радиационной отбраковке и других.

Вопрос о том, как повлияет воздействие радиационных потоков на параметры конкретного вида гетеропереходов, на сегодня зачастую решается эмпирическим путем. И при переходе к гетероструктурам другого вида возобновляется вся трудоемкая процедура экспериментальных поисков. В качестве примера можно привести разработку технологии формирования гетероструктур КНС со «сверхтонким» приборным слоем. Технология включает

аморфизацию граничащей с сапфиром области исходной гетероструктуры с толщиной кремния 0,3 мкм (иногда 0,6 мкм) имплантацией ионов кремния или кислорода, твердофазную рекристаллизацию и утонения приборного слоя последовательным окислением и травлением диоксида кремния. Оценки качества получаемых таким образом приборных слоев показывают, что хотя оно и повышается по сравнению с исходным КНС, тем не менее, оказывается ниже, чем у объемного кремния. Так ширина кривой качания рекристаллизованного КНС больше, чем ширина дифракционных пиков от монокристаллического кремния. Значения подвижности носителей заряда и другие электрофизические характеристики рекристаллизованного КНС, измеренные на тестовых структурах, ниже, чем у объемного кремния. Эти экспериментальные факты свидетельствуют о сохранении значительной плотности дефектов кристаллической структуры в рекристаллизованных слоях КНС. Таким образом, актуальны разработка моделей и исследование с их помощью влияния неоднородностей по толщине приборного слоя распределения упругих напряжений и дефектов кристаллической структуры, характерных для гетероструктур КНС, на протекание радиационно-технологических процессов при изготовлении микросхем на их основе.

Еще сложнее ситуация с оценкой радиационной стойкости наноразмерных гетероструктур, которую пока невозможно прогнозировать из-за отсутствия универсальных моделей деградационных процессов. В настоящее время проводятся исследования в области создания радиационно-стойких оптоэлектронных приборов с многослойными массивами самоформирующихся наностроек Ge(Si)/Si(001) в качестве активной среды. Требуется теоретическая интерпретация экспериментальных данных, полученных в ходе исследований изменений параметров таких приборов после радиационных воздействий, и выявление механизмов деградации оптоэлектронных свойств наноразмерных гетероструктур.

### **Цель и задачи**

Цель работы состояла в исследовании с использованием математических моделей влияния реальной структуры эпитаксиальных гетероструктур «кремний на сапфире» на профили пространственного распределения примесей и радиационных дефектов при ионно-лучевом легировании и постимплантационном отжиге, а также моделировании процессов дефектообразования в гетероструктурах с наностройками Ge(Si)/Si(001) при нейтронном облучении.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Разработка математических моделей для расчета профилей распределения ионно-имплантируемых примесей и первичных радиационных дефектов в гетероструктурах «кремний на сапфире» с неоднородным по толщине приборного слоя фазовым составом и

кристаллическим строением.

2. Разработка математической модели и исследование влияния ростовых дефектов и упругих напряжений на диффузию легирующих примесей при постимплантационном отжиге гетероструктур «кремний на сапфире».

3. Разработка математической модели связи режимов ионно-лучевого легирования и диффузионного отжига при формировании «*p*-кармана» *n*-канального МОП/КНС транзистора с возникающим при воздействии ионизирующих излучений каналом токов утечки по межфазной границе между исток – стоковых областей прибора.

4. Математическое моделирование процессов образования радиационных дефектов, обуславливающих деградацию оптоэлектронных свойств многослойных гетероструктур с самоформирующимися наноостровками Ge(Si)/Si(001) после облучения быстрыми нейтронами.

### **Научная новизна**

1. Впервые предложены математические модели для расчета методом Монте-Карло профилей пространственного распределения имплантируемых ионов и первичных радиационных дефектов в гетероструктурах «кремний на сапфире», учитывающие неоднородности фазового состава и кристаллической структуры приборного слоя. Установлено, что переходная область между эпитаксиальным слоем и подложкой способствует перераспределению внедряемых ионов между кремнием и сапфиром. Показано, что наличие слабосвязанных атомов вблизи протяженных ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» приводит к возрастанию концентрации образующихся при ионной имплантации радиационных точечных дефектов.

2. Впервые предложена математическая модель для расчета профилей пространственного распределения легирующих примесей при термическом отжиге гетероструктур «кремний на сапфире», комплексно учитывающая влияние на диффузию примесей упругих напряжений и ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя. Показано, что рассчитанные по предложенной модели значения концентрации легирующих примесей на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя, отличаются от рассчитанных для совершенного недеформированного кремния при одинаковых режимах ионной имплантации и отжига.

3. Установлено, что образование канала токов утечки между стоком и истоком *n*-канальных МОП/КНС транзисторов по границе раздела кремний/сапфир зависит от величины заряда радиационных дефектов, образующихся в сапфире при глубоком легировании приборного слоя бором в процессе формирования «*p*-кармана». В результате воздействия ионизирующих излучений происходит захват положительного заряд на уровне радиационных дефектов, образующихся в сапфире вблизи границы раздела с кремнием. Это приводит к

обеднению основными носителями заряда (вплоть до инверсии типа проводимости) приборного слоя вблизи границы раздела кремний/сапфир и шунтированию стока и истока транзисторов.

4. Впервые предложена математическая модель и проведены расчеты методом Монте-Карло пространственного распределения первичных радиационных дефектов в многослойных гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001) при облучении быстрыми нейтронами. Получена зависимость количества наноструктур, в которых произошло образование радиационных точечных дефектов, от энергии и флюенса нейтронов.

5. Показано, что упругая деформация кристаллической решетки вокруг разупорядоченных областей (кластеров радиационных дефектов), образующихся в полупроводниках при облучении быстрыми нейтронами, на порядок величины меньше, чем определяющие оптоэлектронные свойства наноструктур деформации, обусловленные рассогласованием параметров кристаллических решеток наноструктур и окружающего их кремния. Установлена зависимость количества наноструктур, попадающих в область действия электрических полей разупорядоченных областей, от флюенса нейтронов.

#### **Теоретическая и практическая значимость работы**

1. Разработана компьютерная программа для численного моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных твердотельных гетерокомпозициях с внутренней структурой при движении в их объеме ускоренных ионов («TRIS»). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010617268 (Приложение А).

2. Разработана компьютерная программа для комплексного моделирования процессов ионно-лучевого легирования, высокотемпературного отжига и расчета распределения потенциала электрического поля в МОП структурах на основе гетероструктур «кремний на сапфире» с учетом особенностей ее строения и физических свойств.

3. Разработана компьютерная программа для моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных полупроводниковых гетероструктурах с нановключениями при корпускулярном облучении «TRISQD» (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017613086, Приложение А). Разработан, реализован и апробирован в программе «TRISQD» алгоритм расчета методом Монте-Карло пространственного распределения первичных радиационных дефектов в многослойных гетероструктурах с нановключениями в процессе образования каскадов атомных смещений. Вычислительная эффективность алгоритма обеспечивается периодическими граничными условиями для каскадов атомных смещений на границах расчетной области, размеры которой подбираются в соответствии со сформулированным критерием.

4. Рассчитаны профили пространственного распределения легирующих примесей бора и

фосфора в гетероструктурах «кремний на сапфире» с толщиной приборного слоя 0,3 мкм, формируемые методом ионной имплантации и высокотемпературного отжига, в режимах, соответствующих технологическим маршрутам изготовления КМОП/КНС БИС. Расчеты проведены по моделям, учитывающим влияние на процессы, происходящие при внедрении ионов переходного слоя вблизи границы кремний/сапфир и ростовых дефектов кристаллической структуры. Диффузионное перераспределение имплантированных примесей рассчитано по моделям, учитывающим влияние упругих напряжений и ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире». Рассчитаны формируемые имплантацией ионов кислорода или кремния профили аморфизации приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире», для последующей его твердофазной рекристаллизации, направленной на повышение структурного совершенства.

5. Показано, что образование канала токов утечки по границе раздела кремний/сапфир *n*-канальных МОП/КНС транзисторов при воздействии ионизирующих излучений обусловлено захватом положительного заряда уровнями радиационных дефектов в сапфире. Эти радиационные дефекты образуются в процессе формирования «*p*-кармана» при глубоком легировании приборного слоя толщиной 0,3 мкм ионами бора с энергией 100 кэВ и более.

6. Комплексное использование технологических экспериментов и результатов расчетов позволило оптимизировать режимы ионно-лучевого легирования в технологических маршрутах изготовления КМОП/КНС БИС серий 1825 и 1620 в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седякова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седякова»). Это обеспечило уменьшение величины статического тока потребления микросхем после воздействия стационарного ионизирующего излучения на два порядка, и увеличение процента выхода годных микросхем по параметру «статический ток потребления» в 5–6 раз.

### **Метод исследования**

Исследования выполнены методом математического моделирования. Для расчетов профилей пространственного распределения имплантируемых ионов легирующих примесей и возникающих при этом радиационных дефектов в гетероструктурах «кремний на сапфире» используется тот же алгоритм моделирования методом Монте-Карло движения ускоренных частиц в веществе, что и для расчета концентрации точечных радиационных дефектов в гетероструктурах с наноструктурами Ge(Si)/Si(001). В диссертации предложены модификации этого алгоритма и реализующие их компьютерные программы, дополнительно учитывающие специфические особенности строения и физических свойств исследуемых гетероструктур: ростовые дефекты кристаллической структуры в «кремний на сапфире» и линзообразные нановключения в гетероструктурах Ge(Si)/Si(001). Другие математические модели, используемые в работе, построены на численном решении дифференциальных уравнений в

частных производных методом конечных разностей по специально разработанным для этого компьютерным программам.

### **Степень достоверности результатов**

Достоверность представленных теоретических результатов подтверждается их воспроизводимостью, верификацией разработанных компьютерных программ сравнением результатов решения одинаковых тестовых задач с полученными по другим программам, сравнением с известными экспериментальными и теоретическими данными.

### **Личный вклад соискателя**

Автором самостоятельно разработаны компьютерные программы TRIS и TRISQD (получены свидетельства государственной регистрации программ для ЭВМ №2010617268 и №2017613086 соответственно), программа для комплексного моделирования процессов ионно-лучевого легирования, высокотемпературного отжига и расчета распределения потенциала электрического поля в МОП структурах на основе гетероструктур «кремний на сапфире» с учетом особенностей их строения и физических свойств. В разработке и апробации приведенных в диссертации математических моделей вклад автора является определяющим. Все расчеты и анализ их результатов проведены автором.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Возникающий в процессе формирования методом газофазной эпитаксии промышленных гетероструктур «кремний на сапфире» переходный слой вблизи границы раздела кремний/сапфир влияет на профили пространственного распределения ионов, имплантируемых с энергиями достаточными для внедрения в эту область гетероструктуры. Для гетероструктур «кремний на сапфире» с толщиной приборного слоя 0,3 мкм и переходным слоем толщиной 50 нм этот эффект проявляется при энергии имплантации ионов бора – 80 кэВ, фосфора – 180 кэВ, кислорода – 100 кэВ, кремния – 160 кэВ. Ионная имплантация с такими или большими значениями энергии приводит к увеличению ширины переходного слоя за счет внедрения ионов и образования радиационных дефектов в сапфире.

2. Ростовые дефекты кристаллической структуры и упругие напряжения в приборном слое гетероструктур «кремний на сапфире» обуславливают диффузионное перераспределение легирующих примесей. В результате концентрация примеси на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя отличается от концентрации в совершенном недеформированном кремнии при одних и тех же режимах имплантации и отжига.

3. Канал токов утечки между стоком и истоком *n*-канального МОП/КНС транзистора по границе раздела кремний/сапфир зависит от концентрации захваченного при воздействии ионизирующих излучений заряда радиационных дефектов, образующихся в сапфире при глубоком легировании приборного слоя бором в процессе формирования «*p*-кармана».

4. Показано, что при облучении гетероструктур с многослойными массивами наностроек Ge(Si)/Si(001) (размерами в плоскости основания 65–75 нм, высотой 10–12 нм и поверхностной плотностью  $10^{10}$  см<sup>-2</sup>) нейтронами с флюенсом  $10^{15}$  см<sup>-2</sup> радиационные точечные дефекты образуются в 3% наностроек при энергии нейтронов 1 МэВ, и в 18% наностроек при энергии нейтронов 8 МэВ.

5. Деформации кристаллической решетки, создаваемые разупорядоченными областями (кластерами радиационных дефектов), возникающими при облучении гетероструктур с многослойными массивами наностроек Ge(Si)/Si(001) быстрыми нейтронами, на порядок величины меньше, чем определяющие оптоэлектронные свойства наностроек деформации, обусловленные рассогласованием параметров кристаллических решеток наностроек и окружающего их кремния. Количество наностроек, попадающих в область действия электрических полей (радиусом 100–150 нм) разупорядоченных областей: 4% от их полного числа в гетероструктуре при флюенсе нейтронов  $10^{14}$  см<sup>-2</sup> и увеличивается до 40% при флюенсе  $10^{15}$  см<sup>-2</sup>.

#### **Апробация работы**

1. Основные результаты диссертации были представлены в форме устных и стендовых докладов на следующих международных и российских конференциях: X, XI, XII нижегородских сессиях молодых ученых (естественнонаучные дисциплины); IV, V международных молодежных научно-технических конференциях «Будущее технической науки»; IV конференции «Молодежь в науке»; XIII Всероссийской межвузовской конференции «Микроэлектроника и информатика – 2006»; 6-ой Международной конференции «Рост монокристаллов и тепломассоперенос»; XX Международной конференции по теории переноса; XXXVI, XXXVII, XLIX международных тулиновских конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами; III российском совещании «Кремний-2006», IV российской конференции «Кремний-2007», VII, VIII Международных конференциях «Кремний-2010», «Кремний-2011»; I, V, VII всероссийских конференциях и школах молодых ученых и специалистов «Физические и физико-химические основы ионной имплантации»; XVIII, XX, XXI международных симпозиумах «Нанопизика и наноплектроника».

2. По теме диссертации опубликовано 4 статьи в журналах, рекомендованных ВАК, индексирующихся в международных базах данных Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts: «Физика и химия обработки материалов», «Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники», «Поверхность: рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования», «Физика и техника полупроводников».

3. Получены 2 свидетельства государственной регистрации программ для ЭВМ (№2010617268 и №2017613086, Приложение А).

### **Внедрение научных результатов**

Основные научные результаты использованы в нескольких научно-исследовательских работах, выполненных в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седакова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седакова»): «Исследование спецстойкости БИС на КНС и КНИ структурах и путей ее повышения»; «Исследование и разработка технологии специспытаний имитационными методами»; «Исследование перспективных конструкций и технологических принципов создания радиационно-стойких приборов, в том числе в интегральном исполнении, на основе Si-SiGe», проводившейся в соответствии с Федеральной целевой программой «Развитие ЭКБ и радиоэлектроники» на 2008–2015 годы.

Полученные при выполнении диссертационного исследования данные использованы для оптимизации режимов ионно-лучевого легирования в технологических маршрутах изготовления КМОП/КНС БИС серий 1825 и 1620 микропроцессорного набора (подтверждено актом внедрения, приведенным в Приложении Б).

Компьютерная программа TRIS используется при проведении научно-исследовательских работ в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седакова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седакова»).

### **Список основных публикаций по теме диссертации**

*Статьи, опубликованные в журналах, включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени доктора и кандидата наук:*

1. Скупов, А.В. Особенности моделирования методом Монте-Карло профилей пространственного распределения внедряемых ионов и радиационных дефектов в гетерокомпозициях «кремний на сапфире» / А.В. Скупов, В.Д. Скупов, С.В. Оболенский // Физика и химия обработки материалов. – 2006. – №4. – С. 5–11.

2. Скупов, А.В. Моделирование процесса ионно-лучевого легирования гетерокомпозиции «кремний на сапфире» методом Монте-Карло с учетом влияния дислокационной структуры / А.В. Скупов, С.В. Оболенский // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2007. – №4. – С. 37–42. (Skupov, A.V. Monte-Carlo simulation of ion-beam doping of a silicon-on-sapphire heterostructure with regard to the dislocation structure / A.V. Skupov, S.V. Obolenskii // Journal of surface investigation: X-ray, synchrotron and neutron techniques. – 2007. – V. 1. – №2. – P. 207–211).

3. Скупов, А.В. Особенности моделирования диффузионных процессов в гетерокомпозициях «кремний на сапфире» / А.В. Скупов, В.Д. Скупов, С.В. Оболенский // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2007. – №4. – С. 45–49.

4. Скупов, А.В. Моделирование процессов образования радиационных дефектов в гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001) при облучении нейтронами / А.В. Скупов // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49. – №5. – С. 634–637 (Skupov, A.V. Simulation of radiation-defect formation processes in heterostructures with self-assembled Ge(Si)/Si(001) nanoislands under neutron irradiation / A.V. Skupov // Semiconductors. – 2015. – V. 49. – №5. – P. 621–624).

5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010617268. Программа для численного моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных твердотельных гетерокомпозициях с внутренней структурой при движении в их объеме ускоренных ионов («TRIS») / А.В. Скупов // Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. – 2010.

6. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017613086. Программа для моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных полупроводниковых гетероструктурах с нановключениями при корпускулярном облучении «TRISQD» / А.В. Скупов // Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. – 2017.

*Публикации в сборниках трудов конференций с международным участием:*

1. Скупов, А.В. Особенности моделирования профилей распределения примесей и дефектов в гетероструктурах при ионной имплантации / А.В. Скупов, В.К. Киселев, С.В. Оболенский, В.А. Перевоицков // Сборник трудов 6-ой международной конференции «Рост монокристаллов и тепломассоперенос» (ICSC-2005), Обнинск, 25–30 сентября 2005 г. – Обнинск: ГНЦ РФ ФЭИ, 2005. – Т. 2. – С. 513–519.

2. Скупов, А.В. Моделирование процессов каскадообразования в структурах с самоформирующимися островками Ge(Si) при корпускулярном облучении / А.В. Скупов // Труды XVIII Международного симпозиума «Нанопластика и нанопластика», Нижний Новгород, 10–14 марта 2014 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2014. – Т. II. – С. 626–627.

3. Скупов, А.В. Модель гашения фотолюминесценции наноструктур Ge(Si) кластерами радиационных дефектов / А.В. Скупов // Материалы XX Международного симпозиума «Нанопластика и нанопластика», Нижний Новгород, 14–18 марта 2016 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2016. – Т. 2. – С. 728–729.

4. Скупов, А.В. Модель деградации спектра фотолюминесценции самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001) при облучении быстрыми нейтронами / А.В. Скупов // Труды XXI Международного симпозиума «Нанопластика и нанопластика», Нижний Новгород, 13–16 марта 2017 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2017. – Т. II. – С. 722–723.

# ГЛАВА 1. ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ В СОВРЕМЕННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

## 1.1 Гетероструктуры «кремний на сапфире»

Полупроводниковый кремний является основным материалом твердотельной электроники на протяжении более чем шестидесятилетней истории ее развития [1, 2]. В то же время уже более 40 лет внимание разработчиков дискретных приборов и интегральных схем (ИС) привлекают структуры монокристаллического кремния на диэлектрических подложках. Изначально наиболее перспективным стал вариант изготовления комплементарных металл – окисел полупроводник (КМОП) ИС на основе гетероэпитаксиальных структур кремния на сапфире, так называемая технология КМОП/КНС. Ее реализация обеспечила следующие преимущества ИС по сравнению с изготовленными на объемном кремнии [3–7]:

- полная изоляция элементов ИС друг от друга диэлектрической подложкой;
- малая толщина приборного слоя ( $\leq 1$  мкм) позволяет создавать стоковые и истоковые области полевых транзисторов протяженностью до границы раздела кремний-сапфир, что уменьшает до 25 раз их емкости;
- отсутствие необходимости применения изолирующих *p-n* переходов устраняет их паразитную емкость и сопротивление при прохождении сигналов, что повышает быстродействие в 1,5–2 раза, и позволяет уменьшить напряжение питания ИС до 1,5 В;
- область канала МОП транзистора не подключена к электрическому контакту («плавающая»), что исключает необходимость подавать на подложку смещение, влияющее на пороговые напряжения транзисторов;
- обеспечивается плотность компоновки в 1,5–3 раза выше;
- сокращается количество технологических операций при изготовлении ИС;
- формирование активных элементов в тонком слое кремния (на полностью изолированных островках) и сквозная (до границы раздела с сапфиром) вертикальная геометрия *p-n* переходов малой площади обеспечивает бóльшую радиационную стойкость, из-за малых ионизационных токов, а диэлектрическая изоляция препятствует возникновению паразитных транзисторных структур;
- прозрачность сапфира в оптическом диапазоне длин волн делает возможным применение структур КНС в оптоэлектронике, в качестве основы для более сложных структур SiGe/Si, обладающих оптоэлектронными свойствами.

Перечисленный ряд достоинств технологии изготовления ИС на КНС стимулировал интерес исследователей и разработчиков к ней, начиная с 1970-х годов. Не смотря на

сложности, связанные с высокой плотностью структурных дефектов в приборном слое, его загрязненностью фоновыми примесями, на порядок меньшей, по сравнению с объемным кремнием, подвижностью носителей заряда, и другими недостатками, усилиями таких фирм-разработчиков как GEC Pleassey Semiconductor, GE/RCA Solid State, Rockwell (США), Harris Semiconductor (Великобритания) к концу 1980-х годов был создан широкий спектр микроэлектронных устройств (микропроцессоров, микросхем памяти, мультиплексоров, усилителей и др.) на основе структур КНС с толщиной приборного слоя 0,6 мкм и топологическими нормами проектирования 1,25–3 мкм [7]. Однако относительная дороговизна, даже при серийном производстве, ограничила область применения этих микросхем в аппаратуре военной и космической техники, а также ядерной энергетике, где достоинства этого единственного на тот момент отработанного и коммерчески доступного варианта технологии «кремний на диэлектрике» были востребованы в полной мере.

Развитие технологии КМОП/КНС в направлении уменьшения топологических размеров элементов и увеличения плотности упаковки потребовало применения гетероэпитаксиальных структур с толщиной приборного слоя менее 0,3 мкм, а, значит, и повышения его структурного совершенства [7]. Для этого эпитаксиальный слой кремния после газофазной эпитаксии подвергался одношаговой или двухшаговой твердофазной рекристаллизации после аморфизации имплантируемыми ионами кремния. Этот подход позволил снизить плотность структурных дефектов в приборном слое, улучшить характеристики ИС и увеличить выход годных. В 1999 году фирма Peregrine (США) завершила разработку технологии повышения качества ультратонких (0,1 мкм) слоев КНС, названную «UTSi» («Ultra Thin Silicon»), что позволило изготавливать КМОП/КНС БИС с топологическими нормами 0,25 мкм [8].

В настоящее время технология изготовления КМОП БИС на структурах КНИ, где в качестве диэлектрической подложки используется слой диоксида кремния, рассматривается как альтернатива технологии КМОП/КНС. Однако, последняя сохраняет лидерство по стойкости ИС к воздействию дестабилизирующих факторов. Для сравнения в таблице 1.1 приведены максимальные уровни радиационных воздействий, при которых ИС различного функционального назначения зарубежного производства, сохраняют работоспособность [8, 9]. Как видно из приведенных в таблице 1.1 данных КМОП/КНС БИС сохраняют работоспособность при воздействии на порядок большего потока нейтронов, чем ИС на КНИ, по остальным же параметрам отличие не велико. Однако, как видно из таблицы, радиационная стойкость КМОП/КНС БИС по ряду критериев на порядок выше, чем у КМОП БИС на объемном кремнии. Применение структур «UTSi» КНС, обеспечило возможность изготовления КМОП/КНС БИС, сравнимых по характеристикам с ИС на объемном кремнии и структурах КНИ [8, 10]. К тому же, «бесконечно» толстая диэлектрическая подложка из сапфира открывает

новую сферу применения для этих гетероструктур – радиочастотные ИС для современных портативных беспроводных устройств. На данный момент КНС являются наиболее подходящим для этого материалом – важным преимуществом подложек КНС перед КНИ является высокая теплопроводности сапфира, обеспечивающая эффективный отвод тепла от объема активных элементов, так как с уменьшением топологических размеров разогрев становится существенным фактором, влияющим на работу ИС.

Таблица 1.1 – Радиационная стойкость КМОП/КНС и КМОП/КНИ ИС [8, 9]

Фактор	КМОП на объемном кремнии	КМОП/КНС	КМОП/КНИ
Накопленная доза, рад (Si)	$3 \cdot 10^5$	$10^6$	$10^6$
Уровень бессбойной работы, рад(Si)/с	$10^9$	$10^{11}$	$10^9-10^{11}$
Мощности дозы импульса гамма-излучения, рад(Si)/с	$10^{11}-10^{12}$	$10^{12}$	$10^{11}-10^{12}$
Поток нейтронов, см <sup>-2</sup>	$10^{14}$	$10^{15}$	$10^{14}$
Вероятность единичных сбоев, сбой/(бит/сутки)	$10^{-8}-10^{-11}$	$10^{-10}$	$10^{-10}$

В России технология КМОП/КНС БИС развивалась параллельно с зарубежной до начала 1990-х годов [8]. Достигнутые значения топологических норм проектирования составляют 3–4 мкм на структурах КНС с толщиной приборного слоя 0,6 мкм и диаметром 76–100 мм. Серийно изготавливаемые микропроцессорный комплект, схемы памяти, аналого-цифровые и цифро-аналоговые преобразователи, счетчики импульсов и другие по характеристикам не уступают зарубежным аналогам. В настоящее время существует необходимость разработки новых поколений ИС с топологическими нормами проектирования  $\leq 3$  мкм на подложках КНС диаметром 100–150 мм и толщиной приборного слоя  $\leq 0,3$  мкм [11, 12]. Для этого потребуется решение ряда принципиально новых задач при создании как исходных структур КНС, так ИС на их основе. Это возможно при всестороннем и комплексном изучении изменений свойств приборного слоя гетероструктур КНС, происходящих при технологических воздействиях [5]. При этом важным аспектом, является обеспечение требуемых уровней радиационной стойкости КМОП/КНС БИС.

### 1.1.1 Особенности строения и свойств гетероструктур «кремний на сапфире»

Для изготовления структур кремния на диэлектрической подложке идеальным материалом был бы монокристаллический диэлектрик, обладающий кристаллографическими

параметрами, химическими и термомеханическими свойствами близкими свойствам кремния [6]. Должны также существовать технологии его выращивания в промышленных масштабах и получения пластин требуемого диаметра и качества. В итоге комплекса исследований в 1970-х годах наиболее подходящим материалом был признан сапфир [3, 6]. В таблице 1.2 приведены основные физические свойства кремния и сапфира [5]. Как видно из приведенных данных материалы отличаются по кристаллической структуре, величинам параметров решеток, химическому составу, коэффициенту термического линейного расширения. Эти факторы обуславливают комплекс проблем, требующих решения при изготовлении ИС на основе гетероструктур КНС.

Таблица 1.2 – Основные физические свойства кремния и сапфира [3–5, 13]

Параметр	Кремний	Сапфир
Кристаллическая структура	типа алмаза	ромбоэдрическая
Постоянная решетки, нм	a = 0,543	a = 0,476 c = 1,299
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	2330	3980
Модуль упругости, ГПа	171,8	470 для (0001)
Температура плавления, °С	1412	2030
Теплопроводность (23°С), Вт/м·К	125,6	272,1
Коэффициент термического линейного расширения, 10 <sup>-6</sup> /°С	3,59 (25 – 800 °С)	8,40 (60°С), ось с
Диэлектрическая проницаемость	11,7 (500 Гц – 30 МГц)	9,4 (ось с) (100 Гц – 100 кГц)

В настоящее время наибольшее распространение получила технология формирования структур КНС методом газофазной эпитаксии в процессе пиролитического разложения моносилана [3, 4]:  $\text{SiH}_4$  (газ)  $\rightarrow$  Si(тв.) + 2H<sub>2</sub> (газ). Рост пленки кремния происходит в две стадии: рост островковых зародышей и их коалесценция с образованием сплошного слоя. Процесс коалесценции очень чувствителен к скорости осаждения кремния и температуре. При температуре 930–960°С обеспечиваются оптимальные условия: минимальные дефектность приборного слоя и степень его загрязнения фоновыми примесями из парогазовой среды и продуктами ее взаимодействия с сапфировой подложкой [3].

Коалесценция островков и образование сплошного слоя происходят при его толщине 0,1–0,2 мкм. Так как островки изначально разориентированы, этот процесс сопровождается возникновением в объеме эпитаксиального слоя микродвойников и дефектов упаковки с плотностью у границы раздела кремний/сапфир 10<sup>9</sup>–10<sup>10</sup> см<sup>-2</sup>. Еще один тип дефектов – дислокации несоответствия, возникающие на границе раздела из-за различия параметров кристаллических решеток пленки и подложки. Теоретические оценки показали, что их

линейная плотность составляет  $10^6 \text{ см}^{-1}$ , а по данным электронной микроскопии до  $3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$  [14].

Охлаждение гетероструктур КНС от температуры эпитаксии до комнатной сопровождается пластической деформацией приборного слоя, обусловленной различием коэффициента термического линейного расширения пленки и подложки [3]. С этим процессом связано образование наблюдавшихся экспериментально дислокационных скоплений в виде хаотически переплетенных клубков. Их плотность у границы раздела сопрягающихся материалов достигает значения  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Характерное распределение линейной плотности структурных нарушений в КНС представлено на рисунке 1.1 [15]. В этой работе аппроксимацией экспериментальных данных получена аналитическая зависимость плотности дефектов кристаллической структуры в КНС  $N_d(z)$  от расстояния до границы раздела  $z = d - x$ ,  $d$  – толщина приборного слоя.

$$N_d(z) = \begin{cases} 1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}, & z \leq 440 \text{ \AA}, \\ 1,3 \cdot 10^{11} \cdot z^{-1,7} \text{ см}^{-1}, & 440 \text{ \AA} < z \leq 2400 \text{ \AA}, \\ 3,1 \cdot 10^7 \cdot z^{-0,63} \text{ см}^{-1}, & z > 2400 \text{ \AA}. \end{cases} \quad (1.1)$$

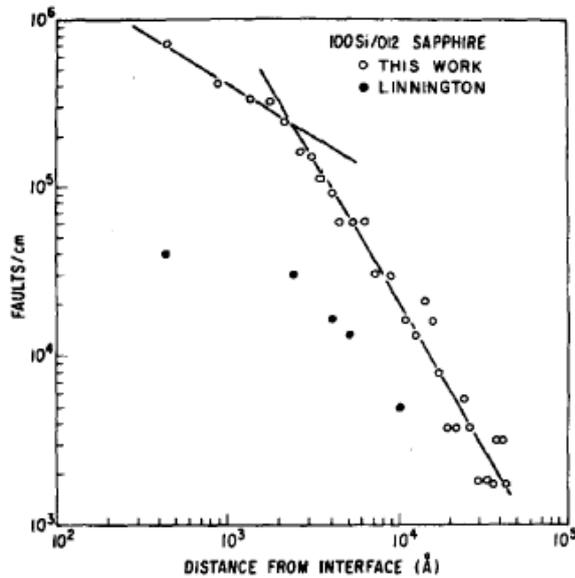


Рисунок 1.1 – Зависимость линейной плотности структурных дефектов от расстояния до границы раздела  $(100)\text{Si}/(01\bar{1}2)\text{Al}_2\text{O}_3$  [15]

На образование ростовых дефектов кристаллической структуры значительное влияние оказывает подготовка рабочей поверхности подложки (шероховатость, частицы полировочного абразива, инородные включения, газовые пузырьки, загрязняющие примеси, структурные дефекты и остаточные напряжения) и взаимная ориентация кристаллических решеток кремния и сапфира [16, 17]. В [17] обнаружено, что шероховатость поверхности сапфира в виде

периодических плато протяженностью около 35,0 нм, оканчивающиеся ступенями высотой около 0,4 нм, препятствуют формированию правильного расположения атомных слоев кремния на значительном расстоянии от границы раздела. Края ступеней выступают как концентраторы напряжений и в приборном слое, и в приграничной области сапфира, релаксация которых происходит через образование структурных дефектов.

Напряжения в гетероструктурах КНС при превышении ими некоторого предельного значения снимаются через образование структурных дефектов в процессе эпитаксии и охлаждения. Остаточные напряжения сжатия, согласно теоретическим оценкам [3], для эпитаксиальных слоев толщиной  $\leq 1$  мкм латерально однородны и достигают 0,6 ГПа. Определенные методом рентгеновской дифрактометрии значения сжимающих деформаций на границе раздела кремний/сапфир для структур  $(001)\text{Si}/(01\bar{1}2)\text{Al}_2\text{O}_3$  с толщиной приборного слоя 0,1 мкм составляют  $5 \cdot 10^{-3}$  [18]. Авторы этой работы отмечают, что характер распределения деформаций аналогичен при переходе от образца к образцу, по крайней мере, для КНС с толщинами приборных слоев 0,1 и 0,25 мкм. Величина сдвиговых деформаций достигает максимального значения  $(2-3) \cdot 10^{-2}$  в точке контакта кремний – сапфир – воздух и убывает при удалении от этой точки, как вдоль границы раздела, так и перпендикулярно к ней [19].

Среди примесей, загрязняющих приборный слой КНС в процессе выращивания, наиболее сильное влияние на его электрофизические свойства оказывает алюминий, диффундирующий из сапфира [3–5, 17, 19, 20]. Такое автолегирование происходит в результате химической активности сапфировой подложки по отношению к кремнию, а также к водороду, применяемому в при эпитаксии в качестве транспортного газа. В кристаллической решетке кремния атомы алюминия могут занимать как междоузельные положения, так и замещать атомы матрицы в узлах, а также образовывать обладающие различной электрической активностью комплексы Al-Al, Al-Si, Al-вакансия кремния [21, 22]. Алюминий в кремнии проявляет акцепторные свойства и его перераспределение по приборному слою может приводить к частичной или полной компенсации донорных примесей. Так, в умеренно легированном КНС *n*-типа проводимости, на поверхности приборного слоя и на границе с сапфиром при отжиге в водороде, могут образовываться области *p*-типа [3], а при окислении КНС в приповерхностной области происходит уменьшение концентрации дырок из-за диффузии алюминия к границе слоя окисла. Таким образом, присутствие алюминия является основной причиной термической нестабильности электрофизических свойств КНС. В то же время тщательным подбором температуры, скорости эпитаксии и последующих термообработок можно уменьшить этот эффект [3, 20]. Как правило, алюминий неоднородно распределен по объему эпитаксиального слоя (рисунок 1.2) [23], а локализуется в примесных

атмосферах вокруг структурных дефектов, что обуславливает дополнительное рассеяние носителей заряда и уменьшение их подвижности [24, 25].

Автолегирование приборного слоя кислородом из сапфировой подложки также приводит к образованию кислородосодержащих комплексов с кремнием и другими примесями. Их энергии активации, концентрации и сечения захвата носителей зависят от типа проводимости, термической предыстории и химической активности газовой среды, в которой осуществлялись термообработки КНС [24]. В зависимости от перечисленных условий атомы кислорода могут образовывать несколько состояний  $\text{SiO}_x$  ( $x = 2-6$ ), некоторые из которых могут быть электрически активны (так называемые, «термодоноры»). Электрическая активность кислорода в кремнии может быть обусловлена также его взаимодействием с вакансиями и атомами металлических акцепторных примесей (Cu, Al, Fe и других) [25], присутствующих и в КНС.

В процессе газовой эпитаксии КНС на этапе образования островков, поверхность сапфира, где их еще нет, разрушается химическим взаимодействием с компонентами газовой фазы (водородом и кремнием). Высвобождающиеся таким образом атомы алюминия и кислорода, встраиваются в растущие островки [3–5], что приводит к образованию на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  *переходного слоя* – области, свойства которой отличаются от свойств объемного кремния из-за высокой концентрации структурных дефектов и выделений новой фазы химических соединений алюминия, кислорода и кремния [3–5, 17, 20, 23, 24, 26–30]. Представление о распределении фоновых примесей попавших в слой кремния из сапфира в ходе эпитаксии дает рисунок 1.2, на котором представлены результаты Оже-анализа химического состава приборного слоя толщиной 0,6 мкм структуры КНС [23]. По данным работ [23, 27] переходный слой  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  представляет собой область протяженностью 30 нм и более, с аморфной или поликристаллической структурой кремния и алюмосиликатных соединений. Согласно [27] он имеет структуру мозаичного монокристалла. Авторы работы [23] объясняют полученные результаты исследований влияния термообработок на заряд границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ , предполагая аморфное строение переходного слоя. К такому же выводу пришли авторы работы [28], исследовавшие спектральные характеристики отражения от КНС. В работе [26] переходный слой  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  полученных по стандартной промышленной технологии пластин КНС с толщиной приборного слоя 1 мкм исследовался методами эллипсометрии и дифракции быстрых электронов при послойном химическом травлении слоя кремния. Сделан вывод, что переходный слой толщиной не менее 20–30 нм состоит преимущественно из алюмосиликатов со значительным включением аморфной фазы, мозаичных и поликристаллов кремния. При этом обнаружено, что соотношение между аморфной и поликристаллическими фазами кремния изменяется не только от образца к образцу, но и в различных областях одной пластины. Экспериментальные результаты исследования поляризации границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  КНС с толщиной

приборного слоя 0,6 мкм авторы [29] интерпретируют как существование в этой области структуры слоя толщиной не менее 50 нм, обладающего диэлектрическими свойствами. В [30] экспериментально показано, что толщина переходного слоя, отличающегося по своим оптическим свойствам, регистрируемым методом эллипсометрии, современных отечественных структур КНС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм составляет 75–95 нм, то есть достигает трети его толщины.

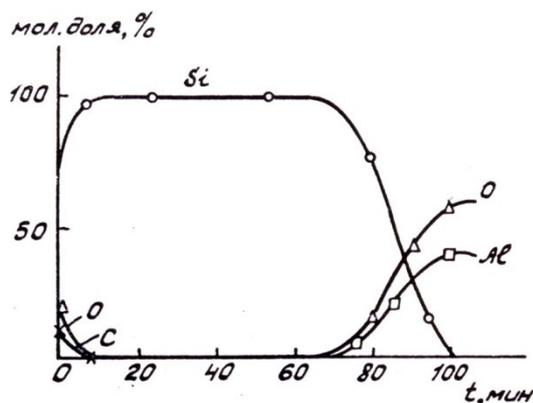


Рисунок 1.2 – Распределение основных химических компонентов структуры КНС с приборным слоем толщиной 0,6 мкм в зависимости от времени ионного травления при Оже-анализе [23]

В [17] методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и электронной Оже-спектроскопии исследовались переходные слои гетероструктур КНС с толщиной приборного слоя 0,1 мкм. Анализ экспериментальных спектров показал, что в переходном слое наблюдается смесь соединений  $Al_2SiO_5$  (силлиманита или муллита),  $Al_2O_3$ ,  $SiO_2$  с относительным содержанием компонентов 59,8%, 20,6% и 17,4% соответственно. Толщина слоя, содержащего алюмосиликаты, по результатам ионного травления КНС составляет 10% толщины приборного слоя. В то же время визуализация границы  $Si/Al_2O_3$  с помощью растровой электронной микроскопии показала, что граница резкая и плоская, с четкими атомными рядами кремния при наличии разориентированных друг относительно друга монокристаллических блоков [17]. Аналогичные результаты с помощью просвечивающей электронной микроскопии были получены и ранее [14–16]. В работах [15–17] вблизи границы  $Si/Al_2O_3$  наблюдалась высокая плотность структурных дефектов (дислокаций несоответствия, микродвойников, границ зерен).

Исследования различных параметров КНС, используемых в качестве подложек для изготовления ИС, показали сильную неоднородность их значений по площади пластин, от пластины к пластине из состава одной партии и разных партий [20, 30, 31–39]. Это связано с неоднородностью и случайным характером распределения примесно-дефектного состава (ПДС) в приборном слое и, особенно, в переходном слое у границы раздела  $Si/Al_2O_3$ . В работе [32]

установлена сильная дисперсия по площади поверхности КНС показателя преломления и коэффициента поглощения оптического излучения лазерного эллипсометра, а в [39] – интенсивности рассеяния ультрафиолетового излучения, характеризующей дефектность приборного слоя. Неоднородности распределения дефектов и примесей по глубине и по площади пластины КНС обуславливают и соответствующую пространственную неоднородность ее электрофизических свойств, а также отличие их от значений, характерных для объемного кремния [3–5, 19, 20, 31, 34–38]. Вариации средних по толщине слоя удельного сопротивления и подвижности носителей заряда в разных точках по поверхности КНС могут превышать 200% [20, 31]. Вариации также характерны для слоевого сопротивления непосредственно вблизи границы Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, измеренного по тангенсу угла диэлектрических потерь на сверхвысоких частотах [38]. В работе [33] обнаружено, что скорость роста окисла на поверхности приборного слоя, а также уровень снижения его дефектности при твердофазной рекристаллизации, неоднородны и невоспроизводимы вследствие неоднородности распределения дефектов кристаллической структуры в нем. Случайно распределенные локальные неоднородности приборного слоя обуславливают и разброс (до 50%) токов одинаковых транзисторов КМОП/КНС БИС [36], а также степень радиационной деградации электрических параметров микросхем одной партии [37].

Разупорядочение кристаллической структуры обуславливает высокую плотность локализованных энергетических состояний для носителей заряда в запрещенной зоне приборного слоя вблизи границы Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [24]. Перераспределение носителей заряда между состояниями и зонами в условиях термодинамического равновесия приводит к появлению вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> области пространственного заряда [23, 24, 40]. Перенос носителей под действием электрического поля при работе МОП/КНС транзисторов создает дополнительный канал токов утечки между стоком и истоком [30, 37, 39]. Преобладающий механизм прохождения тока в такой системе связан с инжекцией носителей заряда из контактных областей и их переноса с участием ловушек в переходном слое, в качестве которых выступают локализованные состояния («прыжковый» механизм проводимости) [40, 41]. Проводимость такого канала токов утечки будет зависеть от плотности локализованных состояний и инжекционных характеристик контактов.

Специфика строения гетероструктур КНС проявляется и в их поведении при радиационных воздействиях [24, 42]. В [43] методом низкотемпературной люминесценции изучались особенности радиационного дефектообразования при облучении КНС гамма-квантами (с энергией  $E = 1,25$  МэВ), электронами ( $E = 3$  МэВ), альфа-частицами ( $E = 5$  МэВ), а также ионами гелия, аргона, неона и криптона ( $E = 20–300$  кэВ). Было обнаружено, что протяженные дефекты (микродвойники, дефекты упаковки, дислокации), а также алюминий

активно участвуют в процессах рекомбинации неравновесных носителей заряда. К тому же облучение КНС гамма- и рентгеновскими квантами приводит увеличению плотности поверхностных состояний на границе Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, и образованию положительного заряда в сапфире [43]. Высокий уровень остаточных напряжений и большая плотность структурных дефектов в гетероструктурах КНС являются причинами развития в них релаксационных процессов естественного старения и деградации параметров как исходных пластин при хранении, так и приборов на стадиях их изготовления, испытания, функционирования в нормальных или экстремальных условиях [44]. Эти процессы связаны с диффузионно-дрейфовой перестройкой компонентов ПДС под действием градиентов напряжений внутренних упругих и электрических полей, а также внешних факторов, генерирующих неравновесные собственные точечные дефекты и упругие волны. Наиболее интенсивно релаксационные явления протекают при облучении КНС корпускулярным и фотонным излучениями с энергиями как больше, так и меньше пороговой энергии смещения атомов из узлов кристаллической решетки ( $E_d$ ). Внешние воздействия вызывают перестройку ПДС в КНС, проявляющуюся в изменении их макропараметров (показателя преломления и микроморфологии поверхности). Эти явления наблюдались при облучении КНС рентгеновскими квантами с энергией как выше пороговой (10 МэВ), так и с «допороговой» (75 кэВ) [45, 46], электронами ( $E = 10$  МэВ) [47], нейтронами с энергией до 8 МэВ, а также ультразвуковых обработках [32]. Изменение указанных характеристик КНС происходило при воздействии, как со стороны эпитаксиального слоя, так и со стороны подложки. Одно из возможных объяснений, обнаруженных в этих работах явлений – перестройка компонентов ПДС под действием упругих волн, возникающих при указанных видах воздействий [44]. Как показали оценки [45], амплитуда упругих волн достаточно велика (до 10 ГПа) для консервативной и неконсервативной перестройки дислокационной системы в КНС, что и проявляется в изменении микрорельефа поверхности.

### **1.1.2 Влияние особенностей строения гетероструктур «кремний на сапфире» на протекание технологических процессов при изготовлении интегральных схем на их основе**

Формирование элементов КМОП/КНС БИС включает в себя создание в исходных пластинах кремния областей с требуемым типом электропроводности и удельным сопротивлением, наращивание слоев окисла и нанесение металлических межсоединений [48, 49]. Для этого применяются следующие базовые технологические приемы: окисление, фотолитография, ионно-лучевое легирование с постимплантационным отжигом и

диффузионной «разгонкой» примеси, травление, напыление тонких металлических пленок. Влияние структурных дефектов, упругих напряжений и электрических полей, высокой концентрации фоновых примесей на протекание процессов, сопровождающих указанные технологические воздействия в кремнии, широко изучалось экспериментально и теоретически. Большинство работ в этом направлении выполнено на объемном материале, однако, полученные в них результаты могут быть адаптированы и для гетероструктур КНС.

В настоящее время в КМОП технологии широко распространен метод легирования кремния имплантацией ускоренных до заданной энергии ионов примесей [24, 50–52]. Он позволяет создавать распределения с хорошей степенью однородности и точным контролем уровня легирования, формировать самосовмещенный затвор МОП транзисторов, уменьшая таким образом паразитные емкости в них, управлять пороговыми напряжениями легированием области канала [51]. Этим методом формируются «*p*-карманы» на подложках *n*-типа проводимости для КМОП структур. Побочный негативный эффект ионной имплантации заключается в образовании большого количества радиационных дефектов. Для их устранения, а также диффузионной «разгонки» внедренных атомов примеси и их перевода в электрически активное состояние в кристаллической решетке, обязательно проведение постимплантационного отжига при температуре более 800°C [51, 52]. В процессе отжига в полупроводниковом материале происходят различные квазихимические реакции первичных радиационных точечных дефектов (РТД) – вакансий и междоузельных атомов, – как между собой, так и с атомами примесей, дислокациями, внутренними и внешними поверхностями [52–54]. Устранение радиационных нарушений и полный их отжиг достигается только после внедрения доз ионов около  $10^{13}$  см<sup>-2</sup> [52]. При внедрении доз ионов более  $10^{14}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup>, используемых в КМОП/КНС технологии, полностью устранить дефекты в кремнии не удастся даже длительным отжигом при температуре более 1000°C. Остаточные дефекты представляют собой дислокационные петли, образующиеся при коалесценции вакансий и междоузельных атомов, либо сетки дислокаций. Возникновение последнего типа дефектов обусловлено релаксацией напряжений в кристаллической решетке, возникающих из-за большой концентрации примесных атомов в ней. Неотожженные дефекты могут быть причиной увеличения обратных токов *p-n* переходов, снижения пробивного напряжения, уменьшения времени жизни неосновных носителей заряда [51].

Дефекты исходной структуры кристаллов (включения второй фазы, дислокации, границы зерен и т.п.), образовавшиеся, например, при их выращивании, оказывают существенное влияние на процессы дефектообразования при ионно-лучевом легировании электрической активации внедренных примесей во время отжига нарушенных слоев. Выделяют несколько аспектов этого влияния [52–57]:

– на этапе развития каскадов атомных смещений дислокации в облучаемом материале увеличивают эффективность его радиационного повреждения, так как из-за деформации кристаллической решетки, вызываемой этими дефектами, межатомные связи напряжены и величина  $E_d$  меньше, чем в бездефектном материале;

– дислокации – стоки для РТД, притягивающие их посредством полей упругих напряжений;

– в примесных атмосферах дислокаций происходит образование комплексов радиационных дефектов с атомами примесей, в результате чего изменяется скорость их введения;

– при отжиге происходит рекристаллизация разупорядоченного облучением слоя на лежащем более глубоко от облучаемой поверхности, поэтому наследуется его дефектная структура.

Тонкий приборный слой КНС имеет две границы раздела: с естественным или искусственно выращенным диоксидом ( $\text{SiO}_2$ ) и с сапфиром. На гетерограницах происходит реконструкция приповерхностных областей обеих фаз, перестройка химических связей и образование новых химических соединений [58]. Обнаружено, что подвижные РТД, возникающие при облучении, взаимодействуют с полем упругих напряжений, действующим в приграничном слое, в результате чего он может играть роль стока для них [52, 58]. В [59] на примере гетероструктуры  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , показано, что в зависимости от знака деформаций, зависящего от способа окисления, у границы раздела при облучении происходит накопление либо вакансий, либо междоузельных атомов. Реакции между дефектами приводят к их аннигиляции или ассоциации в более сложные комплексы вплоть до образования аморфных слоев. Вблизи границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  КНС, по-видимому, происходят аналогичные процессы, но с большей интенсивностью, так как вблизи нее уровень упругих напряжений и плотность структурных нарушений выше, чем вблизи границы  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ . Таким образом, на спектр, эффективность введения и отжига комплексов дефектов при облучении влияют уровень упругих напряжений, дислокации и двумерные дефекты, состав их примесных атмосфер, границы раздела, аморфные и разупорядоченные слои, а также вид, концентрация и положение в кристаллической решетке легирующих и фоновых примесей [52, 60].

При ионной имплантации имеют место эффекты каналирования и радиационно-стимулированной диффузии (РСД) внедряемой примеси, что приводит к образованию «хвостов» на профилях ее распределения. В КМОП технологии изготовления ИС влияние эффекта каналирования целенаправленно подавляется путем разориентации пучка ионов относительно главных кристаллографических направлений кремния и легированием через слой аморфного  $\text{SiO}_2$ , придающего случайный характер направлениям внедрения ионов [50–52, 60].

Эти меры создают условия, при которых в режиме каналирования движется лишь около 1% внедряемых ионов [52], поэтому профили внедренных примесей имеют форму близкую к гауссовскому распределению. Избыточная концентрация РТД, превышающая термодинамически равновесную, увеличивает диффузионные потоки примесей, как в процессе имплантации, так и при постимплантационном отжиге, когда происходит высвобождение простейших подвижных дефектов при распаде и перестройке комплексов.

Профили пространственного распределения легирующих примесей бора, фосфора, мышьяка, имплантированных в приборный слой толщиной 0,3–0,6 мкм КНС, и их перераспределение в процессе постимплантационного отжига (в некоторых случаях совмещенного с окислением поверхности приборного слоя) исследовались в работах [61–69]. Для определения концентрации атомов примеси на различном расстоянии от поверхности приборного слоя КНС использовались методы регистрации альфа-частиц, возникающих в результате ядерных реакций под действием ускоренных протонов [61], масс-спектрометрии вторичных ионов (ВИМС) [62, 64, 66, 67], обратного резерфордовского рассеяния легких ионов [65]. Было экспериментально установлено, что в случаях, когда значения энергии имплантации ионов не велики, и профиль распределения примеси лежит вблизи облучаемой поверхности, различие между профилями в КНС с толщиной приборного слоя 0,5–0,6 мкм и объемном кремнии не существенно [62, 63, 67]: для бора, внедряемого с энергиями 25, 50, 160 кэВ, и фосфора, внедряемого с энергиями 70 и 130 кэВ. Однако в случаях глубокого легирования приборного слоя профили распределения атомов легирующих примесей в КНС отличаются от формируемых в объемном кремнии при тех же режимах имплантации и отжига:

- максимум распределения имплантированных атомов бора в КНС (с толщиной приборного слоя 0,5 мкм) лежит глубже на 0,18 мкм, чем в объемном кремнии. Причиной этого сдвига, по-видимому, являются особенности кристаллического строения приборного слоя, так как в предварительно аморфизированном КНС профили имплантированного бора совпадают с полученными в объемном кремнии [67]. Профили распределения более тяжелых ионов фосфора и мышьяка в КНС совпадают с полученными в объемном кремнии [67];

- значения коэффициентов аппроксимирующей профили распределения фосфора функции Pearson-IV, в КНС отличаются от значений, полученных в объемном кремнии [66];

- в процессе высокотемпературного отжига, сопровождающегося диффузионным перераспределением примесей в приборном слое КНС, происходит накопление их на границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Эффект проявляется в виде пика концентрации в этой области структуры: для фосфора [66], мышьяка [65], и, в меньшей степени, для бора [62];

- для лучшего соответствия теоретически рассчитанных профилей распределения легирующих примесей в КНС экспериментальным, в моделях высокотемпературной диффузии

необходимо учитывать наличие двух границ области, в которой происходит диффузия [64, 66, 68, 69], диффузию по дефектам кристаллической структуры [61, 65, 66] и влияние электрического поля зарядов, локализованных вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [66].

Для иллюстрации этих особенностей КНС на рисунках 1.3 и 1.4 приведены результаты работ [62, 66]. Экспериментально обнаруженное ускорение диффузии бора в КНС по структурным дефектам иллюстрируют рисунок 1.5 [61].

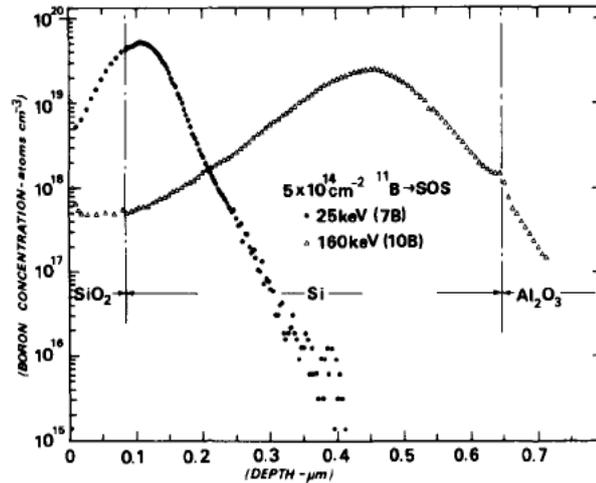


Рисунок 1.3 – Профили концентрации бора, имплантированного с энергиями 25 и 160 кэВ (доза  $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ) в КНС с толщиной приборного слоя 0,6 мкм, полученные методом ВИМС [62]

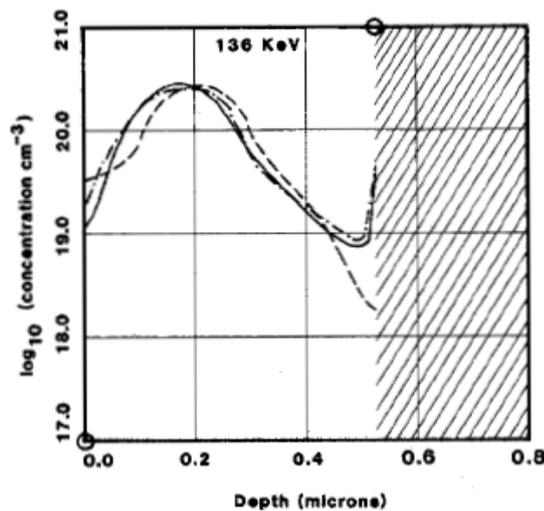


Рисунок 1.4 – Профили концентрации фосфора, имплантированного с энергией 136 кэВ (доза  $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ ) в КНС с толщиной приборного слоя 0,5 мкм после отжига при температуре 850°C в течение 30 минут [66]: - · - · - ВИМС, - - - - расчетом по программе SUPREM-III, ——— расчетом по модели, предложенной в работе [66]. Заштрихованная область – сапфир

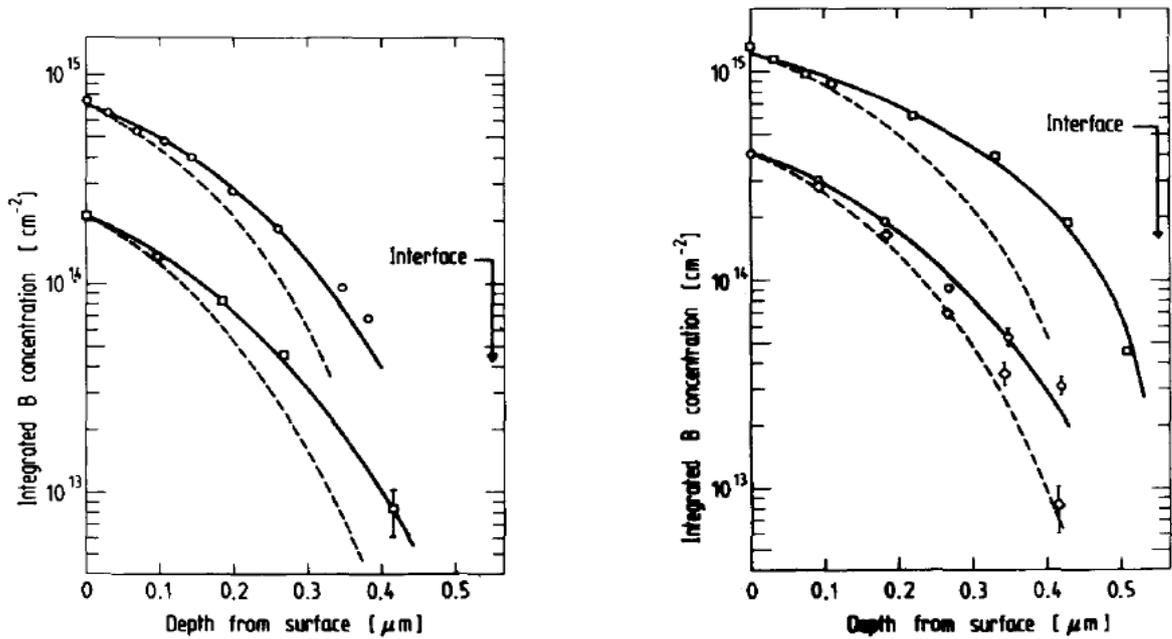


Рисунок 1.5 – Профили концентрации бора [61]:  $\circ$ ,  $\square$  – получены экспериментально в КНС (толщина кремния 0,55 мкм) после отжига при 1000°C, 1 ч.;  $\diamond$  – в объемном кремний после отжига 950°C, 5,2 ч, — — — рассчитаны для объемного кремния, ——— рассчитаны для КНС по модели [61]

Профили распределения по толщине приборного слоя легированных гетероструктур КНС слоевого удельного сопротивления, концентрации, подвижности и времени жизни носителей заряда исследовались в работах [10, 19, 20, 31, 63–65, 70, 71] (обзоры имеющихся в литературе данных приведены в [3–5, 11]). Исследования проводились для КНС с толщиной приборного слоя 0,3–0,6 мкм методами измерения вольт-фарадных характеристик МОП структур, эффекта Холла и измерения сопротивления растеканию (spreading resistance). Профили распределения по толщине приборного слоя концентрации носителей заряда и сопротивления растеканию легированных структур КНС представлены на рисунке 1.6 [63]. Видно, что вблизи поверхности приборного слоя профили концентрации носителей и сопротивления растеканию легированного бором объемного кремния и КНС практически совпадают. В КНС наблюдается более резкий спад этих электрофизических параметров на расстоянии от поверхности более 0,2 мкм. Причина этого – более быстрая диффузия бора вглубь приборного слоя КНС по структурным дефектам и переход в электрически активное состояние лишь части бора, хотя результаты ВИМС показывают, что он присутствует в приборном слое на этих расстояниях от его поверхности [63]. Повышенный уровень шумов при измерении сопротивления растеканию показывает, что при отжиге в КНС удаляются не все возникшие при ионной имплантации радиационные дефекты кристаллической решетки.

Профили дрейфовой подвижности и времени жизни электронов в КНС представлены на рисунках 1.7а и 1.7б соответственно [70]. Из рисунков видно, что подвижность электронов в

КНС толщиной 0,1–0,3 мкм на порядок меньше, чем в объемном кремнии (200 и 1400 см<sup>2</sup>/(В·с), соответственно), время жизни носителей – более чем на три порядка меньше (10<sup>-9</sup> и 10<sup>-6</sup> с, соответственно). На значение подвижности носителей заряда в КНС влияют упругие напряжения (до 10<sup>8</sup> ГПа) в приборном слое, изменяющие зонную структуру кремния и рассеяние на дефектах кристаллической структуры и примесях [3–5]. Время жизни носителей определяется рекомбинацией через глубокие уровни дефектов в запрещенной зоне КНС, концентрация которых высока [3–5, 72]. Характерная особенность профилей подвижности и времени жизни состоит в том, что значение этих величин деградирует с приближением к границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (рисунок 1.7). На самой границе поверхностная плотность заряда, может достигать (4–6)·10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup> [23, 29, 40] и плотность поверхностных состояний в запрещенной зоне порядка 10<sup>12</sup> состояний/см<sup>2</sup>/эВ [29]. Знак эффективного заряда может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от типа проводимости и термообработок КНС [3, 23].

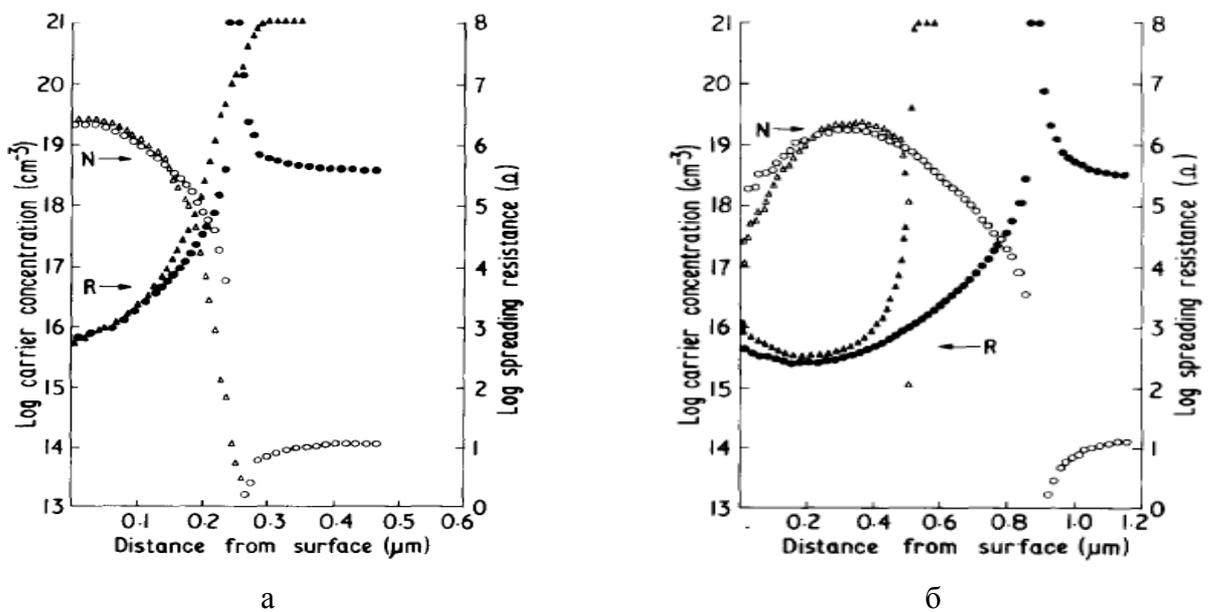


Рисунок 1.6 – Концентрация носителей заряда ( $\Delta$ ,  $\circ$ ) и сопротивление растеканию ( $\blacktriangle$ ,  $\bullet$ ) приборного слоя КНС толщиной 0,6 мкм и объемного кремния после имплантации бора с энергией  $E = 25$  кэВ и дозой  $D = 5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> (а) и  $E = 160$  кэВ и  $D = 5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> (б) с последующим отжигом при температуре 900°С в течение 0,5 ч [63]

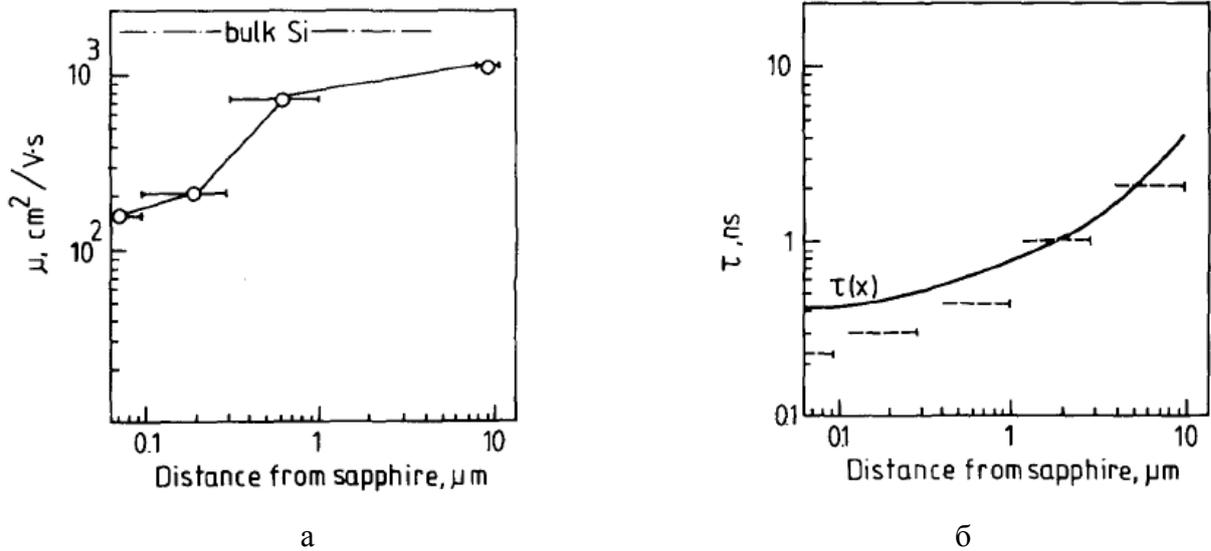


Рисунок 1.7 – Профили дрейфовой подвижности (а) и времени жизни электронов (б) в зависимости от расстояния от границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [70]

Очевидно, что влияние описанных выше особенностей строения КНС на протекание процессов при технологических обработках и параметры изготавливаемых ИС будет усиливаться с уменьшением толщины приборного слоя. Концентрация дефектов кристаллической структуры и фоновых примесей, амплитуда полей упругих напряжений неоднородны как по толщине приборного слоя, так и латерально, поэтому электрические параметры транзисторов одной ИС, на которые они влияют, также будут иметь разброс. Это препятствует получению высокого выхода годных КМОП/КНС БИС. Таким образом, на определенном этапе развития КМОП/КНС технологии возникла необходимость радикального повышения структурного совершенства приборного слоя КНС.

### 1.1.3 Методы повышения структурного совершенства приборных слоев гетероструктур «кремний на сапфире»

Основная тенденция развития технологии изготовления КМОП/КНС БИС состоит в уменьшении толщины приборного слоя до 0,1 мкм и топологических норм проектирования до 0,13–0,25 мкм, повышения степени интеграции и радиационной стойкости за счет уменьшения базы МОП транзисторов [5]. Для достижения этой цели необходимо повышение структурного совершенства и химической чистоты эпитаксиального слоя кремния. Однако оптимизацией лишь подготовки сапфировых подложек и режимов эпитаксии кремния решить эту задачу не представляется возможным. Независимо от условий проведения эпитаксии и подготовки подложек разница параметров кристаллических решеток и коэффициентов линейного термического расширения кремния и сапфира обуславливают образование дислокаций

несоответствия у границы раздела материалов плотностью до  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ , а взаимная разориентация монокристаллических зародышей на начальном этапе формирования слоя кремния и загрязнение его продуктами химического взаимодействия с сапфировой подложкой, приводят к формированию дефектов упаковки и микродвойников [5].

Таким образом, в основе технологии изготовления ИС на КНС с приборными слоями толщиной  $\leq 0,3 \text{ мкм}$ , должны лежать приемы управляемой трансформации их ПДС уже после эпитаксиального наращивания. Известны два основных метода: твердофазная рекристаллизация [4, 5, 73–77] и лазерная жидкофазная рекристаллизация [5, 78–80]. Способ изготовления гетероструктур КНС с ультратонким ( $0,1 \text{ мкм}$ ) приборным слоем разработан, и включает в себя следующие основные этапы [4, 5]:

- газофазная эпитаксия КНС толщиной  $0,3 \text{ мкм}$  с минимальным содержанием дефектов кристаллической структуры, максимальной однородностью по толщине, минимальным уровнем загрязнения примесями;

- твердофазная рекристаллизация приборного слоя путем имплантации в него ионов кремния с дозой  $10^{15}–10^{16} \text{ см}^{-2}$  и начальной энергией  $180–200 \text{ кэВ}$  для аморфизации дефектного слоя вблизи границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  с последующей рекристаллизацией этой области структуры термообработкой при  $600–900^\circ\text{C}$  от малодефектного приповерхностного слоя;

- утонение рекристаллизованного приборного слоя до  $0,1 \text{ мкм}$  окислением во влажном кислороде и последующее травление  $\text{SiO}_2$ .

Дополнительно к этому уменьшение шероховатости свободной поверхности и дефектности приповерхностной области приборного слоя может быть проведено ее оплавлением импульсным лазерным излучением с последующей рекристаллизацией [5]. Это повышает электрическую прочность подзатворного диэлектрика и подвижность носителей заряда в канале МОП транзисторов. Также целесообразно формирование аморфного обладающего диэлектрическими свойствами буферного слоя на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ , способного геттерировать алюминий из сапфира. Описанные выше технологические приемы могут быть реализованы эффективно при соблюдении ряда условий:

- энергия имплантации ионов кремния должна быть подобрана таким образом, чтобы максимум концентрации радиационных дефектов располагался в области с максимальной концентрацией структурных дефектов в КНС и уровень упругих потерь энергии ионов составлял около  $2 \cdot 10^{21} \text{ кэВ/см}^3$  [74];

- при аморфизации радиационные повреждения сапфира должны быть минимальны, так как в процессе рекристаллизации при повышенной температуре высвободившиеся алюминий и кислород загрязняют приборный слой (дополнительно к попавшему в приборный слой при эпитаксии) [75]. Кислород, попавший в приборный слой, и радиационные дефекты в сапфире,

которые не отжигаются при температуре рекристаллизации (менее 1000°C), препятствуют образованию структурно совершенного слоя в процессе рекристаллизации и улучшению электрофизических характеристик КНС [76];

– плотность тока ионов должна быть достаточно низкой, чтобы предотвратить разогрев структуры в процессе внедрения ионов, иначе происходит радиационно-стимулированный отжиг радиационных дефектов и необходимая для аморфизации доза ионов кремния должна быть увеличена [5];

– важным фактором для успешного проведения рекристаллизации является также качество приповерхностного слоя-затравки, определяемое режимом эпитаксии и повреждением кристаллической структуры при имплантации аморфизирующих ионов [5].

Как показано в [73, 76] методами обратного резерфордского рассеяния и электронной микроскопии, твердофазная рекристаллизация снижает концентрацию двумерных дефектов, но значительная плотность дислокаций сохраняется. Жидкофазная рекристаллизация приборного слоя путем его плавления импульсным лазерным излучением длительностью 20–100 нс и плотностью энергии 0,5–2,5 Дж/см<sup>2</sup> (в зависимости от толщины слоя) обеспечивает меньшую дефектность пленки по сравнению с твердофазной рекристаллизацией [5]. Поэтому ее целесообразно применять для повышения качества приповерхностной области приборного слоя, где структурное совершенство и микрорельеф поверхности гораздо сильнее сказываются на работе МОП транзисторов. К недостаткам этого метода можно отнести повышение плотности поверхностных состояний на границах раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и SiO<sub>2</sub>/Si, если производится обработка структур с уже сформированным подзатворным диэлектриком [79]. В этой же работе показано, что изменения, вносимые лазерным отжигом, существенно сказываются на работе МОП/КНС транзисторов, но тщательным подбором режимов обработок можно минимизировать негативные эффекты. Установлено также, что лазерная рекристаллизация КНС уменьшает уровень остаточных напряжений в приборном слое [78].

Перечисленные меры повышения структурного совершенства приборного слоя реализованы на практике фирмой Peregrine (США), запатентовавшей технологию получения ультратонких слоев (0,1 мкм) КНС («UTSi»-технология) [81]. На таких структурах созданы сверхвысокочастотные БИС с топологическими нормами проектирования 0,5 мкм. В России также проводятся работы по повышению структурного совершенства КНС [33, 82–86]. Реализуемый в этих работах подход состоит в выполнении перечисленных выше этапов. Для аморфизации используются ионы кислорода [82, 83] или кремния [33, 84–86]. Внедрение ионов осуществляется в режиме каналирования для меньшего повреждения приповерхностной части приборного слоя, которая в дальнейшем используется как затравка для рекристаллизации, и при пониженной температуре (минус 143°C), что обеспечивает аморфизацию кремния при меньших

дозах имплантируемых ионов. Эффективной реализации предложенной технологии препятствуют следующие факторы: уменьшение дефектности рекристаллизованного приборного слоя КНС невоспроизводимо и неоднородно по его поверхности [33], скорость травления  $\text{SiO}_2$  в процессе утонения приборного слоя толщиной  $\leq 0,2$  мкм неопределенна и неоднородна по его поверхности [33], кислород, высвободившийся после разрушения алюмосиликатов у границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  (с концентрацией до  $10^{20}$   $\text{см}^{-3}$ ), препятствует образованию совершенной кристаллической структуры кремния при рекристаллизации [83]. Необходим тщательный подбор дозы аморфизирующих ионов, так как зависимость качества рекристаллизованного слоя от этого параметра не монотонна [84]. Несмотря на имеющиеся ограничения в результате твердофазной рекристаллизации структурное совершенство приборного слоя КНС повышается [82–86], о чем свидетельствуют уменьшение ширины кривой качания на 45%, увеличение подвижности носителей заряда до 300–700  $\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$  (в исходных структурах около 100  $\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ ), снижение токов утечки МОП транзисторов на два порядка, тока потребления – на порядок, повышение выхода годных ИС – в разы. В то же время радиационная стойкость ИС на основе структур КНС с рекристаллизованным приборным слоем ниже, чем у ИС, изготовленных на не рекристаллизованных структурах [86].

Следует отметить, что имеющихся в литературе эмпирических данных по определению оптимальных режимов обработки гетероструктур КНС с целью повышения качества приборного слоя недостаточно, а методы, с помощью которых достигнуты известные успехи в этом направлении, являются коммерческой тайной, как, например, «UTSi»-технология [81]. Зависимость результата от большого количества параметров, с сильным разбросом, характерным для гетероструктур КНС, не позволяет применять имеющиеся данные непосредственно, без модификации с учетом качества исходных структур, доступных условий и режимов воздействий [33]. Однако при серийном производстве КМОП/КНС БИС требуется воспроизводимость результатов как по площади одной пластины КНС, так и для разных пластин и партий пластин. Сложность указанной задачи требует всестороннего исследования влияния режимов твердофазной рекристаллизации, как на структурное совершенство приборного слоя, так и на изменение его электрофизических свойств в зависимости от качества исходных гетероструктур КНС. Дополнительную информацию для оптимизации режимов обработок можно получить с помощью компьютерного моделирования, обеспечивающего комплексный подход к учету различных процессов и их взаимное влияние, с использованием в качестве входных данных результатов неразрушающего контроля исходных структур КНС.

### 1.1.4 Выводы к разделу 1.1. Постановка задач по гетероструктурам «кремний на сапфире»

Общая тенденция развития микроэлектроники состоит в увеличении степени интеграции ИС, сопровождающаяся масштабированием их топологии (уменьшении топологических норм проектирования) [1]. Кроме повышения функциональных возможностей и быстродействия микросхем, это позволяет снизить потребляемую ими мощность. В КМОП/КНС технологии реализация масштабирования требует уменьшения толщины приборного слоя. Это необходимо также для обеспечения требуемых уровней радиационной стойкости параметров микросхем при воздействии импульсного ионизирующего излучения. Для создания современных КМОП/КНС БИС топологическими нормами 1 мкм и менее толщина приборного слоя должна составлять 0,1–0,3 мкм. При этом влияние переходного слоя, дефектов кристаллической структуры, электрического поля от зарядов поверхностных состояний на границе раздела кремний/сапфир и других особенностей строения гетероструктур КНС, обзор которых дан выше, на протекание технологических процессов и функционирование ИС, усилится. Уже в середине 1980-х годов разработчикам микросхем и технологам стало очевидно, что масштабирование в КМОП/КНС технологии труднодостижимо без повышения структурного совершенства приборного слоя КНС [4, 5]. За рубежом (США, Япония, Германия, Великобритания) проводились систематические исследования в этом направлении с применением твердофазной и жидкофазной рекристаллизации приборного слоя КНС. В настоящее время создана и запатентована технология получения структурно совершенных ультратонких (0,1 мкм) слоев КНС [5, 81]. Подобные исследования проводились и в России [33], но заметные успехи были достигнуты лишь в 2011–2013 годах [82–86].

Усилия технологов направлены на достижение требуемых характеристик ИС и повышение выхода годных. Для оптимизации режимов технологических операций маршрута изготовления достаточно широкой номенклатуры КМОП БИС [8] на основе гетероструктур КНС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм с учетом особенностей его ПДС наряду с трудоемкими экспериментальными исследованиями необходимы:

- разработка математической модели, позволяющей учитывать влияние переходного слоя вблизи границы раздела кремний/сапфир и дефектов кристаллической структуры, при расчетах профилей пространственного распределения имплантируемых в приборный слой КНС ионов и возникающих при этом радиационных дефектов;

- исследование методом компьютерного моделирования по разработанной модели профилей пространственного распределения имплантируемых ионов легирующих примесей (бора и фосфора) и имплантируемых для аморфизации области вблизи границы раздела

кремний/сапфир ионов кремния или кислорода, а также возникающих при этом радиационных дефектов;

- разработка математической модели для описания диффузии легирующих примесей в процессе высокотемпературного постимплантационного отжига гетероструктур КНС, учитывающей влияние упругих напряжений и ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя;

- исследование методом компьютерного моделирования профилей пространственного распределения легирующих примесей в КНС, получаемых в результате ионно-лучевого легирования и постимплантационного отжига;

- выявление закономерностей формирования и влияния режимов ионно-лучевого легирования и отжига структур КНС на образование канала токов утечки  $n$ -канальных МОП транзисторов по границе раздела кремний/сапфир [37, 39], оптимизация режимов этих операций для устранения канала токов утечки.

Решение большинства перечисленных задач не потеряло своей актуальности и в настоящее время по следующим причинам:

- как показал обзор отечественной литературы по микроэлектронике, до сих пор не создана отечественная промышленная технология повышения структурного совершенства приборного слоя кремния толщиной 0,1–0,3 мкм структур КНС диаметром 100–150 мм;

- коммерчески доступные САПР технологических процессов производства ИС (ISE TCAD и других) не имеют встроенных моделей для учета особенностей строения гетероструктур КНС;

- к отечественным ИС, изготовленным на структурах КНС с ультратонким структурно совершенным приборным слоем, будут предъявляться требования по радиационной стойкости. Для этого потребуется оптимизация технологического маршрута их изготовления для обеспечения этих требований для заданных уровней воздействия ионизирующих излучений (то есть реализация подхода, называемого в англоязычной литературе, Radiation Hardening by Process (RHBP) [87]).

## **1.2 Наноразмерные гетероструктуры в современной полупроводниковой электронике**

Выше на примере КМОП/КНС технологии было показано, что на протяжении нескольких десятилетий с момента ее создания повышение функциональной сложности и быстродействия ИС достигалось увеличением плотности размещения и уменьшением размеров дискретных элементов, принцип действия которых не зависел от их масштаба. Та же тенденция характерна и для технологий создания БИС на основе биполярных транзисторов. В настоящее

время достижения в области физики полупроводников и твердотельной технологии позволили осуществить переход к субмикронным размерам дискретных элементов (сотни и десятки нм), при этом определяющее влияние на физические процессы их функционирования стали оказывать квантовые эффекты (туннелирование, размерное квантование, интерференционные эффекты). По прогнозам экспертов потенциальные возможности традиционной микроэлектроники, основанные на возможности масштабирования дискретных элементов, будут исчерпаны в ближайшее время, а дальнейшее развитие электроники возможно только на базе принципиально новых физических и технологических идей [1, 88–90].

В то же время совершенствование технологий молекулярно-пучковой эпитаксии, осаждения из газовой фазы, ионного синтеза позволили создавать физические объекты, с новыми физическими свойствами – наноразмерные гетероструктуры, – на базе которых возможно создание электронных приборов с ранее не достижимыми характеристиками. Стало доступно изготовление наноструктурированных материалов с требуемой зонной структурой выбором веществ, из которых изготавливаются отдельные слои структуры («зонная инженерия»), структур с поперечными размерами слоев, при которых возникает размерное квантование энергетического спектра носителей заряда и изменение степени связи между слоями («инженерия волновых функций»). Наряду с наноразмерными планарными структурами (двумерный электронный газ в квантовых ямах, сверхрешетки) получены одно- и нульмерные квантовые объекты (квантовые нити и точки). Использование квантовых нитей и точек в качестве активной среды оптоэлектронных приборов открывает новые возможности управления электронными и световыми потоками, мощностью, температурной и радиационной стойкостью, расширяет диапазон частот твердотельных приборов на их основе. Необходимость изучения проявлений новых физических эффектов в твердотельных структурах пониженной размерности и разработки технологических методов управления их свойствами привели к возникновению самостоятельных направлений – наноэлектроники и нанотехнологии [91–93].

Гетероструктуры с пространственным ограничением движения носителей заряда во всех трех измерениях (квантовые точки, КТ) реализуют предельный случай размерного квантования в полупроводниках, когда модификация электронных свойств материала наиболее выражена. Электронный спектр идеальной КТ представляет собой набор дискретных уровней, разделенных областями запрещенных состояний, и соответствует электронному спектру одиночного атома, хотя реальная квантовая точка при этом может состоять из сотен тысяч атомов [90, 92]. С приборной точки зрения, атомоподобный электронный спектр носителей в КТ в случае, если расстояние между уровнями заметно больше тепловой энергии, дает возможность устранить основную проблему современной микро- и оптоэлектроники – «размывание» носителей заряда в энергетическом окне порядка  $k_B T$ , приводящее к деградации

свойств приборов при повышении рабочей температуры. Кроме того, все важнейшие для приборных приложений характеристики материала, например, время излучательной рекомбинации, время энергетической релаксации между электронными уровнями, коэффициенты Оже-рекомбинации и другие, зависят от геометрического размера и формы КТ, что позволяет использовать одну и ту же систему полупроводниковых материалов для реализации приборов с существенно различающимися требованиями к активной среде.

Качественный прорыв в технологии изготовления КТ связан с использованием эффектов самоорганизации в гетероэпитаксиальных полупроводниковых системах – спонтанный рост наноразмерных островков одного материала на поверхности другого по механизму Странски – Крастанова в процессе молекулярно-пучковой эпитаксии [90–92]. Таким образом были реализованы гетероструктуры с наноструктурами (в некоторых случаях обладающих свойствами КТ) с высоким кристаллическим совершенством, высоким квантовым выходом излучательной рекомбинации и высокой однородностью по размерам в их планарных массивах (около 10%) [92]. В полученных структурах были впервые продемонстрированы уникальные физические свойства КТ и на их основе разработаны оптоэлектронные приборы: инжекционные лазеры и светодиоды в ближнем инфракрасном диапазоне, фотоприемники для среднего инфракрасного диапазона, однофотонные генераторы, одноэлектронные транзисторы [1, 89–92].

Большинство современных исследований посвящено гетероструктурам с наноструктурами на основе соединений  $\text{InGaAs/GaAs}(001)$ ,  $\text{InAs/GaAs}(001)$ ,  $\text{Ge(Si)/Si}(001)$  [1, 89–92]. Интерес к гетеросистеме  $\text{Ge(Si)/Si}(001)$  связан с тем, что ее использование расширяет возможности применения кремния – в настоящее время и в прогнозируемом будущем основного материала микро- и нанoeлектроники [92]. Для этого требуется решить проблему повышения квантовой эффективности излучательной рекомбинации носителей заряда в кремнии, которая низка из-за запрета на прямые межзонные переходы носителей в процессе рекомбинации [92, 94]. Квантовая эффективность излучательной рекомбинации может быть повышена посредством уменьшения концентрации центров безызлучательной рекомбинации и/или обеспечением пространственной локализации носителей заряда [94]. Бездефектные наноструктуры  $\text{Ge(Si)/Si}(001)$  позволяют реализовать преимущества обоих этих подходов [94]. К тому же оптоэлектронные приборы на основе многослойных гетероструктур с наноструктурами  $\text{Ge(Si)/Si}(001)$  могут функционировать в области длин волн 1,3–1,55 мкм [94, 95], в которой работают современные оптоволоконные линии связи. Объемный кремний прозрачен в этой области длин волн, что позволит создать в нем оптические волноводы, и интегрировать оптические и электронные компоненты в одной кремниевой микросхеме [94, 95]. В связи с этим в настоящее время активно проводятся теоретические и экспериментальные исследования [91, 95, 96] по разработке технологии создания многослойных гетероструктур с

самоформирующимися наноостровками Ge(Si)/Si(001) с приемлемыми для практических приложений значениями квантовой эффективности фото- и электролюминесценции при низкой (минус 196°C) и комнатной температурах.

### 1.2.1 Особенности радиационных эффектов в наноразмерных гетероструктурах

Полупроводниковые приборы и схемы, в том числе и изделия наноэлектроники, работают в условиях воздействия радиации. Так, на электронику любого применения влияет естественная радиоактивность используемых материалов, фоновое космическое и земное излучения, а специализированная аппаратура в атомной, авиационной, космической и военной техники подвергается интенсивным и разнообразным радиационным воздействиям источников техногенного и естественного происхождения. Кроме того, при производстве самих приборов широко применяются радиационные технологии. Поэтому анализ действия ионизирующих излучений на современную электронику – важная и актуальная задача [92, 96–99].

Опубликовано большое количество работ по действию излучения на отдельные типы наноэлектронных приборов (в основном оптические приборы с квантовыми ямами (КЯ) и точками, транзисторы с высокой подвижностью электронов (High Electron Mobility Transistor, НЕМТ). Однако в виду новизны, сложности и многообразия возникающих задач достигнутый сейчас уровень исследований значительно уступает уровню исследований по действию излучений на материалы и приборы традиционной микроэлектроники. Естественно, что при изучении радиационных эффектов в элементной базе наноэлектроники исследователи опираются на представления, развитые ранее в радиационной физике полупроводников [52–54, 58]. Однако, радиационное повреждение наноразмерных гетероструктур связано с рядом их особенностей [98]: большей долей поверхностных атомов на гетерограницах по сравнению с объемными материалами, перестройкой при облучении границ раздела, поверхностных дефектов и связанных с ними электронных состояний, отклонением закономерностей диффузии от классического закона Фика, эффектом «самоочистки», проявлением квантовых эффектов в их физических свойствах.

*Смещения атомов из узлов кристаллической решетки.* РТД после частичной аннигиляции друг с другом диффундируют к стокам (атомам примесей, поверхностям, дефектам кристаллической структуры), на которых рекомбинируют, либо образуют устойчивые при температуре облучения комплексы друг с другом. В гетероструктурах сток РТД будет происходить на сильно развитых гетерограницах. Поскольку концентрация фоновых примесей благодаря совершенству технологии получения гетероструктур, низка, то роль их в качестве

стока дефектов будет существенно меньше, чем в объемном кремнии, поэтому стабильные дефекты будут состоять преимущественно из вакансий и междоузельных атомов [98].

При больших энергиях первичных частиц образуются каскады атомных смещений. Условия их эволюции в гетероструктурах иные: развитые гетерограницы обеспечивают эффективный сток вакансий и междоузельных атомов за время сопоставимое со временем развития каскада смещений (порядка  $10^{-13}$  с). В отличие от объемных образцов структура субкаскадов и их трансформация становятся важными, поскольку их размеры могут быть соизмеримы с минимальными размерами наноразмерных гетероструктур. Предполагается, что дефекты внутри них могут подвергаться самоочистке, подобно примесям [98]. Этот эффект принципиально важен для протекания квазихимических реакций между дефектами и образования стабильных радиационных повреждений, однако пока подробно не изучен.

*Ионизация.* При рассмотрении ионизации полупроводников можно выделить три основные стадии [98]: перевод электронов в зону проводимости и образование пары высокоэнергетических («горячих») электрона и дырки, лавинное умножение носителей, созданных горячими электронами и дырками, термализация созданных носителей, обусловленная рассеянием на высокоэнергетических фононах. В отличие от объемных полупроводников, в наноразмерных гетероструктурах:

- ширина запрещенной зоны увеличивается с уменьшением размера;
- в двумерных и одномерных объектах (КЯ и квантовые проволоки) имеется непрерывная плотность состояний (хотя и отличающаяся от объемных материалов), тогда как в нульмерных объектах (КТ) плотность состояний дискретна;
- ввиду малых размеров к процессу умножения добавляется «уход» носителей за их пределы вследствие прохождения горячих носителей над ограничивающим барьером или туннелированием сквозь барьер, и их «приход» из окружающего материала;
- вследствие сильного кулоновского взаимодействия электронов и дырок существенно возрастает эффективность ударной Оже-рекомбинации, образование и распад экситонов, также отличается и фоннный спектр.

Поэтому основные составляющие процессов ионизации в таких гетероструктурах будут отличаться от ионизации в объемных материалах, а в нульмерных объектах они будут подобны ионизации атомов.

*Пороговая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки.* В объемных материалах эту величину можно считать постоянной в широком диапазоне энергий и видов облучающих частиц [52, 53, 58]. В традиционном представлении  $E_d$  является суммой из энергии связи атома в решетке и энергии релаксации окружающей решетки, причем первая существенно превышает вторую. Экспериментально определенные значения  $E_d$  находятся в широком

интервале (для кремния от 11 до 45 эВ). Для объяснения такого разброса предлагалось несколько вариантов: наличие слабо связанных атомов вблизи поверхности и границ раздела с внутренними микродефектами, разная доля аннигиляции первичных РТД, которая, в частности зависит от концентрации примесей, возникновение смещений посредством ионизационных («допороговых») механизмов. В наноразмерных гетероструктурах принципиально возможен вклад всех указанных механизмов [98]. Однако наиболее важным является наличие слабосвязанных поверхностных атомов, число которых зависит от размеров и размерности гетероструктуры, что свидетельствует в пользу уменьшения эффективной пороговой энергии смещения в них.

### **1.2.2 Радиационные эффекты в наноразмерных гетероструктурах с самоформирующимися nanoостровками**

Исследованию радиационных эффектов в самоформирующихся nanoостровках, посвящено значительное число работ [100–103], систематизация и обобщение имеющихся в литературе данных сделано в обзорах [96, 97, 104]. Интерес к проблеме радиационной стойкости гетероструктур с nanoостровками связан с тем, что благодаря их фундаментальным свойствам оптоэлектронные устройства на основе nanoостровков (КТ) должны иметь бóльшую радиационную стойкость, чем приборы на КЯ. Это связано с тем, что, во-первых, общий объем активной области nanoостровков мал по отношению к площади поверхности (от 5 до 25%), поэтому вероятность появления радиационных дефектов в них значительно уменьшается, а, следовательно, уменьшается вероятность безызлучательной рекомбинации возбужденных (оптическим излучением или инжекцией из контактов) носителей через уровни энергии в запрещенной зоне, которые создают эти дефекты.

Во-вторых, трехмерная квантово-размерная локализация экситонов в nanoостровках (КТ) уменьшает вероятность захвата возбужденных носителей уровнями радиационных дефектов в запрещенной зоне и рекомбинации через них без испускания фотона. При облучении радиационные дефекты неизбежно формируются (и накапливаются с ростом дозы облучения) в объеме гетероструктур и безызлучательная рекомбинация носителей через их уровни в запрещенной зоне должна усиливаться, а интенсивность рекомбинации в nanoостровках, сопровождающаяся испусканием фотонов, уменьшаться. Однако на практике такая закономерность наблюдается не всегда: деградация спектра фотолюминесценции (как интегральной характеристики рассматриваемых процессов) оказывается незначительной [96], в некоторых случаях при малых дозах облучения, интенсивность фотолюминесценции даже увеличивается [100, 103]. Возможная причина этого эффекта состоит в том, что вследствие

локализации носителей заряда в наноструктурах сечение их захвата в активную область значительно больше сечения захвата уровней энергии радиационных дефектов в запрещенной зоне.

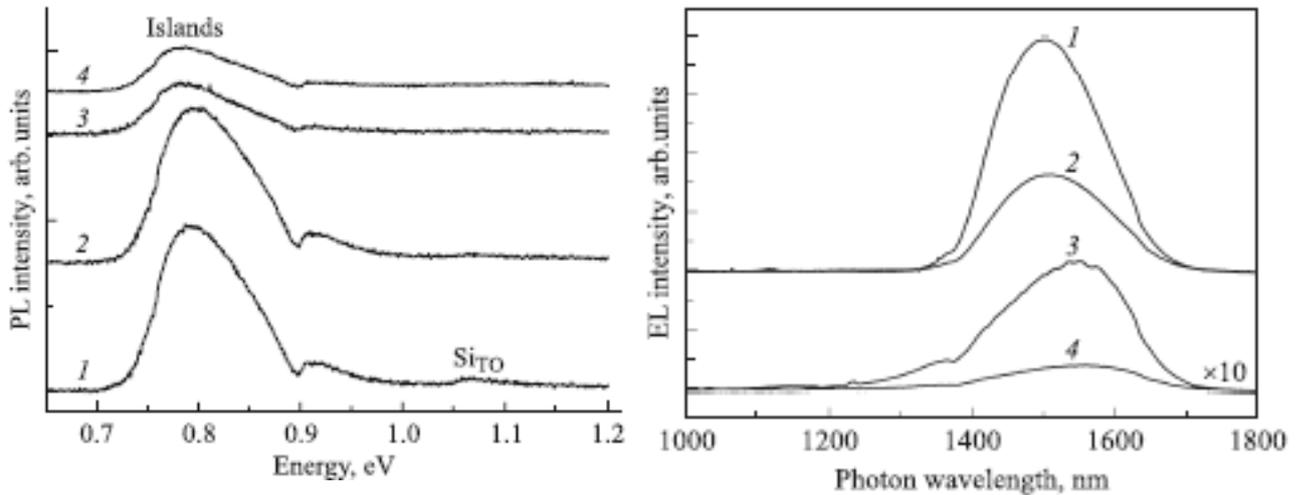
В-третьих, увеличение радиационной стойкости гетероструктур с наноструктурами может быть связано с влиянием полей упругих напряжений, возникающих в многослойных структурах, состоящих из последовательности слоев с наноструктурами и разделительных слоев основного материала – сверхрешетках [96]. Периодическая структура сверхрешетки создает дополнительное препятствие для освобождения носителей заряда из наноструктур (КТ) и безызлучательной рекомбинации посредством радиационных дефектов.

Причины наблюдаемой экспериментально деградации оптических свойств гетероструктур с наноструктурами (КТ) при радиационных воздействиях, предполагаемые авторами цитируемых работ, состоят в следующем:

- безызлучательная рекомбинация носителей заряда через уровни энергии радиационных дефектов в запрещенной зоне полупроводника, вместо излучательной в наноструктурах (КТ);
- туннелирование носителей заряда из наноструктур (с уровнями размерного квантования КТ) на уровни радиационных дефектов в запрещенной зоне окружающего материала;
- сток РТД на границы раздела наноструктур/окружающий материал и образование рекомбинационных уровней для носителей заряда;
- изменение амплитуды упругих напряжений вокруг наноструктур и, как следствие, изменение их энергетического спектра.

### **1.2.3 Радиационные эффекты в гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001)**

Исследованию влияния облучения электронами и нейтронами на спектры фотолюминесценции (ФЛ) гетероструктур Ge(Si)/Si(001) с различной степенью пространственной локализации носителей заряда, а также электролюминесценцию (ЭЛ) одно- и многослойных структур с планарными массивами самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001) посвящены работы [101, 102]. Было установлено, что сигналы ФЛ и ЭЛ от наноструктур Ge(Si) наблюдается после облучения электронами с энергиями 2 и 4 МэВ дозой до 20 Мрад и нейтронами со средней энергией 1 МэВ флюенсом  $10^{13}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup>. Типичный вид спектров ФЛ и ЭЛ из этих работ приведен на рисунках 1.8а и 1.8б.



Спектры ФЛ измерены при комнатной температуре до облучения (1), после облучения электронами с различными дозами (2 – 0,6 Мрад, 3 – 20 Мрад) и нейтронами флюенсом  $10^{15} \text{ см}^{-2}$  (4) [101]

а

Спектры ЭЛ измерены при температуре минус  $196^\circ\text{C}$  (1 и 2) и комнатной (3 и 4). 1 и 3 – спектры ЭЛ диода до облучения нейтронами, 2 и 4 – после облучения нейтронами флюенсом  $10^{15} \text{ см}^{-2}$  [102]

б

Рисунок 1.8 – Спектры ФЛ (а) и ЭЛ (б) многослойной диодной структуры с наноструктурами Ge(Si)

Предложенное в [101, 102] объяснение механизма деградации оптических свойств многослойных массивов наноструктур Ge(Si)/Si(001) состоит в следующем. Наблюдаемое уменьшение интенсивности ФЛ и ЭЛ обусловлено тем, что некоторая доля неравновесных носителей рекомбинирует безызлучательно посредством уровней энергии в запрещенной зоне возникающих в наноструктурах радиационных дефектов. С ростом дозы облучения электронами и флюенса нейтронов увеличивается концентрация радиационных дефектов и доля неравновесных носителей, рекомбинирующих безызлучательно, растет. Радиационная стойкость рассматриваемых гетероструктур по сравнению с КЯ [101] и объемным кремнием [102] обусловлена тем, что движение дырок ограничено в трех пространственных направлениях, поэтому *безызлучательная рекомбинация возможна только на дефектах, образовавшихся в этом же наноструктуре*. Образование радиационных дефектов в наноструктуре приводит к тому, что он перестает давать вклад в сигнал ФЛ и ЭЛ, но носители, локализованные в других наноструктурах, могут продолжать рекомбинировать с излучением квантов. По мере увеличения дозы облучения происходит рост числа наноструктур, в которых произошло образование радиационных дефектов, что ведет к уменьшению интенсивности сигнала ФЛ и ЭЛ от наноструктур. Но из-за высокой плотности наноструктур падение интенсивности с ростом дозы происходит достаточно медленно [101]. Грубая оценка показывает, что концентрация наноструктур ( $3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) в многослойной структуре имеет тот

же порядок, что и концентрация кластеров радиационных дефектов при флюенсе нейтронов  $10^{15} \text{ см}^{-2}$  [102].

Однако, характерные линейны размеры каскадов атомных смещений, образуемых атомами отдачи кремния после упругого столкновения с нейтроном с энергией 1 МэВ, составляет около 150 нм (расчет по программе SRIM-2013 [105, 106]). Таким образом, один каскад атомных смещений может «повредить» несколько наностроек в многослойном массиве, поскольку характерные размеры наностройки 65–75 нм в плоскости роста, высота 10–12 нм, поверхностная плотность  $10^{10} \text{ см}^{-2}$ , толщина разделяющего слоя наностроек слоя кремния около 30 нм [101, 102]. В результате, при меньших, чем в экспериментах [101, 102] флюенсах нейтронов, радиационные дефекты могут возникать во всех наностройках, и они перестанут вносить вклад в интенсивность ФЛ и ЭЛ. Таким образом, объяснение механизма деградации оптических свойств массивов наностройкой Ge(Si)/Si(001), предложенное в [101, 102], нуждается в проверке и уточнении.

В результате каскада атомных смещений при облучении полупроводников кроме РТД могут образоваться кластеры радиационных дефектов – разупорядоченные области (РО) [51–53]. РО состоят из ядра размером 10–30 нм с концентрацией радиационных дефектов  $10^{19}$ – $10^{20} \text{ см}^{-3}$  и атмосферы радиационных дефектов и их комплексов с атомами легирующих примесей. Процессы, происходящие при образовании РО, и их влияние на электрофизические свойства полупроводников подробно изучались ранее [51–53]. Входящие в состав РО дефекты выступают как центры захвата и рекомбинации носителей заряда. При возникновении значительной концентрации РО в полупроводнике уменьшаются время жизни и концентрация носителей заряда. В отличие от РТД РО представляют собой трехмерные включения, деформирующие кристаллическую решетку [107] и создающие в ней протяженное электрическое поле [108]. В то же время установлено, что свойства наностроек определяются полями упругих напряжений, модифицирующих зонную структуру вблизи них, и кулоновским взаимодействием носителей заряда [91, 92]. В результате образования значительной концентрации РО может произойти суперпозиция, как полей их упругих напряжений, так и электрических полей. Отдельный наностройка из многослойного массива в гетероструктуре попадет в область действия полей одной или нескольких РО. Таким образом, упругих напряжения и электрическое поле, созданные РО, могут привести к изменениям оптоэлектронных свойств наностроек, и радиационной деградации параметров оптоэлектронных приборов на их основе. Этот аспект влияния РО на свойства гетероструктур с наностройками в литературе не рассмотрен.

#### 1.2.4 Выводы к разделу 1.2. Постановка задач по гетероструктурам Ge(Si)/Si(001)

К настоящему времени разработаны и изготовлены оптоэлектронные приборы, активной средой в которых служат несколько десятков слоев самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001), разделенных слоями кремния. Однако результаты экспериментальных исследований влияния радиационных воздействий на характеристики этих приборов пока не получили полного теоретического объяснения. Поэтому актуальность приобрели задачи теоретического исследования механизмов деградации оптоэлектронных свойств наноструктур Ge(Si)/Si(001) при радиационных воздействиях, а именно:

- характер и степень повреждения наноструктур в многослойных массивах каскадами атомных смещений при облучении быстрыми нейтронами (электронами, протонами);
- оценка эффективности каскадного перемешивания на границе раздела наноструктур/окружающий материал (спейсерные слои);
- исследование влияния на оптоэлектронные свойства наноструктур Ge(Si)/Si(001) разупорядоченных областей, представляющих собой трехмерные кластеры радиационных дефектов, окруженные полями упругих и электрических напряжений.

## ГЛАВА 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ «КРЕМНИЙ НА САПФИРЕ»

### 2.1 Влияние переходного слоя у границы раздела кремний/сапфир на параметры профилей пространственного распределения примесей и радиационных дефектов в гетероструктурах «кремний на сапфире» при ионной имплантации

#### 2.1.1 Введение

Согласно известным из литературы и приведенным в главе 1 экспериментальным данным, переходный слой у границы раздела кремний/сапфир ( $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ) гетероэпитаксиальных структур КНС может содержать включения алюмосиликатов, аморфного или поликристаллического кремния, либо сохранять кристаллическое строение, но содержать большую (до  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) концентрацию дефектов кристаллической структуры (дислокаций, границ зерен, микродвойников, дефектов упаковки). Протяженность переходного слоя может составлять по 30 нм и более от границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ . Соотношение фаз, химический состав и дефектность переходного слоя носят случайный характер, что проявляется в обнаруженной экспериментально сильной дисперсии физических свойств приборных слоев КНС по площади одной гетероструктуры и от структуры к структуре. Очевидно, что процессы, происходящие в переходном слое, будут сказываться на результатах технологических операций по модификации физических свойств приборного слоя КНС. В частности, его ионно-лучевом легировании бором и фосфором при формировании топологии элементов КМОП/КНС БИС и аморфизации ускоренными ионами кислорода или кремния для последующей твердофазной рекристаллизации с целью повышения структурного совершенства. Для выявления закономерностей и количественной оценки степени влияния переходного слоя и ростовых дефектов кристаллической структуры КНС на параметры, характеризующие пространственное распределение внедряемых ионов и образующихся при этом радиационных дефектов, можно использовать широко распространенный метод компьютерного моделирования методом Монте-Карло [105, 106]. Для этого нами использована специально разработанная реализующая этот алгоритм компьютерная программа, названная TRIS («Transport of Ions to Solids») [109].

### 2.1.2 Компьютерная программа TRIS

Для исследования процессов дефектообразования при внедрении ускоренных ионов в гетероструктурах  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  («мишень») с учетом особенностей их строения целесообразно использовать компьютерную программу, которая удовлетворяет ряду требований:

1. Гетерокомпозиция может содержать произвольное количество слоев (четыре и более). Включение в состав «мишени» большего, чем входит в состав гетерокомпозиции, числа слоев может потребоваться для задания плавного изменения ее физических свойств в зависимости от координаты вдоль оси, перпендикулярной гетерограницам.

2. Материал каждого слоя «мишени» может состоять из произвольного числа химических элементов (трех и более).

3. Программа должна иметь возможность задания значения пороговой энергии смещения атомов из узлов кристаллической решетки каждого химического элемента в каждом слое «мишени».

4. Для корректной оценки концентрации РТД программа должна осуществлять детальное моделирование каскадов атомных смещений, инициированных внедряемыми ионами и атомами отдачи.

5. Должен быть доступ к исходному коду компьютерной программы для контроля значений всех параметров математической модели и возможность модификации, как их значений, так и алгоритма моделирования с целью учета новых физических эффектов (например, влияния на пробеги ионов пор, дислокаций и т.п.). Исходный код также необходим для оперативного исправления обнаруженных ошибок программной реализации математической модели.

Среди программ для моделирования процессов, происходящих при переносе ускоренных ионов в веществе (твердых, газообразных), наибольшее распространение получила программа TRIM/SRIM («Transport of Ions to Matter») [105, 106]. Несколько версий этой программы свободно распространяется через сеть Интернет. В таблице 2.1 приведены данные о возможном количестве слоев в составе «мишени», количестве различных химических элементов в ней, возможностях независимого задания значений их  $E_d$  и детальное моделирование каскадов атомных смещений для различных версий этой программы (после названия через дефис указан год ее выпуска). Видно, что первым четырем из указанных требований удовлетворяет лишь программа SRIM-2006 и последующие версии. Однако исходный код ни одной из программ не доступен для модификации (пятое требование), и не публикуется в полном объеме. Выявление разнообразных ошибок в распространяемых через Интернет версиях программы TRIM/SRIM происходит сообществом пользователей в процессе ее эксплуатации, о чем они сообщают

авторам программы, которые после устранения ошибок выпускают ее новую версию. Перечень уже устраненных ошибок программы TRIM/SRIM приводится в файле VERSION, распространяемом вместе с ней. Анализ этого файла для SRIM-2013 показал, что разные версии программы содержали ошибки, как в реализации математической модели, так и в блоке вывода результатов расчета.

Таким образом, разработка оригинальной программы для моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных гетероструктурах с учетом особенностей их строения при внедрении ускоренных ионов, необходима для того, чтобы при проведении исследований иметь возможность модифицировать математическую модель и оперативно отлаживать исходный код программы, устраняя допущенные при его написании ошибки. При этом результаты расчета по программе TRIM/SRIM могут быть использованы для верификации. Следует отметить, что доступные на момент проведения части наших исследований (2003–2005 годы) версии программы TRIM/SRIM не удовлетворяли первому и третьему требованиям, что послужило дополнительным аргументом в пользу разработки оригинальной компьютерной программы.

Таблица 2.1 – Данные о возможностях задания параметров «мишени» для различных версий программы TRIM/SRIM [105, 106]

Название версии	Число различных химических элементов в составе «мишени»	Число слоев в составе «мишени»	Возможность независимого задания пороговой энергии смещения атомов каждого химического элемента в каждом слое «мишени»	Возможность детального моделирования каскадов атомных смещений
TRIM-91	4	3	Нет	Есть
TRIM-95	4	3	Нет	Есть
SRIM-98	8	12	Нет	Только по модели Кинчина-Пиза
	4	3	Нет	Есть
SRIM-2006, SRIM-2008, SRIM-2011, SRIM-2013	12	8	Есть	Есть

Отличительной особенностью разработанной при выполнении диссертационного исследования программы TRIS является точное моделирование траекторий движущихся частиц на границах раздела слоев. Реализованный алгоритм программы построен так, что после

каждого столкновения движущихся частиц с атомами «мишени», розыгрыша направления и длины следующего свободного пробега, определяется, будет ли он пересекать границу слоя. В случае, если пересечение произойдет, по формулам аналитической геометрии вычисляются координаты точки пересечения траектории и границы раздела слоев (плоскости в трехмерном пространстве). Потери энергии движущейся частицы на неупругое торможение вычисляются на отрезке длины свободного пробега до границы слоев (используется значение сечения торможения для материала слоя, в котором находится частица), а затем от границы до точки окончания свободного пробега (используется значение сечения торможения для материала слоя, в который «перешла» частица). Аналогичная процедура реализована и при пересечении плоскостей, разделяющих ячейки гистограмм в которых фиксируются результаты расчета. Это позволяет при любых конфигурациях между траекторией частицы, границами слоев и ячеек гистограммы повысить точность расчета и исключить появление «артефактов» на границах слоев, имеющих в TRIM (см. документацию к программам TRIM-91, -98).

Отличия математических моделей, реализованных в программах TRIS и TRIM/SRIM, состоят в следующем:

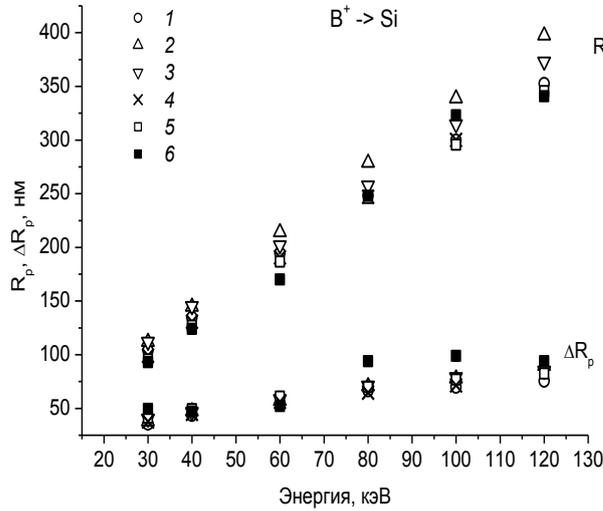
- интеграл рассеяния атома на атоме в программе TRIS вычисляется численным интегрированием методом Лобатто четвертого порядка по алгоритму, предложенному в работе [110], в TRIM/SRIM – по «магической формуле» [106];

- в программе TRIS взаимодействие атомов описывается потенциалом Мольера, в TRIM/SRIM – «универсальным» потенциалом [106];

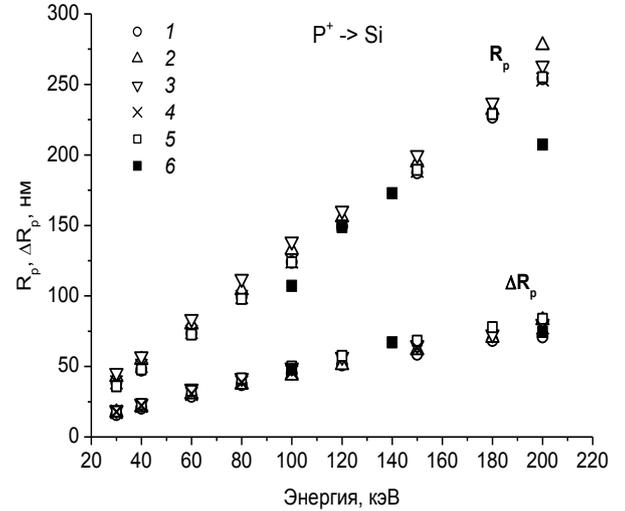
- для вычисления неупругих потерь энергии атомов в программе TRIS используется сечение Линдхарда и Шарффа, применимое для ионов средних энергий, в TRIM/SRIM диапазон энергий частиц более широкий, и сечение неупругого торможения высокоэнергетичных частиц описывается в соответствии с теорией Бете и Блоха [106].

Результаты верификации корректности расчетов по программе TRIS сравнением с экспериментальными данными и результатами расчета по программе TRIM разных версий представлены на рисунках 2.1, 2.2.

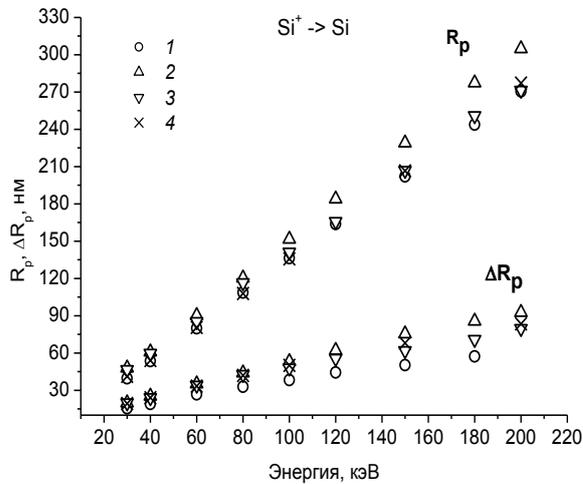
Из приведенных на рисунках 2.1 и 2.2 данных видно, что результаты расчетов по программе TRIS параметров профилей пространственного распределения имплантируемых ионов различных типов, неупругих (ионизационных) и упругих (при рассеянии на атомах «мишени») потерь энергии, РТД хорошо согласуются с результатами расчета, полученным с помощью различных версий программы TRIM/SRIM [105], справочными и экспериментальными данными.



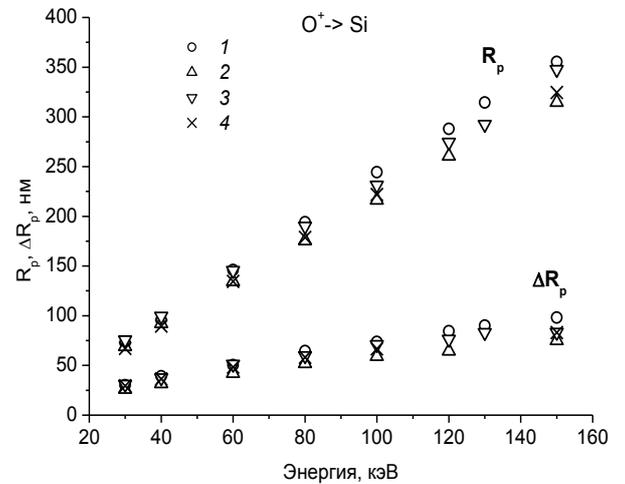
а



б

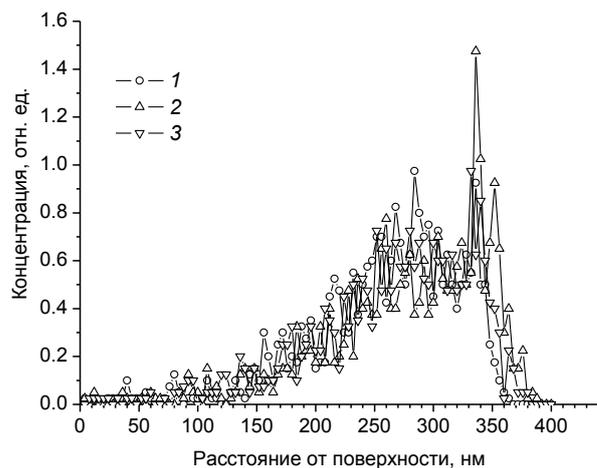


в

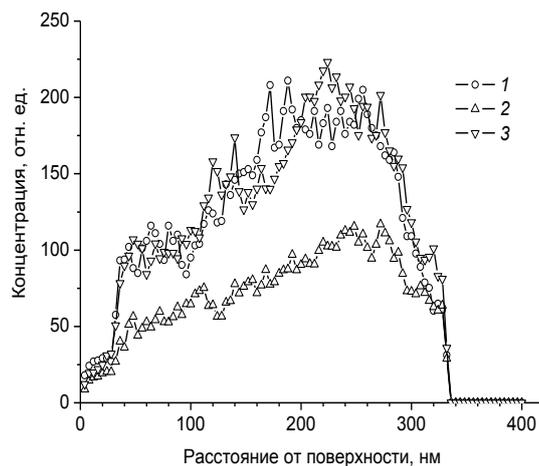


г

Рисунок 2.1 – Рассчитанные значения среднего проецированного пробега ( $R_p$ ) и дисперсии пробегов ( $\Delta R_p$ ) имплантируемых в кремний ускоренных ионов бора (а), фосфора (б), кремния (в), кислорода (г): 1 – по программе TRIS, 2 – по программе TRIM-91 [105], 3 – SRIM-2013 [105], 4, 5 – справочные таблицы [111] и [50] соответственно, 6 – экспериментальные данные [50].



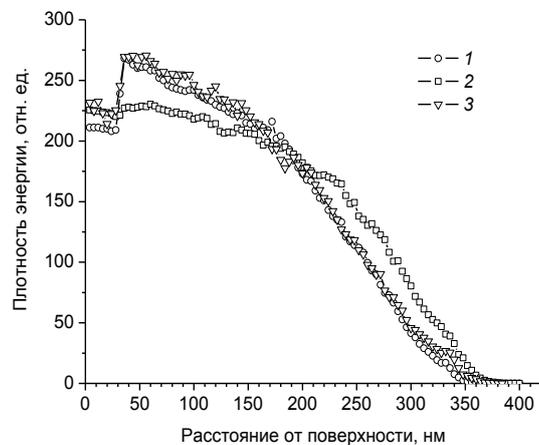
а



б



в



г

Рисунок 2.2 – Профили пространственного распределения в гетероструктуре  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  внедренных с энергией 80 кэВ ионов бора (а), радиационных точечных дефектов на примере междоузельных атомов кремния (б), упругих (в) и неупругих (г) потерь энергии ионов, рассчитанные по программам TRIS (1), TRIM-91 (2) и SRIM-2013 (3)

### 2.1.3 Модели переходного слоя у границы раздела кремний/сапфир

Обобщая приведенные в главе 1 экспериментальные данные, были рассмотрены следующие варианты строения приборного слоя гетероструктур КНС. Вариант 1 (ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ): у границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  есть дополнительный переходный слой, занимающий часть приборного слоя, полностью состоящий из алюмосиликатов. Вариант 2 (ПС-aSi): переходный слой у границы раздела полностью состоит из аморфного кремния. В каждом варианте строения переходного слоя плотность материала, химический состав, энергии дефектообразования образующих его атомов будут отличаться, что скажется на пространственном распределении

внедряемых в приборный слой ионов и эффективности образования радиационных дефектов. Вариант 3 (ПС-cSi): приборный слой полностью состоит из кремния (приборный слой без переходного слоя) с плотностью, характерной для объемного материала. Вариант 4: дополнительных слоев не вводится, а приборный слой полностью состоит из кристаллического кремния с большой концентрацией ростовых дефектов кристаллической структуры (модель описана в разделе 2.1.5). Варианты строения КНС ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$  и ПС-aSi – это предельные случаи, которые могут иметь место на практике. Модель строения КНС с переходным слоем (варианты ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , ПС-aSi, ПС-cSi) схематично представлена на рисунке 2.3.

Полученные результаты исследования профилей пространственного распределения ионов и РТД для различных вариантов модели строения КНС приведены в работах [112–116]. Параметры модели гетероструктур КНС, описанной в [116], нуждаются в коррекции. Так значение плотности материала переходного слоя, оцененное по изменению показателя преломления приборного слоя в [116], равное  $1,84 \text{ г/см}^3$ , мало для кремния. Плотность даже аморфного кремния составляет  $2,0 \text{ г/см}^3$  (в работе [117] указано, что плотность пленок аморфного кремния на 3–15% ниже плотности объемного кремния). Это значение и принято далее за наименьший предел плотности материала переходного слоя в модели ПС-aSi. Алумосиликаты на границе раздела Si/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  образуют химическое соединение  $\text{Al}_2\text{SiO}_5$  (силлиманит или муллит) [17], плотность которого  $3,03 \text{ г/см}^3$  [118]. Плотность кристаллического кремния (c-Si) составляет  $2,33 \text{ г/см}^3$  [119], аморфного (a-Si) –  $2,0 \text{ г/см}^3$  [117, 119, 120], сапфира ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) –  $3,97 \text{ г/см}^3$  [119], диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ) –  $2,20 \text{ г/см}^3$  [121].

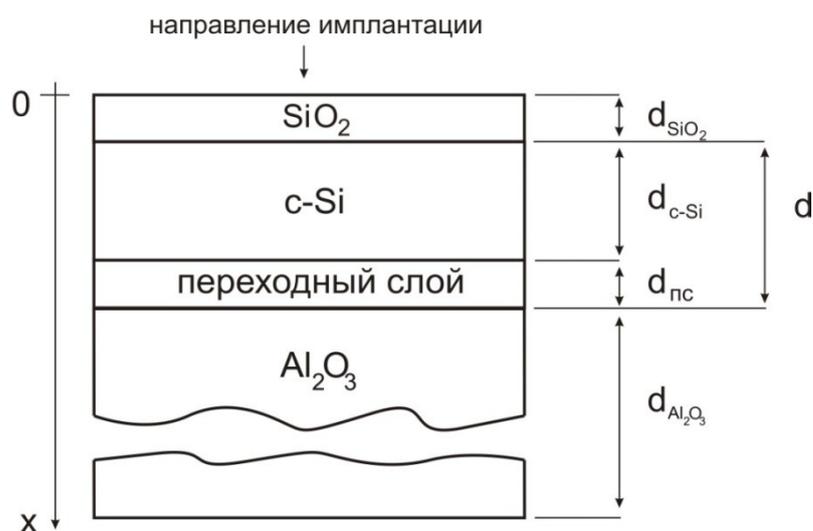


Рисунок 2.3 – Схематическое изображение моделей строения гетероструктур КНС с переходным слоем (варианты ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , ПС-aSi, ПС-cSi)

Толщина приборного слоя ( $d$ ) рассматриваемых гетероструктур КНС составляла 0,3 мкм, сапфировой подложки ( $d_{\text{Al}_2\text{O}_3}$ ) – 540 мкм (при моделировании рассматривалась только область 500 нм от границы с кремнием вглубь сапфира, так как внедряемые в приборный слой ионы за пределы этой области не распространяются). В соответствии с известными экспериментальными данными толщина переходного слоя ( $d_{\text{ПС}}$ ) варьировалась, и составляла 0,0, 25,0 и 50,0 нм. Легирование КНС происходит, как правило, через слой диоксида кремния. Толщина диэлектрического слоя  $\text{SiO}_2$  ( $d_{\text{SiO}_2}$ ), характерная для современных отечественных технологических маршрутов изготовления КМОП/КНС БИС, составляет 30 нм. Известно [121], что толщина кремния при окислении его поверхности уменьшается на  $0,45 \cdot d_{\text{SiO}_2}$ , поэтому толщина приборного слоя  $d = 300 - n \cdot 0,45 \cdot 30$ , где  $n$  – количество операций окисления, предшествовавших имплантации. Анализ существующих технологических маршрутов показал, что  $d = 286,5$  нм ( $n = 1$ ,  $d_{\text{SiO}_2} = 30$  нм). В моделях КНС с переходным слоем толщина сохраняющей кристалличность части приборного слоя  $c\text{-Si}$  ( $d_{c\text{-Si}}$ ), выбиралась так, чтобы выполнялось соотношение  $d_{c\text{-Si}} + d_{\text{ПС}} = d$ .

Пороговые энергии смещения атомов из узлов кристаллической решетки для гетероструктур КНС при расчетах по программе TRIS принимались равными характерным для объемных материалов, входящих в ее состав. Так для кристаллического кремния  $E_d$  варьируется в интервале 11–45 эВ [99, 122–124]. В сапфире  $E_d$  для атомов Al – 40 эВ, кислорода O – 70 эВ [125], или Al – 24 эВ, O – 78 эВ [126], или Al – 20 эВ, O – 50 эВ [127]. Для  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , аморфного кремния значения  $E_d$  в литературе не найдены. В дальнейшем для определенности примем следующие значения  $E_d$ : для  $c\text{-Si}$  21 эВ (наиболее распространенное значение [99, 124]), для  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 40 эВ для атомов алюминия и 70 эВ для кислорода, для всех атомов других материалов  $E_d = 20$  эВ (значение  $E_d$ , оцененное Зейтцем из общих соображений для большой группы веществ [99, 123]).

#### **2.1.4 Результаты расчета профилей пространственного распределения имплантируемых ионов и радиационных дефектов с учетом переходного слоя, отличающегося по плотности и химическому составу от кремния**

Расчеты по программе TRIS [109, 116] профилей пространственного распределения внедренных ионов и возникающих при этом РТД проведены для ионов бора ( $\text{B}^+$ ) с начальной энергией ( $E_{\text{ИИ}}$ ) из интервала 30–120 кэВ, фосфора ( $\text{P}^+$ ) –  $E_{\text{ИИ}}$  из интервала 60–180 кэВ, кислорода ( $\text{O}^+$ ) –  $E_{\text{ИИ}}$  из интервала 80–120 кэВ, кремния ( $\text{Si}^+$ ) –  $E_{\text{ИИ}}$  из интервала 150–180 кэВ. Легирование ионами  $\text{B}^+$  используется в технологии КМОП/КНС БИС для формирования « $p$ -карманов»  $n$ -канальных МОП транзисторов, изготавливаемых на подложках с  $n$ -типом

проводимости. Легирование ионами  $P^+$  ( $E_{\text{ии}} = 60$  кэВ) используется для создания сильно легированных  $n^+$ - областей стоков и истоков таких транзисторов, а имплантация с энергией 180 кэВ – для компенсации эффекта автолегирования КНС с проводимостью  $n$ -типа алюминием из сапфира в процессе эпитаксии и высокотемпературных обработок. Имплантацией ионов  $O^+$  [82, 83] или  $Si^+$  [4, 5, 84] осуществляется аморфизация области вблизи границы раздела  $Si/Al_2O_3$ , содержащей наибольшее количество ростовых дефектов кристаллической структуры, с целью повышения кристаллического совершенства приборного слоя путем его последующей твердофазной рекристаллизации. В случае имплантации кислорода предполагается, что после отжига гетероструктур КНС, он связывается с алюминием, попавшим в приборный слой в результате автолегирования, образуя прослойку  $Al_2O_3-Al_2SiO_5-SiO_2$ . Наибольшая концентрация алюминия – вблизи границ раздела  $Si/Al_2O_3$  (рисунок 1.2).

При глубоком легировании и аморфизации приборного слоя гетероструктур КНС выбор оптимальных значений энергии имплантации ионов  $B^+$ ,  $P^+$ ,  $O^+$ ,  $Si^+$  обусловлен тем, что основная их доля должна достигать области вблизи границы  $Si/Al_2O_3$ . С другой стороны повреждение гетерограницы при имплантации должно быть минимальным из-за более эффективного, чем в объемном материале, образования вблизи нее радиационных дефектов, которые могут влиять на электрофизические свойства приборного слоя. Для достижения аморфизации кремния вблизи границы  $Si/Al_2O_3$  при внедрении  $O^+$  или  $Si^+$  необходимо, чтобы максимум профиля распределения радиационных дефектов лежал в этой области структуры при минимальном повреждении сапфира, радиационные дефекты в котором не отжигаются при температурах менее  $1000^\circ\text{C}$  и препятствуют качественной рекристаллизации кремния [76].

Профили распределения внедренных атомов бора ( $E_{\text{ии}}$  равна 80 и 100 кэВ), фосфора ( $E_{\text{ии}} = 180$  кэВ), кислорода ( $E_{\text{ии}} = 100$  кэВ), кремния ( $E_{\text{ии}} = 160$  кэВ), рассчитанные по программе TRIS для вариантов модели строения КНС ПС- $Al_2SiO_5$ , ПС- $aSi$ , ПС- $cSi$ , представлены на рисунках 2.4а, 2.5а, 2.6а, 2.7а, 2.8а соответственно. На рисунках 2.4б и 2.5б представлены рассчитанные по трем моделям профили распределения РТД, на примере вакансий алюминия в КНС, характеризующие радиационные повреждения сапфира внедряемыми ионами  $B^+$ , на рисунке 2.6б – вакансий кислорода в КНС, характеризующие радиационные повреждения  $SiO_2$  и сапфира внедряемыми ионами  $P^+$ , на рисунке 2.7б – вакансий кремния в КНС при внедрении ионов  $O^+$ , на рисунке 2.8б – вакансий алюминия в КНС, характеризующие радиационное повреждение сапфира при внедрении ионов  $Si^+$ . Толщина ПС для вариантов модели КНС ПС- $Al_2SiO_5$  и ПС- $aSi$  составляла 50 нм, для модели ПС- $cSi$  приборный слой задавался сплошным. Профили распределения ионов фосфора, имплантируемых в КНС с энергией 60 кэВ, здесь не представлены, так как влияние переходного слоя и гетерограницы  $Si/Al_2O_3$  на них пренебрежимо мало.

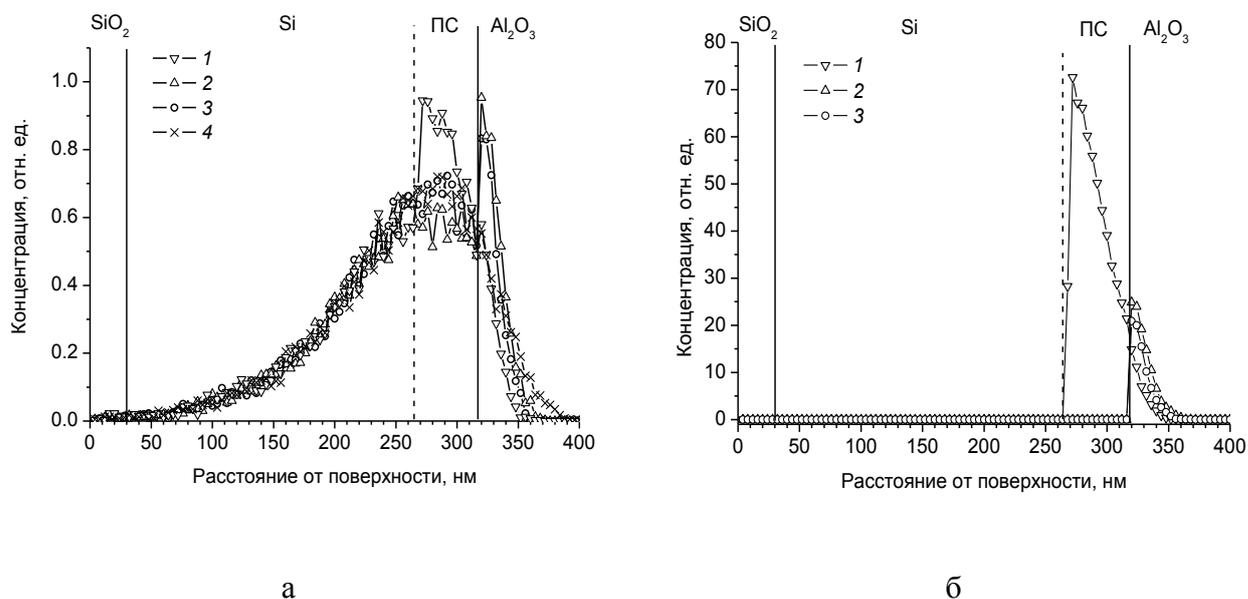


Рисунок 2.4 – Профили пространственного распределения внедренных с энергией 80 кэВ ионов бора (а) и образовавшихся при этом вакансий алюминия (б), рассчитанные по программе TRIS для разных моделей КНС: 1 – PC-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, 2 – PC-aSi, 3 – PC-cSi. Профиль 4 – в объемном кремнии.

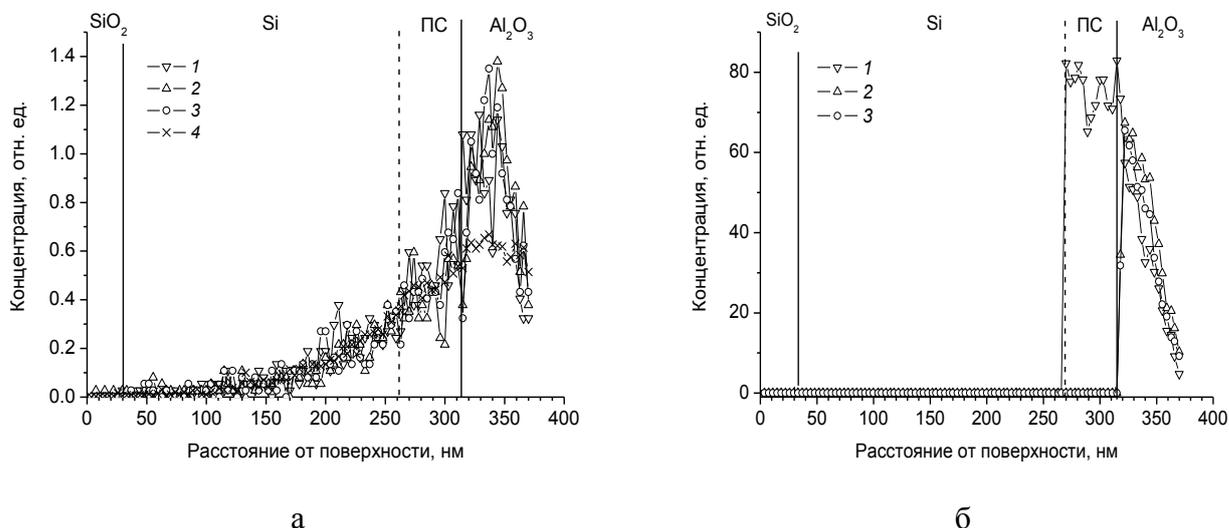


Рисунок 2.5 – Профили пространственного распределения внедренных с энергией 100 кэВ ионов бора (а) и образовавшихся при этом вакансий алюминия (б), рассчитанные по программе TRIS для разных моделей КНС: 1 – PC-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, 2 – PC-aSi, 3 – PC-cSi. Профиль 4 – в объемном кремнии.

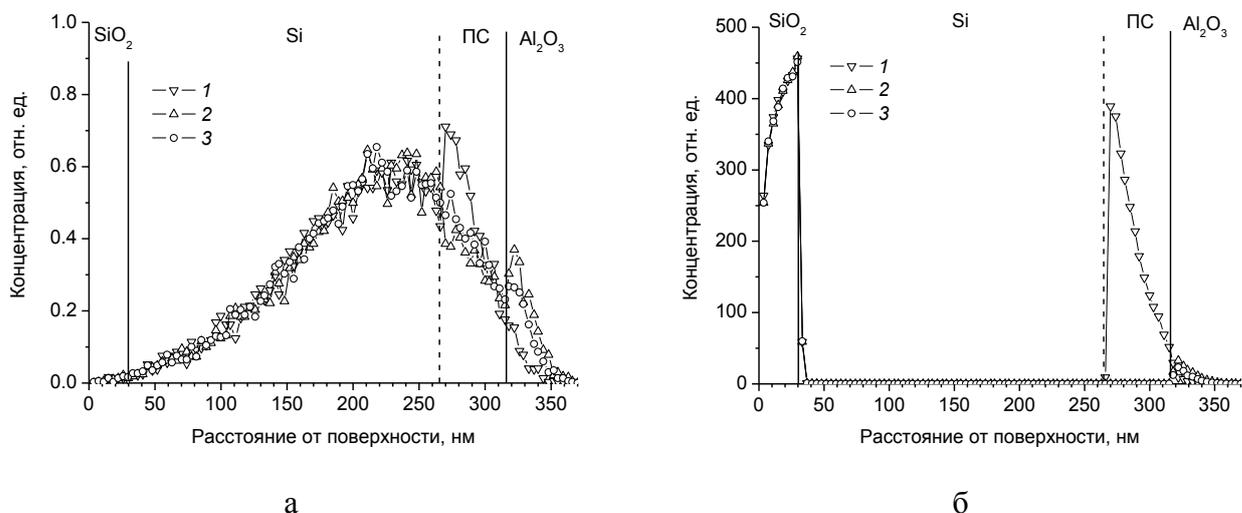


Рисунок 2.6 – Профили пространственного распределения внедренных с энергией 180 кэВ ионов фосфора (а) и образовавшихся при этом вакансий кислорода (б), рассчитанные по программе TRIS для разных моделей КНС: 1 – PC-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, 2 – PC-aSi, 3 – PC-cSi.

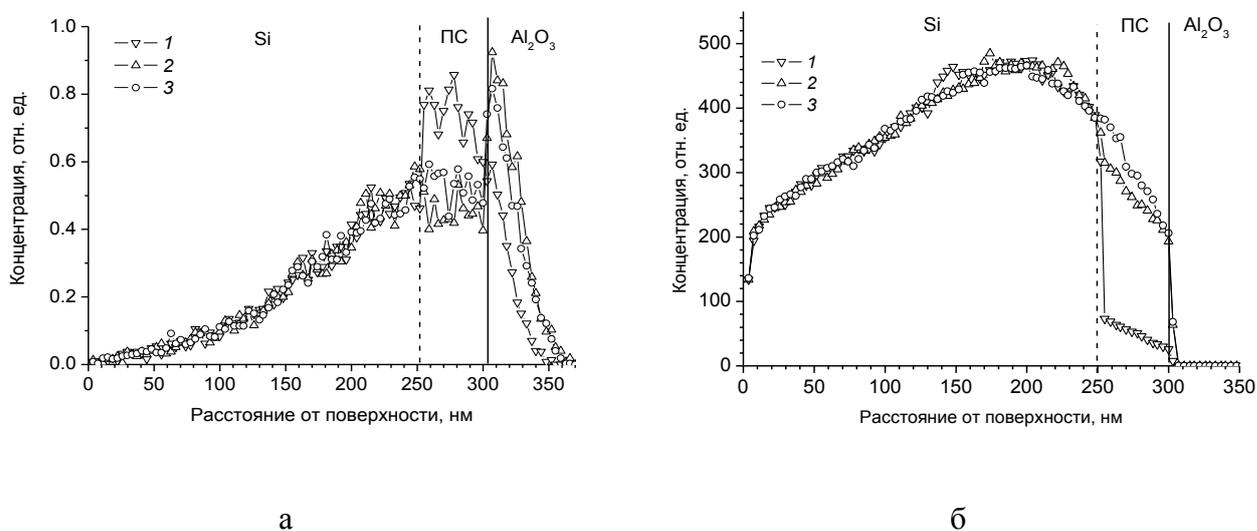


Рисунок 2.7 – Профили пространственного распределения внедренных с энергией 100 кэВ ионов кислорода (а) и образовавшихся при этом вакансий кремния (б), рассчитанные по программе TRIS для разных моделей КНС: 1 – PC-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, 2 – PC-aSi, 3 – PC-cSi.

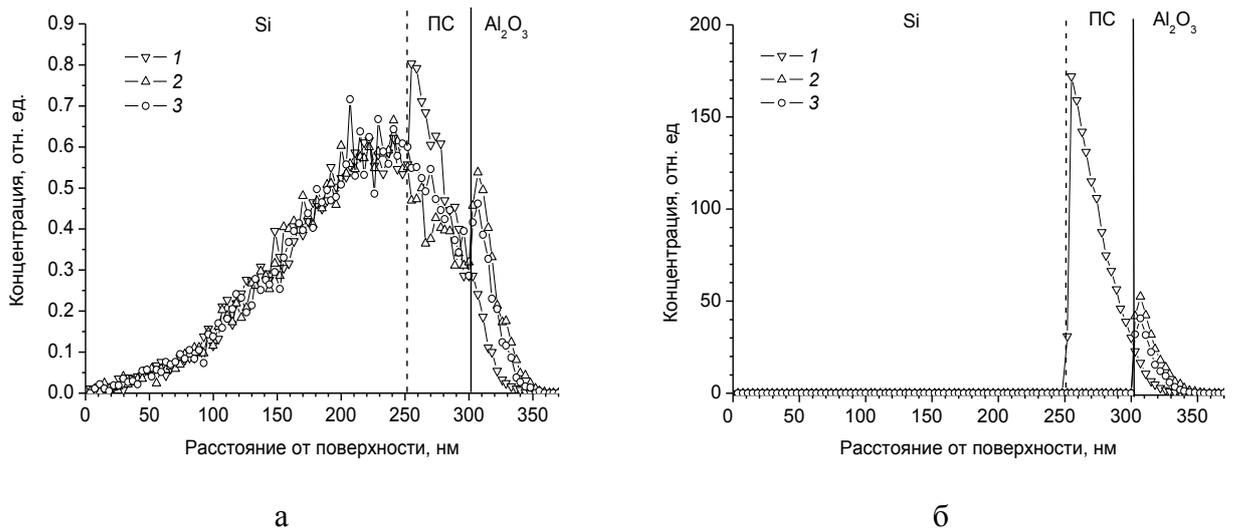


Рисунок 2.8 – Профили пространственного распределения внедренных с энергией 160 кэВ ионов кремния (а) и образовавшихся при этом вакансий алюминия (б), рассчитанные по программе TRIS для разных моделей КНС: 1 – ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , 2 – ПС- $\text{aSi}$ , 3 – ПС- $\text{cSi}$ .

Из приведенных на рисунках 2.4–2.8 данных видны следующие закономерности:

1. Форма профилей, полученных по разным моделям строения КНС практически совпадает вблизи облучаемой поверхности, и близка к характерной для объемного кремния, а также для структур КНС с толщиной приборного слоя 0,6 мкм (не показаны на рисунках), для всех типов ионов [112].

2. Для ионов  $\text{B}^+$  и  $\text{P}^+$  сильное отличие профилей внедряемых ионов наблюдается вблизи границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и в переходном слое: на профилях в этой области гетероструктуры возникает дополнительный максимум концентрации. Так, если переходный слой состоит из муллита (модель КНС ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ), то максимум локализован на границе кремний/переходный слой со стороны последнего, а на границе переходный слой/сапфир он отсутствует (рисунки 2.4а и 2.6а). Если переходный слой состоит из аморфного кремния (модель КНС ПС- $\text{aSi}$ ), то максимум концентрации внедренных ионов в сапфире более высокий, чем при отсутствии переходного слоя, а концентрация внедренных ионов в объеме переходного слоя меньше [116].

3. Поскольку при рассматриваемых энергиях имплантации глубина внедрения ионов  $\text{O}^+$  и  $\text{Si}^+$  больше, чем  $\text{B}^+$  и  $\text{P}^+$ , то и большая их доля достигает переходного слоя, где эффективно тормозится и накапливается в случае переходного слоя из муллита (рисунки 2.7а и 2.8а). В случае переходного слоя из аморфного кремния из-за уменьшения потерь энергии в нем (плотность ПС наименьшая) большая доля ионов внедряется в сапфир, создавая больше радиационных дефектов (например, рисунок 2.8б) [116].

4. Профиль концентрации вакансий Si в КНС (рисунок 2.7б) с переходным слоем из муллита имеет резкий спад, что объясняется уменьшением доли атомов Si в этом материале по

сравнению с кремнием. В модели ПС-aSi концентрация вакансий Si меньше, чем в ПС-cSi, так как меньше объемная концентрация атомов кремния в переходном слое (рисунок 2.7б).

5. Концентрация дефектов в сапфире, характеризующая его радиационное повреждение, на примере вакансий алюминия (рисунок 2.8б), варьируется в зависимости от плотности и состава переходного слоя: при большей плотности (муллит), большее число ионов тормозится и останавливается в нем, и повреждение сапфира минимально, в случае переходного слоя из аморфного кремния закономерность обратная.

6. При имплантации ионов  $B^+$  с энергией 100 кэВ (рисунок 2.5а), достаточной для достижения границы  $Si/Al_2O_3$  большим числом ионов, максимум легирующей примеси локализован в сапфире, а не в приборном слое. То же происходит при имплантации ионов  $O^+$  с энергией 120 кэВ, но характерное влияние переходного слоя различного строения на профили  $O^+$  проявляется уже при энергии имплантации 100 кэВ (рисунок 2.7б).

7. Параметры профилей пространственного распределения (средний проецированный  $(\bar{R}_p)$  и латеральный  $(\Delta\bar{R}_1)$  пробеги, дисперсии проецированного  $(\Delta\bar{R}_p)$  и латерального  $(\Delta\bar{R}_1)$  пробегов) при расчете по моделям КНС ПС- $Al_2SiO_5$ , ПС-aSi и ПС-cSi отличаются незначительно ( $\leq 3\%$ ). Их значения представлены в таблице 2.2. Таким образом при энергиях имплантации ионов  $B^+$   $E_{ии} \leq 100$  кэВ, ионов  $P^+$   $E_{ии} \leq 180$  кэВ, ионов  $O^+$   $E_{ии} \leq 100$ кэВ, ионов  $Si^+$   $E_{ии} \leq 160$  кэВ в КНС толщиной 0,3 мкм  $R_p$ ,  $\Delta\bar{R}_p$  отличаются от значений, полученных для объемного материала, менее чем на 3%. Это вывод сделан по результатам расчета по скорректированной модели гетероструктуры КНС (раздел 2.1.3) и отличается от результатов, полученных в [116].

Таблица 2.2 – Средний проецированный  $(\bar{R}_p)$  и латеральный  $(\bar{R}_1)$  пробеги, дисперсии проецированного  $(\Delta\bar{R}_p)$  и латерального  $(\Delta\bar{R}_1)$  пробегов ионов  $B^+$ ,  $P^+$ ,  $Si^+$ ,  $O^+$ , рассчитанные по программе TRIS для различных моделей строения гетероструктур КНС. Толщина ПС 50 нм.

	$\bar{R}_p \pm \Delta\bar{R}_p$ , нм	$\bar{R}_1 \pm \Delta\bar{R}_1$ , нм
$B^+$ , $E_{ии} = 80$ кэВ		
Модель КНС ПС- $Al_2SiO_5$	$225,2 \pm 57,0$	$58,7 \pm 66,1$
Модель КНС ПС-aSi	$227,5 \pm 59,8$	$59,9 \pm 67,0$
Модель КНС ПС-cSi	$226,2 \pm 59,5$	$59,6 \pm 67,0$
$B^+$ , $E_{ии} = 100$ кэВ		
Модель КНС ПС- $Al_2SiO_5$	$293,7 \pm 61,0$	$67,1 \pm 76,1$
Модель КНС ПС-aSi	$299,5 \pm 67,1$	$74,3 \pm 81,4$
Модель КНС ПС-cSi	$297,8 \pm 63,2$	$70,0 \pm 78,5$

Продолжение таблицы 2.2

$P^+, E_{и\text{и}} = 180 \text{ кэВ}$		
Модель КНС ПС- $Al_2SiO_5$	$212,7 \pm 63,9$	$49,9 \pm 56,7$
Модель КНС ПС-aSi	$216,5 \pm 67,1$	$50,4 \pm 57,3$
Модель КНС ПС-cSi	$214,7 \pm 66,1$	$50,6 \pm 56,9$
$O^+, E_{и\text{и}} = 100 \text{ кэВ}$		
Модель КНС ПС- $Al_2SiO_5$	$231,0 \pm 65,8$	$64,4 \pm 72,8$
Модель КНС ПС-aSi	$238,1 \pm 71,2$	$67,3 \pm 75,4$
Модель КНС ПС-cSi	$236,0 \pm 70,5$	$66,3 \pm 74,7$
$Si^+, E_{и\text{и}} = 160 \text{ кэВ}$		
Модель КНС ПС- $Al_2SiO_5$	$209,4 \pm 62,5$	$51,4 \pm 58,5$
Модель КНС ПС-aSi	$214,0 \pm 66,5$	$52,7 \pm 60,1$
Модель КНС ПС-cSi	$213,4 \pm 65,1$	$52,5 \pm 59,4$

8. Если энергия  $E_{и\text{и}}$  недостаточна для достижения ионами гетерограницы с переходным слоем (в случае, когда он состоит из муллита) или сапфиром (когда переходный слой отсутствует или образован аморфным кремнием), то форма профилей их пространственного распределения отличается от характерной для объемного материала незначительно. Этот факт подтверждается и экспериментальными данными работ [63–67]. В этих случаях расчет профилей в КНС может проводиться без учета переходного слоя. Дополнительный к максимуму в приборном слое максимум концентрации в переходном слое из муллита (модель ПС- $Al_2SiO_5$ ) возникает из-за отличия плотности и химического состава этого материала от кремния (модель ПС-cSi). В более плотном муллите величина неупругих потерь энергии внедряемых ионов больше, чем в кремнии и их торможение происходит более эффективно. Та же причина обуславливает возникновение максимума концентрации примеси в сапфире, когда начальная энергия имплантации ионов достаточна для пересечения ими гетерограницы Si/ $Al_2O_3$ . Влияние переходного слоя из менее плотного, чем кристаллический, аморфного кремния (модель ПС-aSi), проявляется в увеличении доли ионов, достигающих гетерограницы и тормозящихся в сапфире. Как показали расчеты, если начальная энергия ионов  $B^+$  превышает 80 кэВ, ионов  $P^+ - 180$  кэВ происходят их внедрение в сапфир, уменьшение уровня легирования приборного слоя и образование радиационных дефектов в сапфире, ухудшающих электрофизические свойства приборного слоя. Этот вопрос рассмотрен в главе 3.

При варьировании толщины переходного слоя различного строения, выявленные закономерности его влияния на профили пространственного распределения внедренных ионов и радиационных дефектов сохраняются, изменяется лишь степень их проявления. Так

увеличение толщины переходного слоя приведет к большим отличиям их формы по сравнению со случаем, когда переходный слой отсутствует, а с уменьшением толщины отличие будет пренебрежимо малым. Из приведенных на рисунках данных видно, что при толщинах переходных слоев 50 нм проявление его влияния может быть зафиксировано экспериментально (разница концентраций внедренных ионов и радиационных дефектов в структурах с переходным слоем будет более 25%, чем в структурах без него). Таким образом, переходный слой способствует перераспределению внедряемых ионов и изменению эффективности сопровождающего процесс имплантации дефектообразования между компонентами гетероструктуры КНС.

### **2.1.5 Модель влияние ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» на процессы, происходящие при ионной имплантации**

Предложенная в [128–132] модель строения приборного слоя КНС, учитывающая влияние ростовых дефектов кристаллической структуры (вариант 4, обозначенный  $\text{дефSi}$ ), основана на предположении о том, что вблизи дислокаций (полных или частичных) и состоящих из них более сложных дефектов (границ зерен, двойниковых ламелей, дефектов упаковки) пороговая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки отличается от характерной для совершенного кристалла [54, 55, 123, 133, 134]. Вблизи ростовых дефектов кристаллическая решетка сильно деформирована и действует электрическое поле [25]. Валентные связи атомов находятся в напряженном состоянии, а сами атомы – не в абсолютном, а в локальном минимуме свободной энергии. Поэтому для разрыва напряженных связей, смещения атомов из узлов кристаллической решетки и образования РТД необходимо сообщить им, кинетическую энергию, отличающуюся от той, которая характерна для совершенной решетки [123, 134, 135]. Дополнительное влияние на  $E_d$  в приборном слое КНС, по-видимому, оказывают действующие на него напряжения сжатия (около 0,6 ГПа), возникающие из-за рассогласования параметров кристаллических решеток кремния и сапфира. К тому же на границах раздела материалов гетероструктур  $E_d$  отличается от характерной для объемного материала вследствие возможного проявления тензорadiационного эффекта [134]. О случайном значении энергии смещения атомов из узлов кристаллической решетки в процессе внедрения ионов говорят такие факты: эволюция упругих волн от каскадов смещений в области, где происходит дефектообразование, разогрев решетки, перекрытие каскадов, накопление радиационных дефектов и разупорядочение кристаллической структуры. Таким образом, каждое очередное столкновение ускоренных частиц с атомами мишени происходит в локально

уникальных условиях.

Исследование влияние ростовых дефектов кристаллической структуры КНС на процессы, происходящие при внедрении ускоренных ионов, исследованы нами в [132]. В этой работе предложена модель, согласно которой влияние ростовых дефектов может проявляться в изменении значений таких параметров алгоритма моделирования траекторий [106], реализованного в программе TRIS, как длина свободного пробега между столкновениями и  $E_d$ . Учитывая, что в КНС концентрация дислокаций значительно превышает концентрацию дефектов других видов и для упрощения, дальнейшего рассмотрения проведено для этого типа ростовых дефектов. Краевые дислокации имеют цилиндрическую симметрию. Вокруг дислокационной линии можно выделить ядро в виде трубки радиусом  $R_0$ , полый или заполненной сильно деформированным материалом, и область радиусом  $R_1$ , в которой действуют существенные упругие напряжения и электрическое поле [25, 136]. При облучении ускоренные ионы и атомы отдачи пересекают дислокацию в различных направлениях под различными углами. С учетом того, что вероятность движения этих ускоренных частиц вдоль дислокационной линии мала, для упрощения геометрического описания и алгоритма моделирования траекторий, пересечение цилиндрической области дислокаций заменено пересечением сферической. На рисунке 2.9 представлено сечение этой модели ростового дефекта КНС.

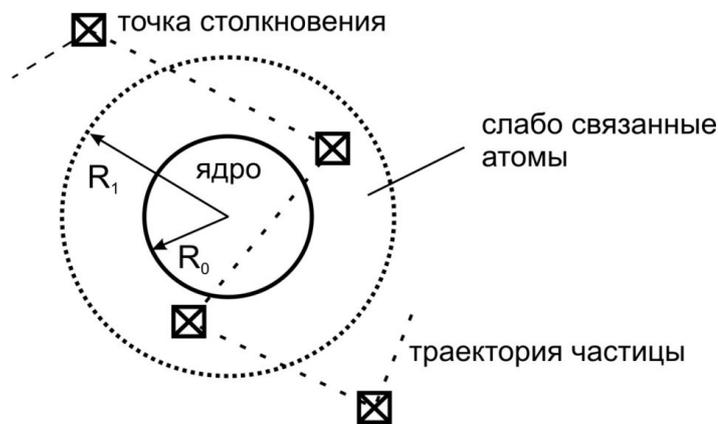


Рисунок 2.9 – Схема траектории ускоренной частицы по предложенному алгоритму в области ростового дефекта кристаллической структуры КНС

Ускоренные частицы попадают в сферу радиусом  $R_1$  ростового дефекта с вероятностью  $P$ , определяемой зависимостью плотности дефектов кристаллической структуры приборного слоя КНС от расстояния до его поверхности  $N_d(x)$  ( $\text{см}^{-2}$ ). Вероятность  $P$  можно вычислить следующим образом. Выделим плоскопараллельный слой толщиной  $dx$  с гранями площадью  $S$ , параллельными границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и свободной поверхности. Сечение попадания ускоренной частицы в сферу радиусом  $R_1$  можно вычислить как площадь эффективного круга,

равную  $S_1 = \pi R_1^2$ . Число сфер радиусом  $R_1$  в выделенном слое равно  $N_d(x)/dx \cdot S \cdot dx = N_d(x) \cdot S$ , здесь  $N_d(x)/dx$  – объемная концентрация ростовых дефектов в выделенном слое. Эффективная суммарная площадь ростовых дефектов, в которые могут попасть ускоренные частицы в слое  $dx$ :  $S_\Sigma = S_1 \cdot N_d(x) \cdot S$ . Тогда вероятность  $P$  определяется соотношением:

$$P = S_\Sigma/S = \pi R_1^2 \cdot N_d(x) \quad (2.1).$$

Для вычисления  $P$  использована аналитическая формула  $N_d(x)$  (1.1) [3, 15], вид этой зависимости представлен на рисунке 1.1. Вероятность  $P$  нормировалась на единицу делением вычисленных по формуле (2.1) значений на максимальное из них (вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Реализация события, состоящего в попадании ускоренной частицы в область ростового дефекта, определяется сравнением значения  $P$  для  $x$ , соответствующего ее положению, со значением псевдослучайного числа равномерно распределенного в интервале [0,1]. При положительном исходе этого события, до тех пор, пока движущаяся частица не покинула сферу радиусом  $R_1$  (но не попала в ядро ростового дефекта радиусом  $R_0$ ), при очередном столкновении с атомом  $E_d$  разыгрывается случайным образом, из равномерного распределения в интервале от  $E_d^{\min}$  до  $E_d^{\max}$ .  $E_d^{\max}$  – экспериментально определяемая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки.  $E_d^{\min}$  – минимальное значение энергии смещения, оцененное ниже. Попадая в ядро ростового дефекта, частица пересекает его по диаметру, в результате чего длина ее свободного пробега увеличивается на  $2R_0$ , а ускоренная частица испытывает только электронное (неупругое) торможение.

Параметр  $R_1$  – радиус области искаженной кристаллической решетки вокруг ростового дефекта (для расчетов в качестве примера рассматривается краевая дислокация с вектором Бюргерса  $\vec{b} = a/2 \langle 110 \rangle$  и плоскостями скольжения  $\{111\}$  и  $\{001\}$ ) можно оценить из условия равенства энергии взаимодействия точечных дефектов с дислокациями и энергии тепловых колебаний атомов на расстоянии, где этим взаимодействием можно пренебречь. В континуальном приближении такое условие можно записать [136]:

$$W = \frac{\mu \cdot b}{3\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot \Delta V \cdot \frac{\sin\theta}{r} = \frac{3}{2} kT, \quad (2.2)$$

где

$\mu$  – модуль сдвига (для кремния  $\mu = 70,8$  ГПа [13]);

$b = a\sqrt{2}/2$  – модуль вектора Бюргерса ( $a$  – постоянная кристаллической решетки, для кремния  $a = 0,357$  нм);

$\nu$  – коэффициент Пуассона (для кремния  $\nu = 0,21$  [13]);

$\Delta V$  – разность объемов точечного дефекта и атома решетки.

Поскольку максимальная энергия взаимодействия точечных дефектов и дислокации достигается при значениях полярного угла  $\Theta = \pi/2$  и  $\Theta = 3\pi/2$ , то  $R_1$  определяется выражением:

$$R_1 = \frac{2 \cdot \mu \cdot b \cdot (1 + \nu) \cdot \Delta V}{9\pi \cdot (1 - \nu) \cdot k_B T} \quad (2.3).$$

Каждый вид точечного дефекта (собственные точечные дефекты или примеси) в зависимости от соотношения его размера и атома кристалла-матрицы будет характеризоваться своим радиусом  $R_1$ . Поэтому целесообразно для моделирования процесса возникновения первичных РТД вблизи ростового дефекта рассмотреть отдельно изменение объема вблизи вакансии  $\Delta V_v$  и междоузельного атома  $\Delta V_i$ .

Приращение объема для вакансий:

$$\Delta V_v = \frac{4\pi}{3} [(r_0 - \delta_0)^3 - r_0^3] \approx -3 \frac{\delta_0}{r_0} V_0 \quad (2.4),$$

где

$r_0$  – радиус атома кристалла-матрицы (для кремния  $r_0 = 0,117$  нм);

$V_0$  – объем атома кристалла-матрицы;

$\delta_0$  – радиальное смещение материала к центру вакансии.

Для изотропной упругой среды  $\delta_0$  составляет [137]:

$$\delta_0 = - \frac{r_0}{1 + 4\mu \cdot r_0 / (3\gamma)} \quad (2.5),$$

где

$\gamma$  – поверхностная энергия среды ( $\gamma = 2,13$  Дж/м<sup>2</sup> [138]).

Для кремния из формулы (2.3) с учетом (2.4) и (2.5) и приведенных значений постоянных при  $T = 23^\circ\text{C}$ ,  $R_1 = 2,3$  нм.

В предположении, что междоузельный атом занимает тетраэдрическое междоузлие в решетке кремния и радиус сферы, вписанной в тетраэдрическую пустоту, составляет  $r_t = 0,8r_0$  [139], приращение объема  $\Delta V_i = 4\pi/3 \cdot (r_t^3 - r_0^3)$ . С учетом этого по формуле (2.3) получим  $R_1 = 2,3$  нм.

Значение  $R_0$  – радиус ядра дислокации, можно принять равным  $2b = a\sqrt{2}$  [136], тогда  $R_0 \approx 0,8$  нм.

Вопрос о том, какой тип дислокаций доминирует в приборном слое КНС (60-градусные с плоскостью скольжения  $\{111\}$  или краевые с плоскостью скольжения  $\{001\}$ ), пока не имеет однозначного ответа. На сегодня можно лишь предположить, что краевые дислокации с плоскостью скольжения  $\{001\}$ , совпадающей с кристаллографической ориентацией

эпитаксиального слоя кремния, являются основным видом дислокаций несоответствия, частично компенсирующих различие периодов решетки сапфира и кремния.

Значение  $E_d^{\min}$  вычислялось по формуле:

$$E_d^{\min} = E_{\text{св}} + W_v + W_i + E_v^m + E_i^m,$$

где

$E_{\text{св}}$  – энергия связи атома в кристаллической решетке облучаемого материала;

$W_{v(i)}$  – потенциальный барьер вблизи ростового дефекта для первичных РТД ( $v$  – вакансии,  $i$  – междоузельного атома);

$E_{v(i)}^m$  – энергия миграции вакансий (наименее подвижной компоненты пары Френкеля).

Энергию  $E_{\text{св}}$  по нашему предположению можно представить в виде

$$E_{\text{св}} = E_g \cdot Z$$

где

$E_g$  – ширина запрещенной зоны (для кремния  $E_g = 1,12$  эВ);

$Z$  – координационное число (для кремния  $Z = 4$ );

Для кремния  $E_{\text{св}} = 4,48$  эВ, что близко к энергии связи в недеформированном кристалле, полученному в работе [140]:  $E_{\text{св}} = 4,64$  эВ.

Барьеры  $W_{v(i)}$  для первичных РТД вблизи ростового дефекта (дислокации) обусловлены взаимодействием вакансий и междоузельных атомов с упругим и электрическим полями, создаваемыми дефектом. Как указывалось в [139] вклад в  $W$  электростатического взаимодействия почти на порядок величины меньше упругого размерного, особенно на малых расстояниях от источника деформаций. Поэтому ниже под барьером  $W_{v(i)}$  понимается значение энергии взаимодействия дислокации: притяжение вакансии в область сжатия над плоскостью скольжения, и междоузельного атома в область расширения под этой плоскостью. Для численных оценок  $W_{v(i)}$  можно использовать формулу (2.2) при  $r = R_0 = 2b$ , и значения  $\Delta V_v$  и  $\Delta V_i$ , полученные выше. Тогда для вакансий  $W_v \approx 0,12$  эВ, для междоузельных атомов  $W_i \approx 0,12$  эВ. Величина барьера может несколько уменьшаться вследствие образования примесных атмосфер вокруг дислокаций. Однако, как показано в [136], при плотности дислокаций порядка  $10^{12}$  см<sup>-2</sup> содержание примесей (алюминия, кислорода и др., см. главу 1) в этих атмосферах не превышает 0,1% от концентрации в материале, что изменяет  $W$  на величину того же порядка.

Для того, чтобы компоненты первичных РТД покинули область радиуса  $R_1$  вокруг ростового дефекта минимальная энергия ускоренной частицы при упругом столкновении с атомом кристаллической решетки должна расходоваться не только на разрыв межатомных

связей и преодоление барьеров, но и на миграцию вакансий и междоузельных атомов из зоны их генерации. Выбор энергии миграции как слагаемого в  $E_d^{\min}$  соответствует условию независимого существования возникших при облучении компонент пар Френкеля, когда при упругом столкновении ускоренных частиц с атомами решетки, междоузельные атомы и вакансии получают энергию, превышающую барьер их аннигиляции и равную энергии миграции. При моделировании целесообразно использовать верхние пределы значений энергий миграции собственных точечных дефектов. В случае кремния эти величины составляют [141] для нейтральной вакансии  $E_v^m = 0,33$  эВ, для междоузельного атома  $E_v^m = 0,13$  эВ. Тогда  $E_d^{\min} = 5,18$  эВ.

Описанный алгоритм моделирования был реализован в модифицированной программе TRIS. Блок-схема алгоритма представлена на рисунке 2.10. Описание этапов моделирования, относящихся к традиционному алгоритму моделирования траекторий ускоренных ионов в веществе, дано в [106].

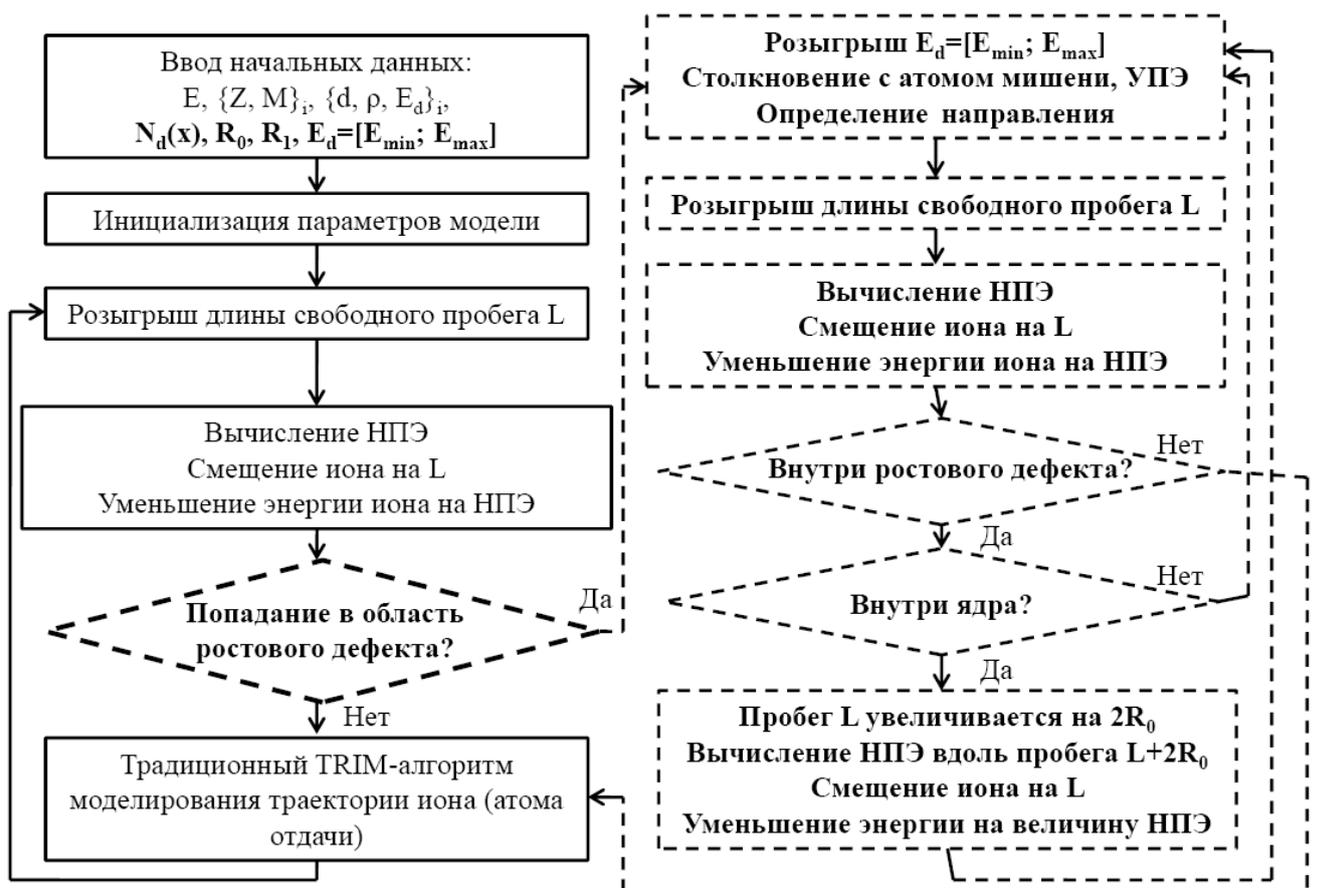


Рисунок 2.10 – Блок-схема модифицированного алгоритма моделирования методом Монте-Карло траекторий ускоренных частиц в гетероструктурах с учетом ростовых дефектов кристаллической структуры (введенные нами этапы, выделенные пунктиром).

$E$  – начальная энергия ионов;  $\{Z, M\}_i$  – атомный номер и атомная масса ионов и атомов «мишени»;  $\{d, \rho, E_d\}_i$  – толщина слоев, плотность, энергии смещения атомов в каждом слое «мишени».

Остальные обозначения введены в тексте и на рисунке.

### 2.1.6 Результаты расчета профилей пространственного распределения имплантируемых ионов и радиационных дефектов с учетом влияния ростовых дефектов кристаллической структуры

По описанной в разделе 2.1.5 модели строения приборного слоя КНС (вариант 4, дефSi), учитывающий ростовые дефекты кристаллической структуры приборного слоя, были проведены расчеты параметров профилей пространственного распределения ионов бора, внедряемых с энергиями 30 и 80 кэВ, и ионов фосфора, внедряемых с энергиями 60 и 180 кэВ, а также возникающих при этом первичных РТД. Аналогичные расчеты был проведен без учета ростовых дефектов кристаллической структуры (вариант модели 3, ПС-сSi). Задавались следующие значения параметров:  $E_d^{\max}$  для кремния – 21 эВ [99, 124], значения  $E_d$  в сапфире принимались равными 40 эВ для атомов алюминия и 70 эВ для кислорода [125]. Толщина эпитаксиального слоя КНС составляла 0,3 мкм, сапфировой подложки – 540 мкм.

Профили пространственного распределения концентрации атомов внедренной примеси, полученные при расчетах по моделям дефSi (4) и ПС-сSi (3), отличаются незначительно, поэтому они не представлены. Средний проецированный и латеральный пробеги ионов, их дисперсии отличаются менее чем на 5% при переходе от модели к модели для обоих типов ионов при всех рассматривавшихся энергиях имплантации.

Профили пространственного распределения РТД на примере вакансий кремния приведены на рисунках 2.11 (имплантация бора) и 2.12 (имплантация фосфора). Сравнительный анализ представленных на рисунках данных показывает, что профили, полученные по моделям дефSi (4) и ПС-сSi (3), сходны по форме, как для легких ионов (бор), так и для ионов средних масс (фосфора) во всем рассмотренном интервале энергий имплантации. Основное отличие заключается в амплитуде профиля, то есть концентрации вакансий на заданном расстоянии от поверхности приборного слоя ( $x_i$ ). Для количественной характеристики наблюдаемых отличий были введены абсолютное приращение концентрации вакансий ( $\varepsilon_i$ ) при  $x_i$  (соответствует  $i$ -му столбцу гистограммы выходных данных), среднее по профилю приращение концентрации ( $\bar{\varepsilon}$ ) и максимальное отличие ( $\varepsilon_{\max}$ ), которые вычислялись по формулам:

$$\varepsilon_i = |N_i^{\text{дефSi}} - N_i^{\text{ПС-сSi}}| / N_i^{\text{дефSi}} \cdot 100\%, \quad \bar{\varepsilon} = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{100} \varepsilon_i, \quad \varepsilon_{\max} = \max(\varepsilon_i) \quad (2.2),$$

где

$N_i^{\text{дефSi}}$ ,  $N_i^{\text{ПС-сSi}}$  – концентрации вакансий на расстоянии  $x_i$  от облучаемой поверхности, при расчете по моделям дефSi и ПС-сSi соответственно.

Значения  $\bar{\varepsilon}$  и  $\varepsilon_{\max}$  для вакансий кремния при внедрении ионов бора и фосфора приведены в таблице 2.4. На рисунках 2.11 и 2.12 приведены прямые 5 и 6, аппроксимирующие изменения вдоль профиля приращения концентрации вакансий  $\varepsilon_i$  (формула (2.2)).

Таблица 2.4 – Рассчитанные значения  $\bar{\varepsilon}$  и  $\varepsilon_{\max}$  (в процентах) для вакансий кремния при внедрении ионов бора и фосфора

Тип иона	Бор		Фосфор	
Энергия имплантации, кэВ	30	80	60	180
$\bar{\varepsilon}$	30	21	36	23
$\varepsilon_{\max}$	100	41	100	42

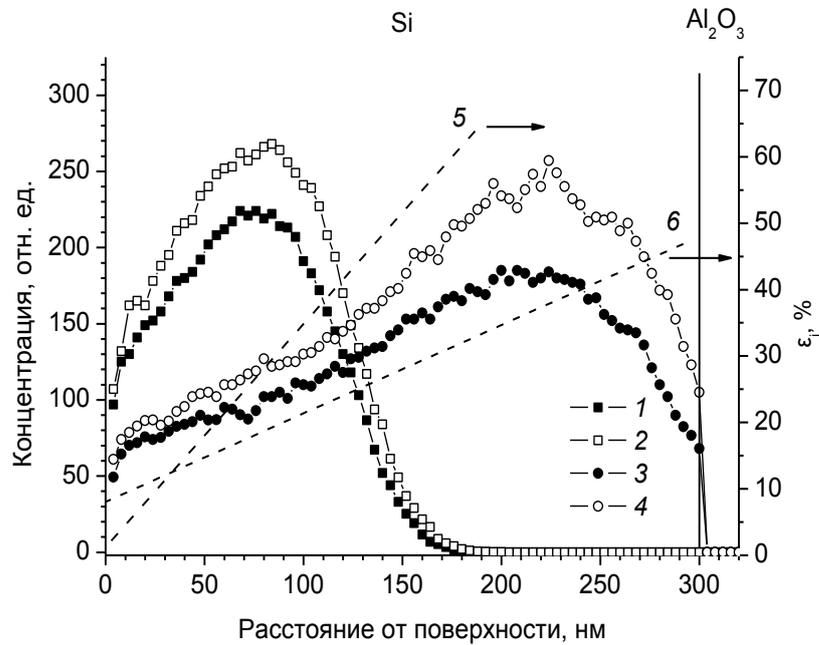


Рисунок 2.11 – Профили распределения вакансий кремния при внедрении ионов бора с энергиями 30 (1, 2) и 80 (3, 4) кэВ в гетероструктуре КНС, рассчитанные по модели с учетом ростовых дефектов дефSi (2, 4) и без учета ПС-сSi (1, 3). Аппроксимация изменения вдоль профилей величины  $\varepsilon_i$  (формула (2.2)) для различных энергий имплантации, кэВ: 5 – 30, 6 –

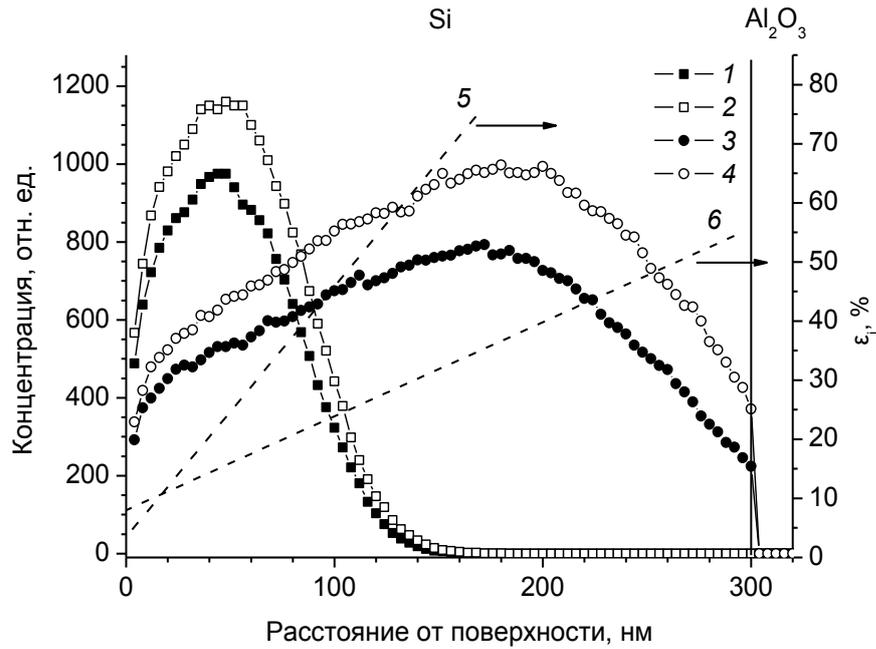


Рисунок 2.12 – Профили распределения вакансий кремния при внедрении ионов фосфора с энергиями 60 (1, 2) и 180 (3, 4) кэВ в гетероструктуре КНС, рассчитанные по модели с учетом ростовых дефектов дефSi (2, 4) и без учета ПС-сSi (1, 3). Аппроксимация изменения вдоль профилей величины  $\epsilon_i$  (формула (2.2)) для различных энергий имплантации, кэВ: 5 – 60, 6 – 180

Концентрация РТД при расчете по модели КНС дефSi больше, чем при расчете по модели ПС-сSi, вдоль всего профиля за счет влияния областей с  $E_d < E_d^{\max}$ . Наибольшие значения  $\epsilon_i$  (отличие концентрации РТД, рассчитанных по двум моделям) локализовано вблизи максимумов профилей РТД. В то же время для дальних от облучаемой поверхности спадов огибающих профилей концентрации характерны бóльшие значения  $\epsilon_i$ , что видно по наклону прямых 5 и 6. Таким образом, механизм влияния ростовых дефектов кристаллической структуры по предложенной модели заключается в уменьшении порога дефектообразования внутри локальных областей, что обуславливает увеличение концентрации образующихся при ионной имплантации РТД по сравнению с совершенным кристаллом, а также с возрастанием концентрации ростовых дефектов (локальных областей). Поскольку в процессе облучения происходит рекомбинация РТД, то результаты расчетов по предложенной модели – верхняя оценка параметров, характеризующих протекание процессов образования радиационных дефектов при ионно-лучевом легировании материалов с высокой концентрацией ростовых дефектов кристаллической структуры.

## 2.2 Моделирование процесса аморфизации приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» имплантацией ионов кремния или кислорода

Как указывалось в главе 1, технологическая обработка выращенных методом газофазной эпитаксии гетероструктур КНС, состоящая в аморфизации части приборного слоя имплантацией ионов кислорода или кремния с последующей твердофазной рекристаллизацией при повышенной температуре от сохранившейся кристаллической затравки, рассматривается как перспективный метод повышения его структурного совершенства и улучшения электрофизических характеристик. В настоящее время для отечественной микроэлектроники актуально получение гетероструктур КНС с толщиной совершенного приборного слоя менее 0,3 мкм. Оптимальный режим имплантации аморфизирующих ионов может быть выбран на основе данных о пространственном распределении аморфных областей в слое кремния в зависимости от энергии и типа ионов, дозы, плотности ионного тока и температуры облучения. Так же необходимы данные о пространственном распределении радиационных дефектов, образующихся в областях гетероструктуры не перешедших в аморфное состояние, поскольку их влияние будет сказываться на протекании твердофазной рекристаллизации, остаточном ПДС и конечных электрофизических свойствах приборного слоя.

Теоретическое исследование процесса аморфизации материалов при ионной имплантации возможно с помощью расчета методом Монте-Карло пространственного распределения радиационных дефектов и плотности энергии, выделившейся в результате упругих столкновений ускоренных ионов и атомов отдачи. Существуют два критерия перехода материала из кристаллического в аморфное состояние: первый состоит в том, что плотность энергии, выделившейся в упругих столкновениях ускоренных частиц, превышает некоторое критическое значение  $УПЭ_{кр}$ , [142, 143], второй – концентрация радиационных дефектов превышает некоторое критическое значение  $СНА_{кр}$ , [126, 127]. В последнем случае для количественной характеристики процессов используется число смещений на атом (СНА, в англоязычной литературе, displacement per atom, dpa), которое вычисляется по формуле [126]:

$$СНА = N_v/N_{at}, N_v = N_{def}D$$

где

$N_v$  – концентрация РТД,  $см^{-3}$ ;

$N_{at}$  – концентрация атомов материала,  $см^{-3}$ ;

$N_{def}$  – число вакансий (или междоузельных атомов),  $1/см$ ;

$D$  – доза облучения,  $см^{-2}$ .

Величины  $УПЭ_{кр}$  и  $СНА_{кр}$ , необходимые для аморфизации, определяются сопоставлением результатов моделирования процессов дефектообразования и экспериментальных данных о концентрации дефектов в облученном материале [126, 127, 142, 143]. Имеющиеся в литературе данные о значениях  $УПЭ_{кр}$  и  $СНА_{кр}$ , необходимых для аморфизации компонентов гетероструктур КНС, приведены в таблице 2.5.

Таблица 2.5 – Литературные данные о значениях  $УПЭ_{кр}$  и  $СНА_{кр}$ , необходимых для аморфизации компонентов гетероструктуры КНС при различных температурах облучения ( $T_{обл}$ )

Материал	$УПЭ_{кр}$ , эВ/см <sup>3</sup>	$СНА_{кр}$
Кремний	$T_{обл} = -196^{\circ}\text{C}$	
	$6 \cdot 10^{23}$ [143]	1 [144]
	$T_{обл} = -173^{\circ}\text{C}$	
	–	Si (30 кэВ) → Si: 0,4–0,6 [145]
	$T_{обл} = 23^{\circ}\text{C}$	
	$2 \cdot 10^{24}$ [60]	Si (30 кэВ) → Si: 2–4 [145]
Сапфир	$T_{обл} = -196^{\circ}\text{C}$	
	$< 3 \cdot 10^{23}$ [146]	3–4 [146]
	$T_{обл} = 23^{\circ}\text{C}$	
	$3 \cdot 10^{23}$ [146]	300 [146]

В работах [73–77] показано, что оптимальный режим ионной имплантации для аморфизации КНС с целью последующей его рекристаллизации и получения менее дефектного приборного слоя должен обеспечивать выполнение следующих условий:

- кремний вблизи границы раздела с сапфиром, где концентрация ростовых дефектов кристаллической структуры максимальна, должен быть аморфизирован;
- концентрация радиационных дефектов в сапфире должна быть минимальной, поскольку они не отжигаются даже при максимально допустимых в КНС технологии температурах (ниже  $1000^{\circ}\text{C}$ ) и влияют на процесс рекристаллизации и структурное совершенство рекристаллизованного приборного слоя [76];
- загрязнение приборного слоя кремния алюминием и кислородом в результате каскадного перемешивания и диффузии из сапфира при отжиге гетероструктур КНС должно быть минимальным, поскольку обе эти примеси существенно влияют на электрофизические свойства кремния [4, 5, 20, 75]. Кислород влияет на скорость твердофазной рекристаллизации, а также образует преципитаты  $\text{SiO}_x$ , влияющие и на структурное совершенство рекристаллизованного приборного слоя [147].

В работах [82–86, 148] приведены наиболее поздние отечественные результаты исследований, имевших целью получение совершенных слоев КНС толщиной 0,3 мкм и менее. В [82, 83] экспериментально подбирался оптимальный режим имплантации ионов кислорода для аморфизации КНС: энергия ионов 120 кэВ, интервал доз  $(8,0–12,5) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  при температуре минус 143°C. В [84, 85] рассматривалась имплантация ионов кремния с энергией 150 кэВ дозами из интервала  $(3,0–10,5) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  при температуре 0°C, при этом рекристаллизация приборного слоя происходила от границы раздела кремний/сапфир.

Для построения профилей аморфизации приборного слоя КНС нами были использованы результаты расчета по программе TRIS профилей пространственного распределения УПЭ ионов и атомов отдачи и концентрации первичных РТД, возникающих при имплантации ионов кислорода или кремния в указанных режимах. При расчетах рассматривались оба критерия аморфизации: по энергии, выделившейся в результате упругих столкновения и по количеству смещений на атом. Для кремния при температуре облучения минус 143°C принимались значения (таблица 2.5):  $\text{УПЭ}_{\text{кр}} = 6 \cdot 10^{23} \text{ эВ/см}^3$  (соответствует  $T_{\text{обл}} = -196^\circ\text{C}$ ),  $\text{СНА}_{\text{кр}} = 0,6 \text{ с.н.а}$  (соответствует верхнему пределу возможных значений при  $T_{\text{обл}} = -173^\circ\text{C}$ ). При  $T_{\text{обл}} = 0^\circ\text{C}$  использовались значения порогов аморфизации при 23°C, для  $\text{СНА}_{\text{кр}}$  – нижняя граница интервала (2,0 с.н.а).

Значения СНА в кремнии, полученные с помощью моделирования, зависят от выбора величины  $E_d$ , которое может варьироваться в широких пределах [122, 124]. На примере имплантации ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозой  $7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  было рассмотрено влияние параметра  $E_d$  на профили аморфизации приборного слоя КНС. Расчеты по программе TRIS проведены для трех значений  $E_d$ : 11, 21, 45 эВ [122, 124]. Значения  $E_d$  в сапфире для атомов кислорода – 40 эВ, алюминия – 70 эВ [125]. Полученные профили УПЭ и СНА представлены на рисунок 2.13. Усреднение результатов расчета проводилось по  $10^4$  статистических испытаний.

Из представленных на рисунке 2.13а данных видно, что значение пороговой энергии смещения атомов кремния из узлов кристаллической решетки  $E_d$  не влияет на значения УПЭ ионов и атомов отдачи. Таким образом, выполнение критерия аморфизации  $\text{УПЭ} > \text{УПЭ}_{\text{кр}}$  не зависит от значения  $E_d$ . Как видно из рисунка 2.13б СНА сильно зависит от значения этого параметра: при увеличении  $E_d$  в два раза величина СНА уменьшается в 1,5–2 раза. Таким образом, результаты расчетов профилей аморфизации по критерию  $\text{СНА} > \text{СНА}_{\text{кр}}$  также могут сильно варьироваться из-за неопределенности выбора значения  $E_d$ . Учитывая дефектность приборного слоя КНС (раздел 2.1.5), по-видимому, целесообразно выбирать значения  $E_d$  близкие к нижнему пределу интервала значений этого параметра 11–45 эВ [122, 124]. Поэтому приведенные ниже профили СНА в кремнии рассчитаны при  $E_d = 11 \text{ эВ}$ . Значения  $E_d$  в сапфире для атомов кислорода – 40 эВ, алюминия – 70 эВ [125].

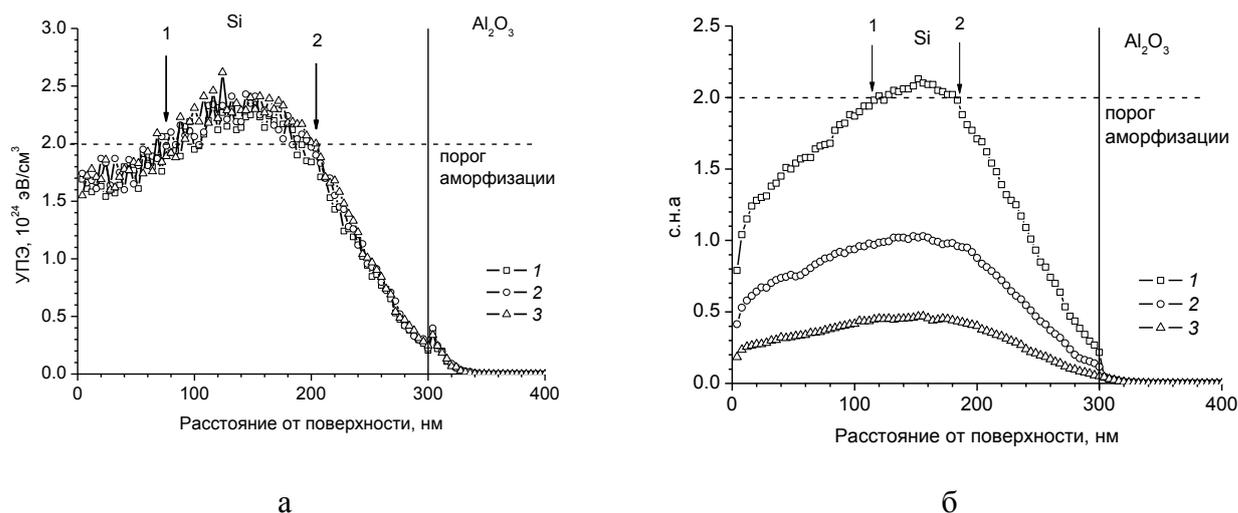


Рисунок 2.13 – Рассчитанные по программе TRIS профили распределения УПЭ (а) и СНА (б) в КНС при имплантации ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозой  $7,5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> для значений  $E_d$  в кремнии, эВ: 1 – 11, 2 – 21, 3 – 45. Температура облучения 0°C.

Рассчитанные профили распределения УПЭ и СНА в КНС, характеризующие его аморфизацию, приведены на рисунках 2.14 (имплантация ионов кремния с энергией 150 кэВ) и 2.15 (имплантация ионов кислорода с энергией 120 кэВ) [149]. Результаты анализа, полученных профилей аморфизации приведены в таблицах 2.6 и 2.7. На рисунках 2.14 и 2.15 стрелками с номерами 1 и 2 отмечены соответственно ближняя к поверхности приборного слоя КНС и дальняя от этой поверхности границы возникающего аморфного слоя. Расстояния от поверхности приборного слоя до этих границ приведено в таблицах 2.6 для аморфизации ионами кремния, и таблице 2.7 – ионами кислорода.

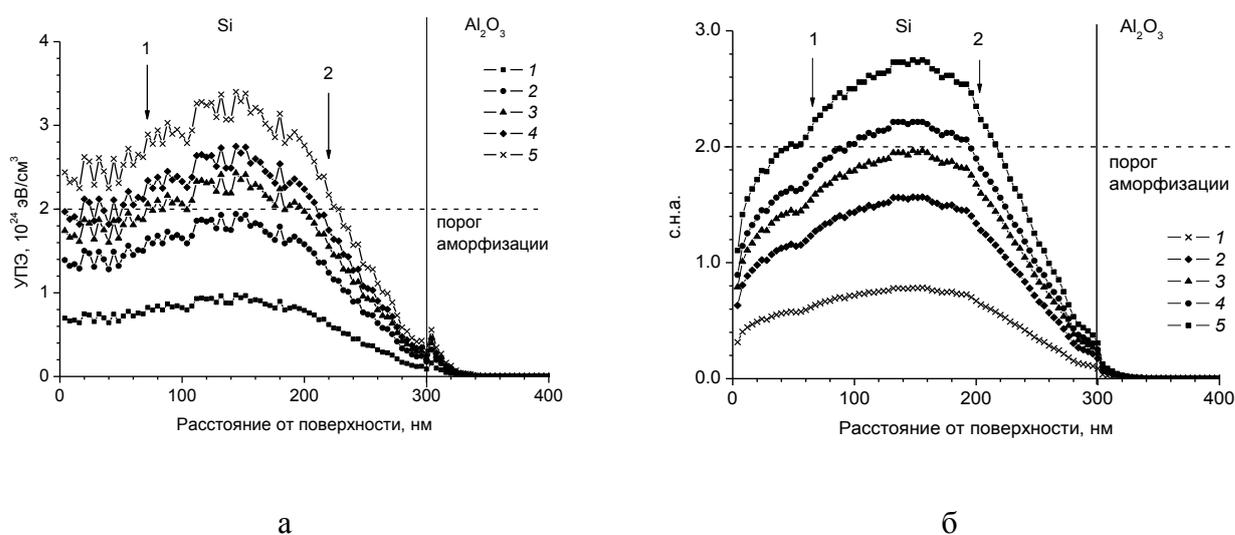
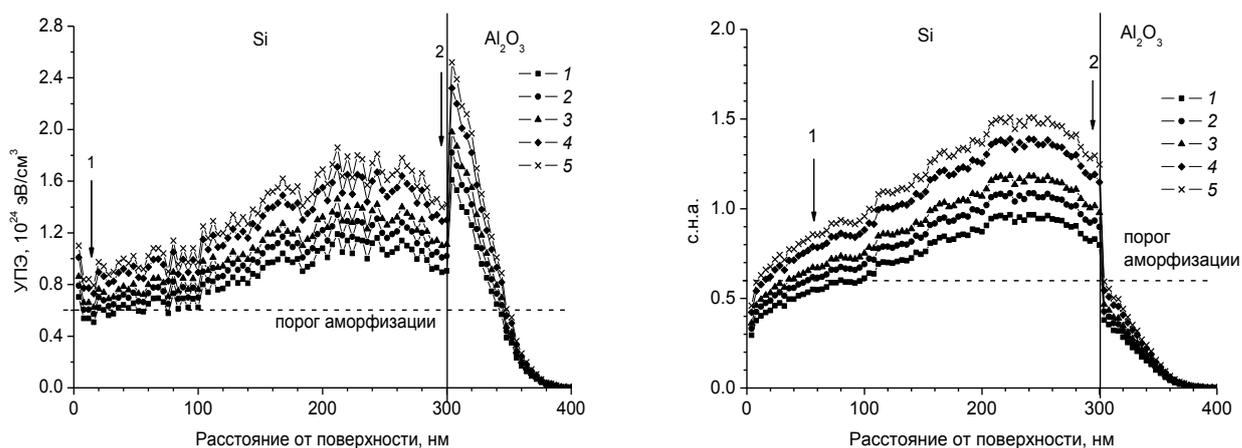


Рисунок 2.14 – Рассчитанные по программе TRIS профили распределения УПЭ (а) и СНА (б) в КНС при имплантации ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозами,  $\cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>: 1 – 3,0; 2 – 6,0; 3 – 7,5; 4 – 8,5; 5 – 10,5. Температура облучения 0°C.

Таблица 2.6 – Результаты расчета параметров аморфного слоя в КНС при имплантации ионов кремния с энергией 150 кэВ

Доза имплантации, $\cdot 10^{14}$ см $^{-2}$	Положение границ аморфного слоя относительно облучаемой поверхности (ближняя – 1, дальняя – 2), нм				Концентрация		
					в слое кремния, $\cdot 10^{18}$ см $^{-3}$		в сапфире, $\cdot 10^{21}$ см $^{-3}$
	по УПЭ $_{кр}$		по СНА $_{кр}$		атомов Al	атомов O	вакансий Al
	1	2	1	2			
3,0	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	0,5	0,5	0,5
6,0	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	0,9	1,0	1,0
7,5	80	200	нет <sup>*)</sup>	нет <sup>*)</sup>	1,1	1,3	1,4
8,5	50	220	100	200	1,3	1,5	1,5
10,5	< 10	240	50	210	1,6	1,8	1,9

Примечания: <sup>\*)</sup> критерии аморфизации кремния  $УПЭ > УПЭ_{кр}$  или  $СНА > СНА_{кр}$  не выполняются



а

б

Рисунок 2.15 – Рассчитанные по программе TRIS профили УПЭ (а) и СНА (б) в КНС при имплантации ионов кислорода с энергией 120 кэВ и дозами,  $\cdot 10^{14}$  см $^{-2}$ :

1 – 8,0; 2 – 9,0; 3 – 9,8; 4 – 11,5; 5 – 12,5. Температура облучения минус 143°С.

Таблица 2.7 – Результаты расчета параметров аморфного слоя в КНС при имплантации ионов кислорода с энергией 120 кэВ

Доза имплантации, $\cdot 10^{14}$ см $^{-2}$	Положение границ аморфного слоя относительно облучаемой поверхности (ближняя – 1, дальняя – 2), нм				Концентрация		
					в слое кремния, $\cdot 10^{18}$ см $^{-3}$		в сапфире, $\cdot 10^{21}$ см $^{-3}$
	по УПЭ $_{кр}$		по СНА $_{кр}$		атомов Al	атомов O	вакансий Al
	1	2	1	2			
8,0	40	$\approx 300$	80	$\approx 300$	5,4	18,5	6,2
9,0	20	$\approx 300$	60	$\approx 300$	6,1	20,8	7,0

Продолжение таблицы 2.7

9,8	< 10	≈ 300	40	≈ 300	6,7	22,6	7,6
11,5	< 10	≈ 300	10	≈ 300	7,8	26,5	9,0
12,5	< 10	≈ 300	10	≈ 300	8,5	28,8	9,6

Из приведенных на рисунках 2.14 и 2.15 и в таблицах 2.6, 2.7 данных следует [149]:

1. В результате имплантации в КНС ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозой более  $7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  аморфный (по критерию  $\text{УПЭ} > \text{УПЭ}_{\text{кр}}$ ) слой протяженностью около 120 нм образуется на глубине 80 нм от облучаемой поверхности. При больших дозах имплантации аморфный слой, возникший в середине приборного слоя, расширяется, однако область с наибольшей концентрацией ростовых дефектов вблизи границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  остается не аморфизированной, а поскольку рекристаллизация происходит и от нее, то рекристаллизованный слой КНС может наследовать дефекты этой затравки. Таким образом, при оптимальных, по мнению авторов работ [84, 85], дозе и энергии имплантируемых ионов кремния ( $7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , 150 кэВ), обеспечивающих повышение структурного совершенства приборного слоя КНС, в нем сохраняются две кристаллические затравки для рекристаллизации: у границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  (как и ожидается авторами [84, 85]), и у поверхности приборного слоя. Возможно, что рекристаллизация от затравки у свободной поверхности КНС и обеспечивает повышение его кристаллического совершенства [148], как это было установлено в [84, 85]. Как видно из таблицы 2.6 в рассмотренных режимах аморфизации концентрация РТД в сапфире вблизи границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  может превышать  $10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Концентрация атомов кислорода, попавшего в приборный слой в результате каскадного перемешивания, не превышает фонового загрязнения (около  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ ).

2. Имплантация ионов кислорода с энергией 120 кэВ обеспечивает аморфизацию слоя кремния до границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  уже при дозе имплантации  $8,0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  (как видно из рисунка 2.15а граница 2 аморфного слоя совпадает с гетерограницей). Вблизи поверхности приборного слоя при дозах имплантации  $\leq 9,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  сохраняется кристаллическая затравка толщиной 40–80 нм. Как следует из таблицы 2.7, в таких режимах аморфизации суммарная концентрация атомов кислорода в приборном слое достигает  $1,8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , а концентрация радиационных дефектов в сапфире превышает  $6,0 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Как указывалось в главе 1, насыщение приборного слоя кремния кислородом приведет к ухудшению его электрофизических свойств, а образование преципитатов  $\text{SiO}_x$ , – структурного совершенства рекристаллизованного слоя, поэтому целесообразность такой обработке вызывает сомнения.

3. Концентрация первичных радиационных дефектов в сапфире для обоих аморфизирующих ионов лишь на порядок меньше концентрации его атомов, что

свидетельствует о существенном радиационном повреждении при имплантации ионов в указанных режимах.

4. Оценка параметров аморфного слоя по критериям  $УПЭ > УПЭ_{кр}$  и  $СНА > СНА_{кр}$  согласуются между собой при соответствующем выборе значения  $E_d$ .

Построены профили аморфизации КНС имплантацией ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозой  $7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  по результатам расчета УПЭ и СНА с учетом переходного слоя Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в соответствии с моделями, предложенными в разделе 2.1.3. На рисунке 2.16 приведены полученные результаты для моделей КНС ПС-cSi, ПС-aSi, ПС-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>. Усреднение результатов расчета проводилось по  $10^4$  статистических испытаний.

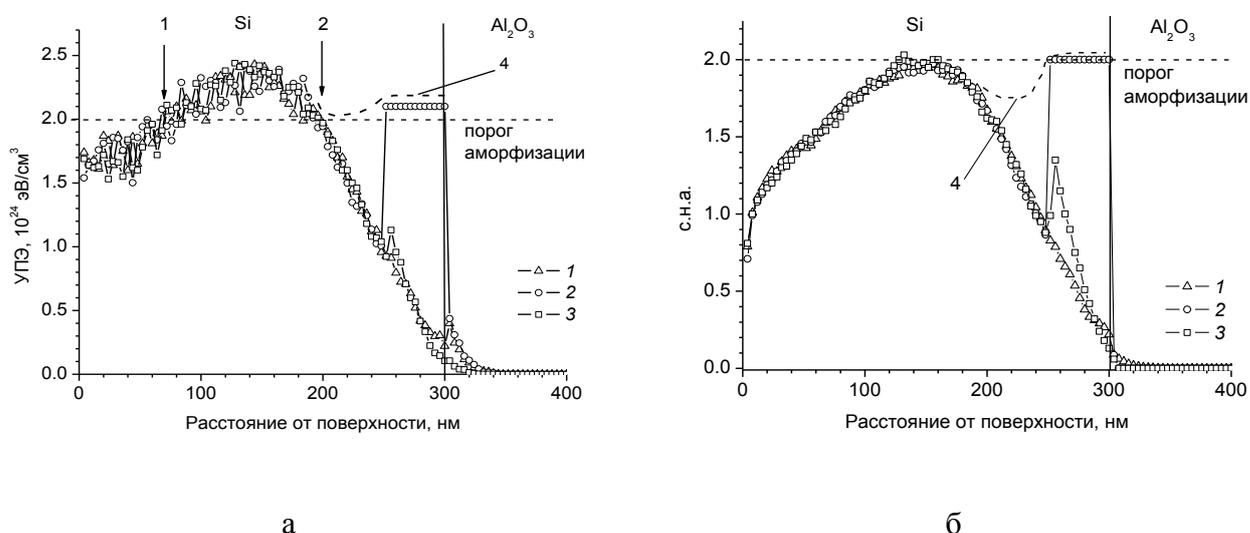


Рисунок 2.16 – Рассчитанные по программе TRIS профили распределения УПЭ (а) и СНА (б) в КНС при имплантации ионов кремния с энергией 150 кэВ и дозой  $7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  для моделей строения КНС: 1 – ПС-cSi, 2 – ПС-aSi, 3 – ПС-Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, 4 – вероятный ход профиля аморфизации. Температура облучения 0°С.

Из рисунка 2.16 видно, что профили как УПЭ, так и СНА, в КНС с переходными слоями различного фазового и химического состава практически не отличаются в кремниевой части приборного слоя. В области переходного слоя из аморфного кремния (модель ПС-aSi) значения УПЭ и СНА положены равными  $1,05 \cdot УПЭ_{кр}$  и  $1,05 \cdot СНА_{кр}$ , поскольку эта область КНС аморфна до имплантации ионов кремния. Очевидно, что полученный имплантацией аморфный слой (как и переходный слой) не имеет резкой границы с прилежащими слоями, поэтому профили УПЭ и СНА будут иметь форму, условно показанную на рисунках 2.16а и 2.16б кривыми 4. Если переходный слой в КНС имеет аморфное строение (модель ПС-aSi), то затравки для рекристаллизации от границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> не будет, поэтому рекристаллизация будет происходить только от приповерхностного кристаллического слоя кремния (рисунок 2.14, таблица 2.6).

Поскольку порог аморфизации переходного слоя из алюмосиликатных соединений (модель ПС- $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) неизвестен, а также неизвестны экспериментальные значения  $E_d$  для алюмосиликатов, сделать вывод о его фазовом состоянии после имплантации кремния, затруднительно. По-видимому, порог аморфизации этого материала будет не ниже, чем у кремния, и, как следует из рисунков 2.16, его аморфизации не произойдет даже при максимальной дозе имплантации  $10,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  из рассмотренных в [84, 85] (рисунок 2.14 – у гетерограницы Si/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  УПЭ и СНА много меньше УПЭ<sub>кр</sub> и СНА<sub>кр</sub>). Таким образом, рекристаллизацию приборного слоя КНС можно будет осуществить лишь от приповерхностной затравки, если она сохранится после имплантации. Структурные дефекты переходного слоя будут наследоваться в рекристаллизованном приборном слое, поэтому для КНС с переходным слоем с отличным от кристаллического кремния фазовым и/или химическим составом, твердофазная рекристаллизация от границы раздела кремний/сапфир после имплантации ионов кремния, не обеспечит требуемого повышения структурного совершенства приборного слоя.

### 2.3 Выводы к главе 2

1. Впервые предложены модели гетероструктуры «кремний на сапфире», учитывающие влияние переходного слоя вблизи границы кремний/сапфир при расчетах методом Монте-Карло профилей пространственного распределения ионов, внедряемых при ионно-лучевых обработках, и возникающих при этом первичных радиационных дефектов. Модели учитывают, что переходный слой может состоять из материала с отличающимся от объемного кремния плотностью, фазовым и химическим составом.

2. Показано, что при внедрении ионов с энергией достаточной для того, что бы их пробеги достигали границы переходный слой/кремний (бор – 80 кэВ, фосфор – 180 кэВ, кислород – 100 кэВ, кремний – 160 кэВ), его влияние проявляется в перераспределении внедряемых ионов между слоем кремния и сапфиром. В случаях, когда плотность переходного слоя больше плотности кремния (состоит из муллита) процессы, сопровождающие внедрение ускоренных ионов, более эффективно происходят в переходном слое, являющимся частью приборного слоя гетероструктур КНС. В случаях, когда плотность переходного слоя меньше плотности кремния (состоит из аморфного кремния), то процессы, сопровождающие внедрение ускоренных ионов, более эффективно происходят в сапфире, чем в приборном слое гетероструктур КНС. Таким образом, возникающий при газофазной эпитаксии промышленных гетероструктур КНС переходный слой может расширяться в процессе ионно-лучевых обработок области вблизи границы раздела кремний/сапфир, направленных на модификацию структурных и электрофизических свойств приборного слоя.

3. Впервые предложена математическая модель для учета влияния ростовых дефектов кристаллической структуры приборного слоя гетероструктур «кремний на сапфире» при расчете методом Монте-Карло профилей пространственного распределения ионов, внедряемых при ионно-лучевых обработках, и возникающих при этом радиационных дефектов. Показано, что согласно предложенной модели наличие слабосвязанных атомов вблизи ростовых дефектов кристаллической структуры (с поверхностной плотностью  $10^6$ – $10^{12}$  см<sup>-2</sup>) приводит к возрастанию по сравнению с совершенным кремнием концентрации радиационных точечных дефектов на одном и том же расстоянии от облучаемой поверхности. Для легких ионов (бор) увеличение может достигать 20%, и до 100% для ионов средних масс (фосфор).

4. Методом математического моделирования исследованы профили аморфизации слоя кремния в режимах, предложенных в работах [82–84] по созданию отечественной технологии получения гетероструктур КНС с ультратонким приборным слоем. Установлено, что имплантация ионов кислорода в КНС толщиной 0,3 мкм с энергией 120 кэВ и дозой  $\leq 9,8 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> обеспечивает аморфизацию приборного слоя до границы раздела кремний/сапфир с сохранением у поверхности слоя кремния толщиной 40–80 нм. В ходе последующих высокотемпературных обработок это может обеспечить связывание фоновых примесей алюминия и кислорода, попавших в приборный слой из сапфира в результате автолегирования, в виде алюмосиликатных соединений и рекристаллизацию кремния от поверхностной затравки. Однако, в результате такой технологической обработки концентрация кислорода в приборном слое КНС может достигать  $10^{19}$  см<sup>-3</sup>, что будет отрицательно сказываться на его электрофизических свойствах (образование «термодоноров»), протекании твердофазной рекристаллизации и кристаллическом совершенстве полученного приборного слоя (образования структурных дефектов вокруг преципитатов SiO<sub>x</sub>).

При аморфизации ионами кремния с энергией 150 кэВ аморфный слой возникает в середине приборного слоя КНС толщиной 0,3 мкм, а наиболее дефектная область приборного слоя у границы раздела с сапфиром не аморфизируется. Образовавшийся при газофазной эпитаксии промышленных гетероструктур КНС переходный слой у границы раздела кремний/сапфир, состоящий из аморфного кремния или алюмосиликатов будет препятствовать получению структурно совершенного приборного слоя рекристаллизацией от гетерограницы (как предлагается в [84]), так как не может служить качественной затравкой. Дефекты кристаллической структуры этой области будут наследоваться в процессе рекристаллизации аморфизированной части приборного слоя. Обнаруженное в [84] повышение совершенства кристаллической структуры КНС можно объяснить рекристаллизацией от приповерхностного слоя кремния протяженностью 50–80 нм, который, как показали результаты моделирования, сохраняется при дозах имплантации кремния  $(7,5$ – $8,5) \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>.

### ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ «КРЕМНИЙ НА САПФИРЕ» ПРИ ПОСТИМПЛАНТАЦИОННОМ ОТЖИГЕ

#### 3.1 Введение

При разработке технологии изготовления современных КМОП/КНС БИС не смотря на достигнутые успехи [5, 8], по-прежнему актуальными остаются задачи повышения процента выхода годных ИС и обеспечения требуемых рабочих характеристик и их радиационной стойкости [30, 32, 33]. Открытым остается вопрос о влиянии качества исходных гетероструктур на свойства приборного слоя после технологических обработок, а также эволюции при этом его примесно-дефектного состава, что, в конечном счете, и определяет рабочие характеристики ИС. Особенности протекания технологических процессов в эпитаксиальных структурах КНС, по сравнению с объемным кремнием, обусловлены их гетерогенностью. В главе 1 показано, что эпитаксиальный слой кремния характеризуется высокой концентрацией ростовых дефектов кристаллической структуры, упруго-напряженным состоянием, значительным содержанием фоновых примесей, диффундирующих из сапфира. Наибольшая концентрация ростовых дефектов и примесей, а также амплитуда упругих напряжений наблюдаются у границы раздела с сапфиром. Обнаружена также неоднородность их распределения по поверхности пластин КНС [30, 32–34, 39].

Базовые операции изготовления БИС по технологии КМОП/КНС («разгонка» примеси после ионно-лучевого легирования, окисление и другие) проводятся при повышенных температурах и сопровождаются диффузионным перераспределением легирующих и фоновых примесей. В результате многочисленных исследований на объемных материалах установлено, что на этот процесс влияют и дислокации, и границы зерен [150–154], упругие напряжения [150, 155–157], и присутствие других примесей [150, 156]. Таким образом, одна из практически важных задач состоит в исследовании влияния протяженных ростовых дефектов кристаллической структуры и полей упругих напряжений на результаты высокотемпературных технологических обработок при формировании топологии элементов микросхем на гетероструктурах КНС.

В работах [158–160] предложена математическая модель для описания перечисленных особенностей гетероструктур КНС при описании диффузионных процессов в них. Рассчитанные профили пространственного распределения введенных ионной имплантацией легирующих примесей бора и фосфора используются для оптимизации режимов технологических операций при изготовлении КМОП БИС на основе гетероструктур КНС с

толщиной приборного слоя 0,3 мкм в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седакова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седакова»).

### 3.2 Модели диффузии легирующих примесей в гетероструктурах «кремний на сапфире»

Как показано в главе 1 в объеме эпитаксиального слоя промышленных гетероструктур КНС плотность ростовых дефектов кристаллической структуры может быть велика: дислокаций – до  $10^{11}$ – $10^{12}$  см<sup>-2</sup>, дефектов упаковки и микродвойников – до  $10^{10}$  см<sup>-2</sup>. Область с максимальной плотностью ростовых дефектов кристаллической структуры находится на расстоянии  $\leq 0,2$  мкм от границы раздела кремний/сапфир. При современных топологических нормах проектирования КМОП/КНС БИС площадь активных элементов составляет несколько десятков мкм<sup>2</sup> и более. Исходя из данных экспериментальных исследований дефектной структуры КНС [3–5, 15, 17], можно оценить, что объем, занимаемый одним транзистором, пересекает до  $10^2$ – $10^4$  дислокаций при их плотности  $10^{10}$ – $10^{12}$  см<sup>-2</sup>. При плотности микродвойников и дефектов упаковки  $10^8$  см<sup>-2</sup> эти структурные дефекты также могут оказаться в объеме элементов микросхем.

Диффузия, используемых в КМОП/КНС технологии легирующих примесей (бора и фосфора) в кремнии по протяженным дефектам кристаллической структуры, исследовалась ранее [150, 152]. Чаще всего дислокации и двумерные дефекты в кремнии – это пути ускоренной диффузии. При этом экспериментально и теоретически было показано, что для кристаллов с большой плотностью неупорядоченно расположенных дислокаций, какими являются эпитаксиальные слои КНС, диффузия может быть описана с помощью введения эффективного коэффициента диффузии [150, 154]:

$$D_{\text{eff}}(x) = D_v + \pi r_0^2 N_d(x) D_d, \quad (3.1)$$

где

$D_v$  – коэффициент диффузии данной примеси в бездислокационном объемном материале;

$r_0$  – эффективный радиус диффузионной зоны вокруг дислокации, определяемый экспериментально (1–30 нм [150]);

$D_d$  – коэффициент диффузии примеси по дислокациям.

Температурные зависимости  $D_v$  и  $D_d$  имеют вид [150]:

$$D_v(T) = D_0^v \exp(-E_a^v/k_B T), \quad D_d(T) = D_0^d \exp(-E_a^d/k_B T)$$

где

$E_a^v$  и  $E_a^d$  – энергии активации термической диффузии в объеме и по дислокациям;

$D_0^v$  и  $D_0^d$  – предэкспоненциальные множители коэффициентов диффузии в объеме и по дислокациям.

Экспериментальные значения параметров коэффициентов диффузии [150, 152]: для бора  $D_0^v = 5,1 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $E_a^v = 3,48 \text{ эВ}$ ,  $D_0^d = 190 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $E_a^d = 3,24 \text{ эВ}$ , для фосфора  $D_0^v = 10,5 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $E_a^v = 3,68 \text{ эВ}$ ,  $D_0^d = 1,1 \cdot 10^4 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $E_a^d = 3,38 \text{ эВ}$ .

В предложенной нами модели [159, 160] неоднородность физических свойств КНС описывалась функцией вида [161]:

$$A(x) = A_0 \exp(x/x_0), \quad (3.2),$$

где

$A$  – характеристика КНС в зависимости от расстояния  $x$ ;

$A_0, x_0$  – амплитуда и характерная длина неоднородности свойства  $A$ .

Для вычисления  $D_{\text{eff}}(x)$  по формуле (3.1) зависимость  $N_d(x)$  была аппроксимирована зависимостью (3.2) по типичным значениям плотности ростовых дефектов кристаллической структуры КНС. Так у свободной поверхности кремния  $N_d(x = 0 \text{ нм})$  принято равным  $10^{10} \text{ см}^{-2}$ , а на границе раздела с сапфиром  $N_d(x = 300 \text{ нм}) = 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Тогда параметры выражения в формуле (3.2):  $A_0 = N_{d0} = 10^2 \text{ см}^{-2}$ ,  $x_0 = 65,1 \text{ нм}$ .

Упругие напряжения, действующие в гетероструктурах, могут изменять коэффициент диффузии примесей и за счет изменения энергии ее активации [153, 162]. Приращение этого параметра пропорционально амплитуде упругих напряжений, и тогда для коэффициента диффузии в объеме справедливо соотношение:

$$D_v = D_0^v \exp\left(-\frac{E_a^v \pm \Omega \sigma(x)}{k_B T}\right) \quad (3.3),$$

где

$\sigma$  – амплитуда упругих напряжений;

$\Omega$  – коэффициент пропорциональности, численно равный активационному объему,  $\Omega \approx (N_{\text{at}})^{-1}$ ;

$N_{\text{at}}$  – концентрация атомов (для кремния  $N_{\text{at}} = 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ).

Учитывая, что в КНС толщина кремния много меньше толщины сапфировой подложки, максимальную амплитуду действующих в нем сжимающих напряжений (у границы раздела кремний/сапфир)  $\sigma_{\text{max}}$  можно оценить по формуле [157]:

$$\sigma_{\max} = E\varepsilon_{\max}/(1 - \nu),$$

где

$E$  – модуль Юнга;

$\nu$  – коэффициент Пуассона;

$\varepsilon_{\max}$  – максимальная деформация КНС.

Для кремния  $E = 171,8$  ГПа,  $\nu = 0,21$  [13],  $\varepsilon_{\max} \approx 10^{-2}$  [19], тогда  $\sigma_{\max} \approx 4,4$  ГПа. Зависимость  $\sigma(x)$  также аппроксимировалась функцией вида (3.2). Для определения ее параметров были использованы следующие данные:  $\sigma(x = 0 \text{ нм}) = 0,6$  ГПа (на свободной поверхности кремния [4, 5]) и на границе раздела с сапфиром  $\sigma(x = 300 \text{ нм}) = 4,4$  ГПа. Тогда  $A_0 = \sigma_0 = 0,6$  ГПа,  $x_0 = 176$  нм. Поскольку рассматривается диффузия бора и фосфора в кремнии, ковалентные радиусы атомов которых меньше радиуса атомов матрицы [150], в формуле (3.3) следует выбрать знак минус. Это означает, что диффузия указанных примесей ускоряется. Зависимость  $\sigma(x)$  в КНС может быть обусловлена также неоднородностью распределения ростовых дефектов кристаллической структуры, представляющих собой источники упруго-пластической деформации. В то же время при нагревании гетероструктур КНС до температуры, при которой осуществляется разгонка легирующих примесей (850–950°C), амплитуда упругих напряжений эпитаксиального слоя кремния может измениться. Оценить величину термических напряжений при термообработках можно по формуле [157]:

$$\sigma_{\Delta\alpha} = E \cdot \Delta\alpha \cdot \Delta T / (1 - \nu),$$

где

$\Delta\alpha$  – разность значений температурных коэффициентов расширения подложки и эпитаксиального слоя в исследуемом интервале температур  $\Delta T$ :  $\Delta\alpha = (3,59-8,4) \cdot 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$ ,  $\Delta T = 800^\circ\text{C}$  [3].

Значение  $\sigma_{\Delta\alpha} = 0,84$  ГПа, то есть амплитуда упругих напряжений в нагретой до температуры диффузии примесей гетероструктуре КНС будет иметь примерно то же значение, что и при комнатной температуре.

Таким образом, диффузия легирующей примеси по предлагаемой модели происходит двумя потоками: по ростовым дефектам кристаллической структуры и по бездефектному материалу, при этом происходит постоянное перераспределение диффузанта между потоками. Коэффициент диффузии примеси зависит от координаты двояко: во-первых, из-за влияния неоднородного распределения ростовых дефектов кристаллической структуры на первую компоненту потока, и, во-вторых, из-за влияния неоднородных упругих напряжений на компоненту потока по бездефектному материалу.

Зависимость коэффициента диффузии фосфора в КНС от плотности ростовых дефектов кристаллической структуры при расчетах профилей его пространственного распределения, формирующихся в процессе постимплантационного отжига совмещенного с окислением поверхности кремния, учитывалась в работе [66]. В этой работе зависимость  $N_d(z)$ ,  $z = d - x$ , получена аппроксимацией экспериментальных данных:

$$N_d(z) = \begin{cases} 4,9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}, & z \leq 0,01 \text{ мкм}, \\ 1,2 \cdot 10^9 \cdot z^{-1,3} \text{ см}^{-2}, & 0,01 \text{ мкм} < z < 0,2 \text{ мкм}, \\ 4,3 \cdot 10^7 \cdot z^{-3,38} \text{ см}^{-2}, & z > 0,2 \text{ мкм}. \end{cases} \quad (3.4).$$

Расчеты также проведены для зависимости  $N_d(z)$ , выраженной формулой (1.1) [15]. Зависимость (1.1) характерна для более дефектного материала, чем (3.4) – плотность ростовых дефектов кристаллической структуры в нем на порядок больше. Зависимости  $N_d(x)$  представлены на рисунке 3.1, из которого видно, что предложенная нами аппроксимация  $N_d(x)$  по формуле (3.2) лежит между зависимостями, описываемыми выражениями (1.1) и (3.4).

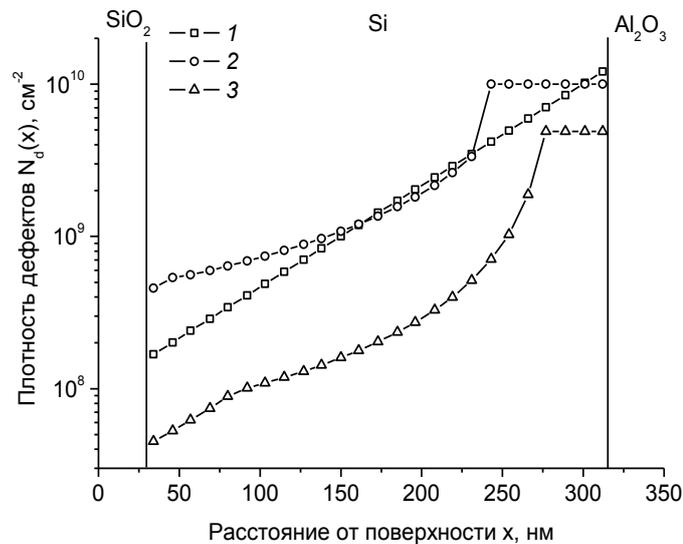


Рисунок 3.1 – Зависимости плотности ростовых дефектов кристаллической структуры КНС  $N_d(x)$  от расстояния от поверхности слоя кремния: 1 – аппроксимация зависимостью (3.2) [160], 2 – по (1.1) [15], 3 – по (3.4) [66]

Для удобства дальнейшего изложения в таблице 3.1 введены обозначения рассматриваемых математических моделей описания диффузии в КНС.

Таблица 3.1 – Обозначения математических моделей описания диффузии в КНС

Обозначение	Описание
$D_{\text{eff}}(x) = D_{V-Si}$	Коэффициенты диффузии примесей в КНС приняты равными коэффициентам диффузии в объемном кремнии. $D_{\text{eff}}(x) = D_0^V \exp(-E_a^V/kT)$ .
$D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(1.1)}(x))$	Коэффициенты диффузии примесей в КНС выражаются формулой (3.1) с зависимостью концентрации ростовых дефектов кристаллической структуры от координаты, выражаемой формулой (1.1) [15] – большая плотность дефектов в КНС
$D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3.4)}(x))$	Коэффициенты диффузии примесей в КНС выражаются формулой (3.1) с зависимостью концентрации ростовых дефектов кристаллической структуры от координаты, выражаемой формулой (3.4) [66] – плотность дефектов в КНС меньше, чем в модели $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(1.1)}(x))$
$D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3.2)}(x), \sigma(x))$	Коэффициенты диффузии примесей в КНС выражаются формулой (3.1) с зависимостью концентрации ростовых дефектов кристаллической структуры от координаты, выражаемой формулой (3.2) и зависимостью объемного коэффициента диффузии от амплитуды упругих напряжений по формуле (3.3) (предложенная нами модель [160])

На рисунке 3.2 приведены зависимости  $D_{\text{eff}}(x)$  атомов бора в КНС при температуре 850°C, рассчитанные по различным моделям (таблица 3.1).

В процессе высокотемпературного постимплантационного отжига, совмещенного с окислением поверхности кремния, на перераспределение примеси будут влиять РСД и диффузия, ускоренная окислением [51, 150]. РСД проявляется в увеличении коэффициента диффузии примеси из-за наличия неравновесной концентрации РТД, возникших при имплантации. Интенсивность этого процесса определяется концентрацией стоков для точечных дефектов [51, 52], поэтому, учитывая высокую плотность ростовых дефектов кристаллической структуры КНС и наличие двух границ раздела, РСД при анализе профилей распределения примесей можно пренебречь. Действительно, оцененная по результатам экспериментальных исследований РСД в объемном бездефектном кремнии длина диффузии вакансий составляет 0,1–1 мкм [51, 52]. В КНС характерный размер области взаимодействия подвижных дефектов и атомов примесей определяются толщиной приборного слоя, и составляет 0,1–0,6 мкм, то есть вакансии (основной дефект, ответственный согласно современным представлениям за РСД [51, 52]) будут захватываться раньше, чем проявится их влияние на перераспределение примеси. К тому же в технологическом процессе изготовления КМОП/КНС БИС нагрев гетероструктур до

температуры, при которой становится существенной диффузия легирующих примесей, проводится в течение одного и более часов для предотвращения откалывания приборного слоя от сапфира. Гетероструктуры находятся при повышенной температуре (100–800°C) длительное время, в течение которого происходит отжиг РТД и их комплексов, а диффузия легирующих примесей при таких температурах еще незначительна.

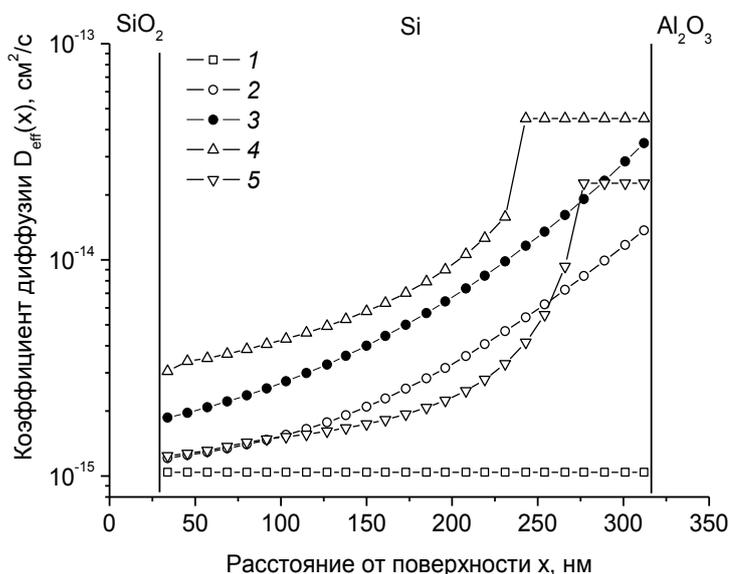


Рисунок 3.2 – Коэффициенты диффузии бора в КНС при 850°C, рассчитанные по различным моделям (таблица 3.1): 1 –  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-\text{Si}}$ , 2 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x) = 0)$ , 3 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$ , 4 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(1,1)}(x))$ , 5 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,4)}(x))$

При термическом окислении кремния межфазная граница  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  является источником неравновесных собственных междоузельных атомов кремния, которые, диффундируя вглубь кристалла, ускоряют диффузию примесей замещения (бора и фосфора) [163]. Толщина окисленного слоя кремния (толщина подзатворного диэлектрика) составляет 30 нм, что существенно меньше размеров области локализации распределения примеси в приборном слое КНС (300 нм). Поэтому влиянием диффузии ускоренной окислением и сегрегационными эффектами на границе раздела  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  можно пренебречь и не учитывать перемещение границы в процессе роста  $\text{SiO}_2$ , считая ее отражающей для диффундирующей примеси [163].

Профили распределения концентрации легирующих примесей  $C(x, t)$  в зависимости от расстояния от свободной поверхности КНС ( $x$ ) могут быть получены решением уравнения диффузии с соответствующими граничными и начальными условиями [150]:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{eff}}(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right), \quad \frac{\partial C(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C(d, t)}{\partial x} = 0, \quad C(x, 0) = C_{\text{ин}}(x) \quad (3.5),$$

где

$C_{\text{ии}}(x)$  – распределение легирующей примеси, сформированное ионной имплантацией, координата  $x = 0$  соответствует границе  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ ,  $x = d$  – положению границы  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ .

Уравнение диффузии (3.5) с коэффициентом диффузии (3.1) решалось численно методом конечных разностей [164] по специально разработанной компьютерной программе. Концентрация  $C_{\text{ии}}(x)$  рассчитывались по программе TRIS.

### 3.3 Результаты расчета профилей пространственного распределения бора в «*p*-кармане» *n*-канальных МОП/КНС транзисторов

Приборный слой промышленно изготавливаемых гетероструктур КНС легируется фосфором и имеет *n*-тип проводимости. Поэтому технологический процесс изготовления КМОП/КНС БИС включает операции формирования областей с *p*-типом проводимости («*p*-карманов»), которые служат базовыми областями *n*-канальных транзисторов. Для этого методом ионной имплантации проводится легирование приборного слоя бором с начальной энергией ионов 80–120 кэВ и дозой  $(2,5\text{--}5,0) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ , энергией 30 кэВ и дозой  $(1,0\text{--}2,5) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Подгонка порогового напряжения МОП транзисторов до требуемого значения производится имплантацией ионов  $\text{BF}^+$  с энергией 40 кэВ и дозой  $(1,0\text{--}3,0) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Постимплантационный отжиг совмещается рядом технологических операций, требующих повышенной температуры (формированием подзатворного диэлектрика методом пирогенного окисления, диффузией фосфора в поликристаллические кремниевые затворы и другими). Суммарное время, в течение которого микросхемы находятся при температуре 850°C при проведении этих операций, составляет около 300 минут. Энергии имплантации бора, дозы легирования, продолжительность и температура отжига варьируются при отработке технологического маршрута с целью достижения оптимальных электрических характеристик транзисторов, как в нормальных условиях функционирования, так и при радиационных воздействиях.

Одна из проблем технологии изготовления КМОП БИС на основе гетероструктур КНС с приборным слоем толщиной 0,3 мкм состоит в необходимости обеспечить сохранение значения тока потребления микросхем в допустимых пределах после воздействия ионизирующих излучений [24, 30, 33, 37, 39, 85]. В работе [116] расчетами по программе TRIS нами было показано, что значительная часть имплантируемого для глубокого легирования приборного слоя бора при энергиях имплантации 100 кэВ и более внедряется в сапфировую подложку, а на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и в сапфире образуется значительная концентрация радиационных дефектов. С целью анализа влияния режимов имплантации и отжига на распределение бора в «*p*-кармане» было проведено моделирование полного цикла формирования профилей его

легирования со значениями параметров имплантации и отжига, приведенными выше. Профили бора, формирующиеся в процессе высокотемпературного отжига, рассчитывались по описанным в разделе 3.2 моделям по специально разработанной компьютерной программе для моделирования диффузии в КНС методом конечных разностей. Начальное распределение бора  $C_{\text{ии}}(x)$  получено суммированием рассчитанных по программе TRIS профилей его пространственного распределения, рассчитанных при  $E_{\text{ии}}$  равных 9 кэВ (соответствует имплантации ионов  $\text{BF}^+$  с энергией 40 кэВ), 30 кэВ и профиля глубокого легирования. Начальная энергия ионов при глубоком легировании приборного слоя варьировалась, и составляла 80, 100, 120 кэВ. Результирующие распределения  $C_{\text{ии}}(x)$  представлены на рисунке 3.3.

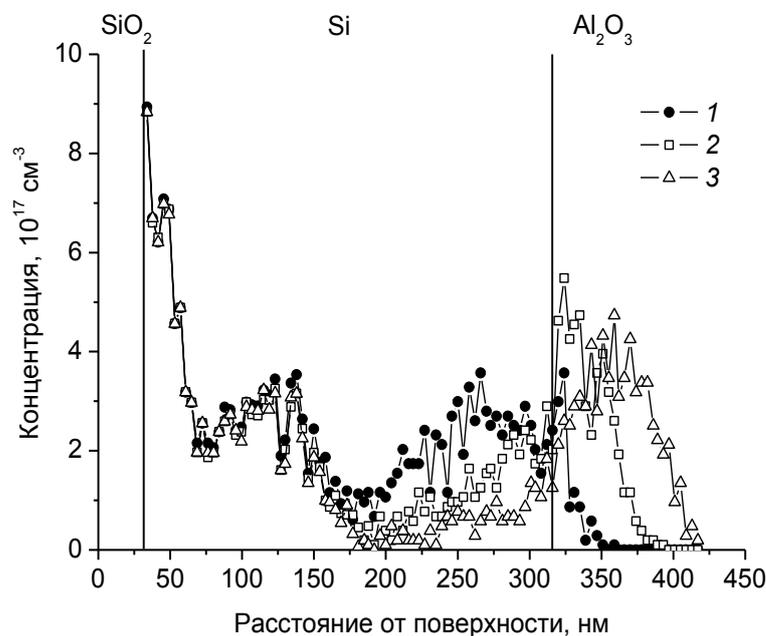


Рисунок 3.3 – Профили пространственного распределения имплантированных ионов бора в «*p*-кармане» рассчитанные по программе TRIS. Глубокое легирование с начальной энергией ионов, кэВ: 80 (1), 100 (2), 120 (3)

На рисунке 3.4 представлены профили пространственного распределения бора в «*p*-кармане» после отжига при  $850^{\circ}\text{C}$  в течение 300 минут, полученные решением задачи (3.5) при постоянном коэффициенте диффузии, соответствующем объемному кремнию ( $D_{\text{eff}}(x) = D_{\text{V-Si}}$ ), и по предложенной нами модели  $D_{\text{eff}}(x) = D \left( N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x) \right)$  [160].

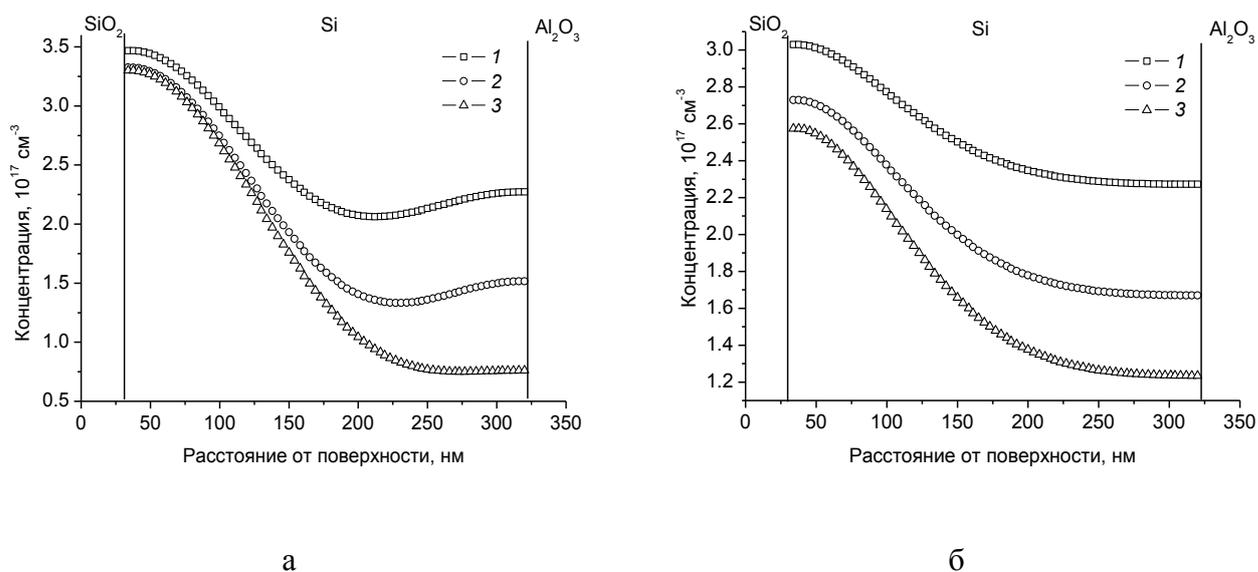


Рисунок 3.4 – Профили пространственного распределения атомов бора в «*p*-кармане», полученные последовательной имплантацией ионов с энергиями 9, 30, 80 (1), 100 (2) и 120 (3) кэВ, после отжига (850°C, 300 минут), рассчитанные по модели  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-\text{Si}}$  (а) и  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$  (б)

Из рисунка 3.4 видно, что концентрация бора на расстоянии до 100 нм от границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> отличается в 2–4 раза при энергиях имплантации глубокого легирования 80–120 кэВ. Причина этого состоит в проявлении установленной ранее (раздел 2.1) закономерности: при начальной энергии имплантируемых ионов более 70–80 кэВ значительная их часть внедряется в сапфировую подложку гетероструктур КНС с толщиной приборного слоя 280–300 нм (рисунок 3.3). Возникающий в результате градиент начального концентрационного профиля в направлении от границы SiO<sub>2</sub>/Si к границе Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> больше при имплантации с большей энергией. Ростовые дефекты кристаллической структуры и упругие напряжения увеличивают значение  $D_{\text{eff}}(x)$  (рисунок 3.2), в результате происходит более эффективное перераспределение легирующей примеси по приборному слою и уменьшение градиентов профиля ее распределения (рисунок 3.4б).

На рисунке 3.5 представлены профили пространственного распределения бора после трехстадийной ионной имплантации при энергиях глубокого легирования 80 и 120 кэВ и отжига при 850°C в течение 300 минут. Расчет выполнен для четырех моделей, описанных в таблице 3.1.

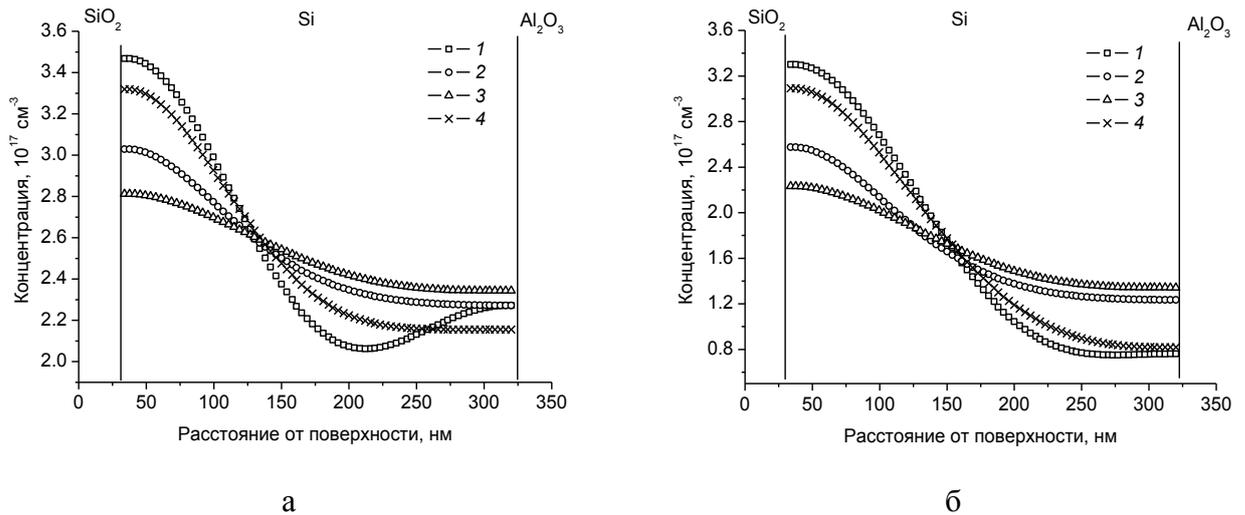


Рисунок 3.5 – Профили пространственного распределения атомов бора в «*p*-кармане», полученные последовательной имплантацией ионов с энергиями 9, 30, 80 (а) и 120 (б) кэВ, после отжига (850°C, 300 минут) для четырех зависимостей  $D_{\text{eff}}(x)$  в КНС: 1 –  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-\text{Si}}$ , 2 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$ , 3 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(1,1)}(x))$ , 4 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,4)}(x))$

Из рисунка 3.5 видно, влияние ростовых дефектов кристаллической структуры и упругих напряжений, учитываемых в  $D_{\text{eff}}(x)$ , проявляется в более эффективном перераспределении бора в приборном слое КНС (кривые 2–4), по сравнению с расчетом по модели, в которой эти факторы не учитываются (кривая 1). При этом большая концентрация ростовых дефектов кристаллической структуры  $N_d(x)$  увеличивает  $D_{\text{eff}}(x)$ , что приводит к более эффективному перераспределению бора в «*p*-кармане» (кривые 3 по сравнению с кривыми 4). Для количественного сравнения результатов расчета по различным моделям диффузии вычислялось максимальное отличие концентрации бора на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя КНС. Так отличие концентрации, рассчитанной по предложенной модели  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$  и по модели  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-\text{Si}}$ , не учитывающей упругие напряжения и ростовые дефекты, для случая имплантации бора при глубоком легировании с энергией 80 кэВ составляет 14%, 120 кэВ – 40% (наибольшее отличие вблизи границы Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Уровень легирования приборного слоя КНС в области вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при имплантации бора в эту область гетероструктуры с энергией 80 кэВ в два раза выше, чем при имплантации с энергией 120 кэВ при всех рассмотренных зависимостях  $D_{\text{eff}}(x)$ . Зависимость максимального отличия концентрации бора от энергии его имплантации при глубоком легировании можно объяснить более эффективным диффузионным перераспределением вследствие большего градиента профиля от границы SiO<sub>2</sub>/Si к Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (рисунок 3.5).

$N^+$ -стоки (истоки) *n*-канальных МОП/КНС транзисторов формируются имплантацией ионов фосфора с энергией 60 кэВ. Отжиг, совмещенный с высокотемпературными операциями,

проводится при 850°C в течение 55–60 минут. На рисунке 3.6 представлены результаты расчета этих профилей. Расчет выполнен для четырех зависимостей  $D_{\text{eff}}(x)$  в КНС (таблица 3.1). Значения параметров коэффициента диффузии фосфора в объемном кремнии и по дислокациям приведены в разделе 3.2.

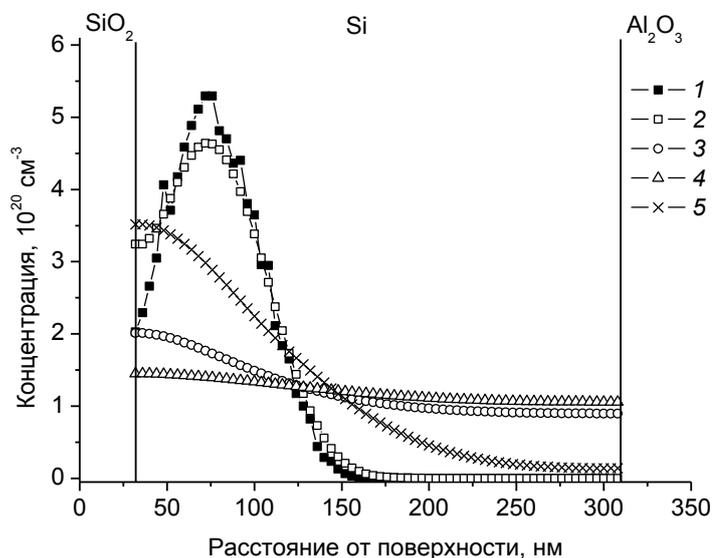


Рисунок 3.6 – Профили пространственного распределения атомов фосфора в области  $n^+$ -стоков (истоков)  $n$ -канальных МОП/КНС транзисторов при имплантации ионов с энергией 60 кэВ, после отжига (850°C, 60 минут) для четырех зависимостей  $D_{\text{eff}}(x)$  в КНС.

1 – профиль имплантированных ионов, 2 –  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-Si}$ , 3 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3.2)}(x), \sigma(x))$ ,  
 4 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(1.1)}(x))$ , 5 –  $D_{\text{eff}}(x) = D(N_d^{(3.4)}(x))$

Из рисунка 3.6 видно, что по результатам расчета ростовые дефекты кристаллической структуры и упругие напряжения способствуют более эффективному диффузионному перераспределению фосфора в приборном слое КНС по сравнению с результатами расчета без учета этих факторов. При переходе от модели к модели (таблица 3.1) рассчитанные значения концентрации фосфора на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя КНС могут отличаться более чем в 1,5 раза. Пути ускоренной диффузии способствуют перераспределению фосфора к границе раздела кремний/сапфир.

### 3.4 Моделирование влияния режимов ионно-лучевого легирования « $p$ -кармана» на образование канала токов утечки $n$ -канальных МОП/КНС транзисторов вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при воздействии ионизирующих излучений

Влияние режимов технологических операций на распределение потенциала электрического поля и концентрации носителей заряда в « $p$ -кармане» исследовалось численным

решением одномерного уравнения Пуассона для трехслойной структуры  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  [165]. Для этого решалась система уравнений:

внутри подзатворного диэлектрика ( $\text{SiO}_2$ ):

$$E_{ox} = -\frac{\partial\phi}{\partial x} = const \quad (3.6.1),$$

на границе раздела  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ :

$$\varepsilon_0\varepsilon_{\text{Si}}E_{\text{Si}} - \varepsilon_0\varepsilon_{\text{ox}}E_{\text{ox}} = Q_{\text{ss1}} \quad (3.6.2),$$

в объеме слоя кремния:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{\text{Si}}}(p - n + C(x)), \quad p = n_1 e^{-\frac{e\phi}{kT}}, \quad n = n_1 e^{\frac{e\phi}{kT}} \quad (3.6.3),$$

на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ :

$$\varepsilon_0\varepsilon_{\text{SA}}E_{\text{SA}} - \varepsilon_0\varepsilon_{\text{Si}}E_{\text{Si}} = Q_{\text{ss2}} \quad (3.6.4),$$

внутри сапфира ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ):

$$E_{\text{SA}} = -\frac{\partial\phi}{\partial x} = const \quad (3.6.5),$$

где

$E_{\text{ox}}$ ,  $E_{\text{Si}}$ ,  $E_{\text{SA}}$  – напряженность электрического поля в диоксиде кремния, кремнии и сапфире;

$\phi$  – потенциал электрического поля;

$\varepsilon_{\text{ox}}$ ,  $\varepsilon_{\text{Si}}$ ,  $\varepsilon_{\text{SA}}$  – относительные диэлектрические проницаемости диоксида кремния ( $\varepsilon_{\text{ox}} = 4$ ), кремния ( $\varepsilon_{\text{Si}} = 12$ ) и сапфира ( $\varepsilon_{\text{SA}} = 9$ ) соответственно;

$Q_{\text{ss1}}$ ,  $Q_{\text{ss2}}$  – поверхностные плотности заряда на границах  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  и  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ;

$p$ ,  $n$  – концентрации дырок и электронов в кремнии (предполагается справедливость статистики Больцмана);

$C(x)$  – концентрация легирующей примеси в кремнии.

Уравнения системы (3.6.1)–(3.6.5) аппроксимировались конечными разностями на трехточечном шаблоне по координате на сетке из  $N$  узлов [164]. Вследствие нелинейной зависимости  $p(\phi)$  и  $n(\phi)$  уравнение Пуассона для его численного решения необходимо линеаризовать. Для этого использовался метод Гуммеля, в соответствии с которым потенциал представляется как

$$\phi^{k+1} = \phi^k + \delta,$$

где

$\phi^{k+1}$  и  $\phi^k$  – значения потенциала на  $k+1$  и  $k$  итерациях;

$\delta$  – малая поправка.

После подстановки в систему уравнений (3.6.1)–(3.6.5)  $\phi^{k+1}$ , она становится линейной относительно  $\delta$ , и может быть решена методом прогонки [164, 166]. Итерационный процесс решения уравнения Пуассона начинается с задания нулевого приближения

$$\phi^0(x) = k_B T / q \cdot \text{sign}(C(x)) \cdot \ln \left( \left[ \sqrt{(C(x)/2)^2 + n_i^2} + C(x)/2 \right] / n_i \right),$$

где

$n_i$  – собственная концентрация носителей заряда в кремнии;

$\text{sign}$  – функция взятия знака числа [166].

Решение задачи (3.6.1)–(3.6.5) позволяет найти  $\delta$  и  $\phi^{k+1}$  ( $k = 0, 1, \dots$ ). Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока  $\delta > \varepsilon_{\max}$ , где  $\varepsilon_{\max}$  – заданное малое число.

Граничное условие на свободной поверхности  $\text{SiO}_2$  было сформулировано в следующем виде:

$$(\phi_2 - \phi_1) / h = (V_{g1} - \phi_2) / d_{\text{ox}},$$

где

$\phi_1, \phi_2$  – значения потенциала в узлах 1 (узел в  $\text{SiO}_2$ ) и 2 (узел на границе  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ );

$h$  – шаг сетки дискретизации по координате;

$d_{\text{ox}}$  – толщина подзатворного диэлектрика  $\text{SiO}_2$ ;

$V_{g1}$  – напряжение на затворе.

Граничное условие на свободной поверхности сапфира:

$$(\phi_N - \phi_{N-1}) / h = 0,$$

где

$\phi_N, \phi_{N-1}$  – значения потенциала в узлах  $N$  (узел в  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) и  $N - 1$  (узел на границе  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ).

Система уравнений (3.6.1)–(3.6.5) решалась численно по специально разработанной компьютерной программе [167]. Входными данными для работы этой программы являются  $C(x)$ ,  $Q_{\text{ss1}}$  и  $Q_{\text{ss2}}$ . Результаты расчета распределения легирующей примеси (бора) в « $p$ -кармане» МОП/КНС транзистора  $C(x)$  приведены в разделе 3.3. Поверхностная плотность заряда  $Q_{\text{ss1}}$  в зависимости от метода окисления поверхности кремния и ее кристаллографической ориентации может принимать значения порядка  $10^{10}$ – $10^{12}$   $\text{см}^{-2}$  [121]. В расчетах принималось значение  $Q_{\text{ss1}} = q \cdot 10^{11} = 1,6 \cdot 10^{-8}$  Кл/ $\text{см}^2$ . Поверхностная плотность заряда на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  составляет от  $(4-6) \cdot 10^{11}$   $\text{см}^{-2}$  [40] до  $(2-3) \cdot 10^{12}$   $\text{см}^{-2}$  [66, 168] в зависимости от условий эпитаксии кремния, типа легирования приборного слоя и режимов термических обработок

гетероструктур КНС. В расчетах значение  $Q_{ss2}$  варьировалось, и принималось равным  $Q_{ss2} = q \cdot 5 \cdot 10^{11} = 0,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>,  $Q_{ss2} = q \cdot 10^{12} = 1,6 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>,  $Q_{ss2} = q \cdot 3 \cdot 10^{12} = 4,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>.

Выше показано (рисунок 3.3), что при глубоком легировании гетероструктур КНС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм бором с начальной энергией больше 80 кэВ происходит внедрение ионов в сапфир и образование радиационных дефектов в сапфире вблизи границы раздела с кремнием. Можно предположить, что возникшие в сапфире в процессе ионной имплантации бора радиационные дефекты полностью не отжигаются при последующих высокотемпературных операциях, и создают уровни энергии в запрещенной зоне (ловушки), которые могут захватывать носители заряда. Захват носителей на ловушки в сапфире происходит в результате релаксации неравновесных электронно-дырочных пар, образовавшихся в процессе ионизации сапфира при воздействии ионизирующих излучений. Заряд, который может быть захвачен в сапфире вблизи границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, пропорционален концентрации радиационных дефектов, возникших в процессе имплантации. Для учета этого эффекта в расчетах, предположено, что один заряженный радиационный дефект в сапфире вблизи границы раздела связан с внедренным в процессе имплантации атомом бора. Тогда приведенный к единице площади поверхности границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> заряд в сапфире можно вычислить по формуле:

$$Q_{SA} = q(x_2 - x_1) \int_{x_1}^{x_2} C_{ии}(x) dx, \quad (3.7)$$

где

$x_1$  – координата границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>;

$x_2$  – координата плоскости параллельной границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в сапфире, для которой  $C_{ии}(x > x_2) = 0$ ;

$C_{ии}(x)$  – рассчитанная концентрация имплантированных атомов бора на расстоянии  $x$  от облучаемой поверхности КНС.

Таким образом, рассчитанные по формуле (3.7) значения  $Q_{SA}$ , образующегося в сапфире при глубоком легировании КНС бором ( $C_{ии}(x)$  представлены на рисунке 3.3) составляют: при начальной энергии ионов 80 кэВ  $Q_{SA} = 0,5 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>, при 100 кэВ –  $Q_{SA} = 2,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>, при 120 кэВ –  $Q_{SA} = 4,3 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>. Из приведенных выше данных видно, что в соответствии с предложенной моделью учета заряда радиационных дефектов в сапфире, поверхностная плотность заряда на границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> может увеличиваться в 5,4 раза по сравнению с исходным значением  $Q_{ss2}$ , существовавшим до глубокого легирования КНС бором.

На рисунке 3.7а представлены результаты расчета решением задачи (3.6.1)–(3.6.5), (3.7) профилей изменения потенциала электрического поля в «*p*-кармане» МОП/КНС структуры при

подаче на затвор порогового напряжения ( $V_{g1} = 1,3$  В). Режим ионно-лучевого легирования варьировался: начальная энергия имплантации ионов бора при глубоком легировании составляла 80, 100, 120 кэВ. Диффузионное перераспределение примеси в ходе постимплантационного отжига  $C(x)$  рассчитывалось по модели  $D_{\text{eff}}(x) = D_{V-Si}$  (таблица 3.1). Исходная поверхностная плотность заряда на границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  $Q_{ss2} = 0,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>. Значения  $Q_{SA}$  приведены выше для соответствующих начальных энергий имплантируемых ионов. На рисунке 3.7б представлены профили пространственного распределения концентрации электронов и дырок, рассчитанные по распределению потенциала (рисунок 3.7а).

Из рисунка 3.7 видно, что у границы раздела SiO<sub>2</sub>/Si образуется область с инверсным типом проводимости – концентрация электронов становится больше уровня легирования кремния в «*p*-кармане». Область с инверсным типом проводимости также возникает у границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в случаях глубокого легирования приборного слоя ионами бора с начальной энергией 100 кэВ (суммарный заряд на границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  $Q_{ss2} + Q_{SA} = 0,8 \cdot 10^{-7} + 2,8 \cdot 10^{-7} = 3,6 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>) и 120 кэВ ( $Q_{ss2} + Q_{SA} = 0,8 \cdot 10^{-7} + 4,3 \cdot 10^{-7} = 5,1 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>), а при 80 кэВ не возникает.

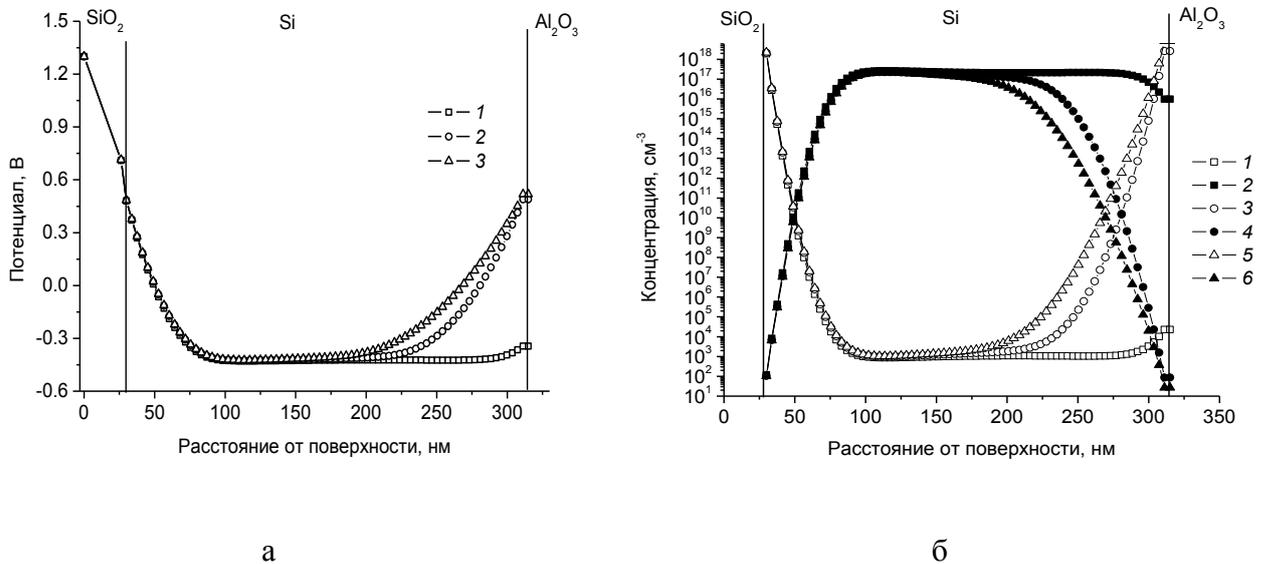
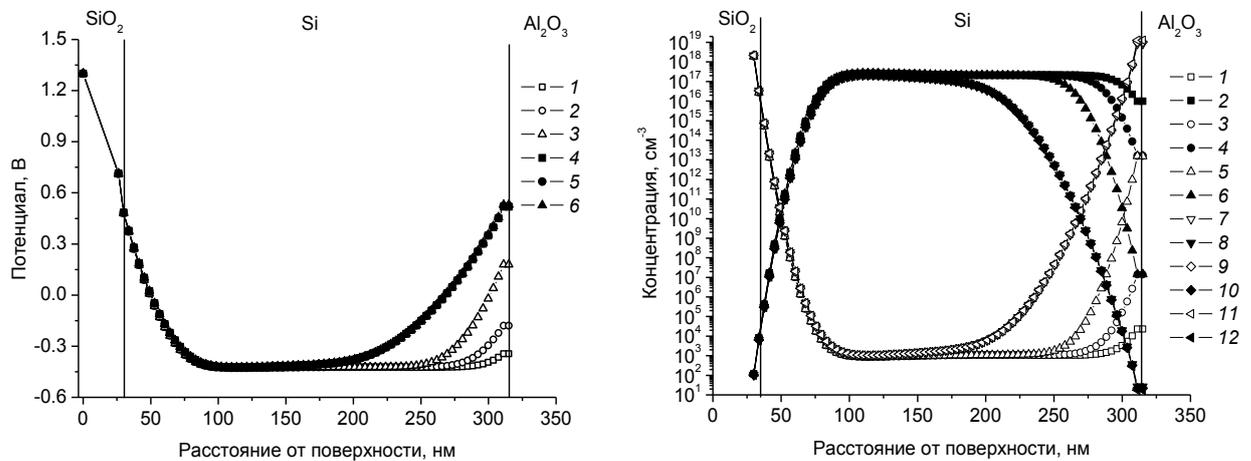


Рисунок 3.7 – Рассчитанные профили изменения потенциала электрического поля (а) и концентрации носителей заряда (б) в «*p*-кармане» МОП/КНС структуры при подаче на затвор порогового напряжения для начальных энергий имплантации бора при глубоком легировании 80 кэВ (1), 100 кэВ (2), 120 кэВ (3) и соответствующих значений  $Q_{SA}$ . Распределение электронов (1, 3, 5) и дырок (2, 4, 6) при глубоком легировании с энергиями, кэВ: 80 (1, 2), 100 (3, 4), 120 (5, 6)

На рисунке 3.8 представлены результаты расчета потенциала электрического поля и концентраций носителей заряда, в котором варьировалась начальная энергия ионов бора при

глубоком легировании КНС: 80 кэВ ( $Q_{SA} = 0,5 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>) и 120 кэВ ( $Q_{SA} = 4,3 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>), и значение исходной поверхностной плотности заряда на границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  $Q_{ss2}$ :  $0,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> (соответствует поверхностной плотности заряда  $5 \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup>),  $1,6 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> ( $10^{12}$  см<sup>-2</sup>),  $4,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> ( $3 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>). Профиль легирования «*p*-кармана»  $C(x)$  рассчитывался по модели  $D_{eff}(x) = D_{V-Si}$  (таблица 3.1).

Из рисунка 3.8 видно, что у границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> область с инверсным типом проводимости возникает при всех значениях  $Q_{ss2}$  при имплантации бора с энергией 120 кэВ в эту область «*p*-кармана». При энергии имплантации бора с энергией 80 кэВ у границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> возникает область обеднения основным носителями (дырками), однако даже при наибольшем из рассматриваемых значений  $Q_{ss2}$  инверсии типа проводимости не происходит.



а

б

Рисунок 3.8 – Рассчитанные профили изменения потенциала электрического поля (а) и концентрации носителей заряда (б) в «*p*-кармане» МОП/КНС структуры при подаче на затвор порогового напряжения. Режим ионно-лучевого легирования при формировании «*p*-кармана» варьировался: начальная энергия имплантации бора при глубоком легировании 80 кэВ ( $Q_{SA} = 0,5 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>) и 120 кэВ ( $Q_{SA} = 4,3 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>). Распределение потенциала (а): 80 кэВ – 1, 2, 3; 120 кэВ – 4, 5, 6;  $Q_{ss2} = 0,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> (1, 4),  $Q_{ss2} = 1,6 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> (2, 5),  $Q_{ss2} = 4,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup> (3, 6). Распределения концентрации электронов: 1, 3, 5 – 80 кэВ; 7, 9, 11 – 120 кэВ; дырок: 2, 4, 6 – 80 кэВ; 8, 10, 12 – 120 кэВ

На рисунке 3.9 представлены результаты расчета распределения потенциала электрического поля в «*p*-кармане» МОП/КНС структуры при подаче на затвор порогового напряжения ( $V_{g1} = 1,3$  В). Режим ионно-лучевого легирования варьировался: начальная энергия имплантации ионов бора при глубоком легировании составляла 80, 100, 120 кэВ. Варьировалась модель описания диффузии бора в КНС: в первом случае  $D_{eff}(x) = D_{V-Si}$ , во втором –

предложенная нами модель диффузии  $D_{eff}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$  в КНС (таблица 3.1). Значение  $Q_{ss2} = 0,8 \cdot 10^{-7}$  Кл/см<sup>2</sup>.

Из рисунка 3.9 видно, что профиль изменения потенциала электрического поля практически не зависит от модели диффузии, используемой при расчете профиля распределения легирующей примеси в «*p*-кармане». Профили распределения концентрации носителей заряда также слабо меняются для различных моделей диффузии. По-видимому, причина наблюдаемой закономерности состоит в том, что образование области обеднения и инверсии типа проводимости у границы Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> обусловлено главным образом зарядом в сапфире (модель диффузии на его величину не влияет), и в меньшей степени уровнем легирования кремния (связан с моделью диффузии).

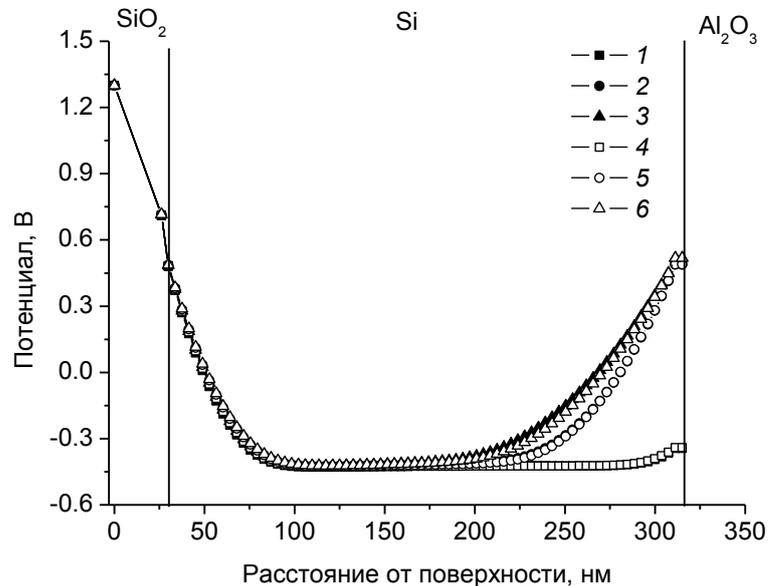


Рисунок 3.9 – Рассчитанные профили изменения потенциала электрического поля в «*p*-кармане» МОП/КНС структуры при подаче на затвор порогового напряжения для начальных энергий имплантации бора при глубоком легировании, кэВ: 80 (1, 4), 100 (2, 5), 120 (3, 6). Модель диффузии бора в КНС: 1, 2, 3 –  $D_{eff}(x) = D_{V-Si}$ ;

$$4, 5, 6 - D_{eff}(x) = D(N_d^{(3,2)}(x), \sigma(x))$$

### 3.5 Оптимизация режимов операций технологического процесса изготовления КМОП/КНС БИС по результатам моделирования

По разработанным компьютерным программам были проведены расчеты профилей пространственного распределения в КНС имплантируемых ионов бора и фосфора, их изменение в результате высокотемпературного отжига, построены профили распределения

концентрации носителей заряда в приборном слое. Полученные данные были использованы для постановки технологического эксперимента в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седякова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седякова»). В эксперименте технологический маршрут изготовления топологического аналога КМОП/КНС БИС 1825ВАЗ модифицировался от партии к партии: варьировалась начальная энергия имплантации (60–120 кэВ) и доза (0,15–0,75 мкКл/см<sup>2</sup>) ионов бора при глубоком легировании «*p*-карманов» *n*-канальных МОП транзисторов [39, 169]. Измерялся статический ток потребления микросхем ( $I_{cc}$ ) до и после воздействия стационарного ионизирующего излучения. Значение  $I_{cc}$  косвенно характеризует токи утечки микросхем, одним из основных каналов которых является ток утечки между стоком и истоком *n*-канальных МОП транзисторов по границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Результаты экспериментов представлены на рисунках 3.10, 3.11.

Из приведенных на рисунках 3.10 и 3.11 данных видно, что с увеличением начальной энергии имплантации ионов бора при глубоком легировании «*p*-карманов» *n*-канальных МОП/КНС транзисторов статический ток потребления микросхем после воздействия стационарного ионизирующего излучения возрастает. При энергиях имплантации бора 80 и 100 кэВ  $I_{cc}$  может отличаться на 1–2 порядка (рисунок 3.10). Почти двукратное изменение дозы глубокого легирования сказывается на величине токов утечки в меньшей степени (рисунок 3.11).

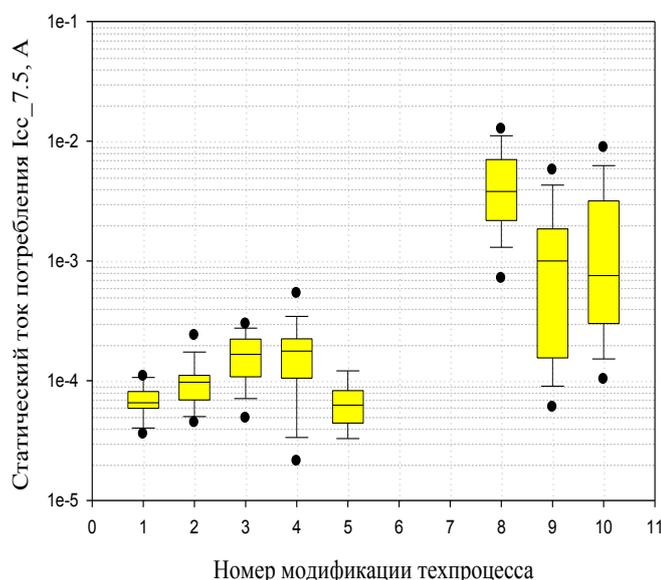
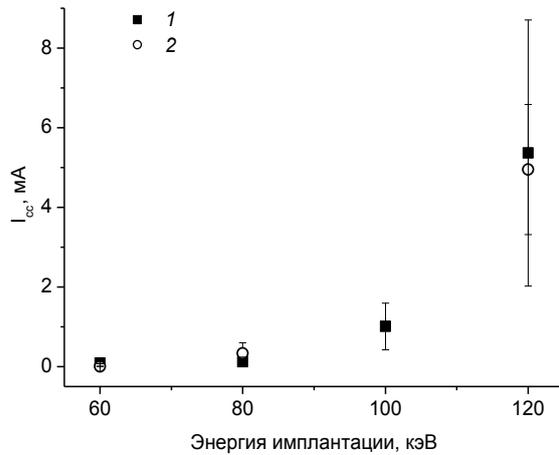
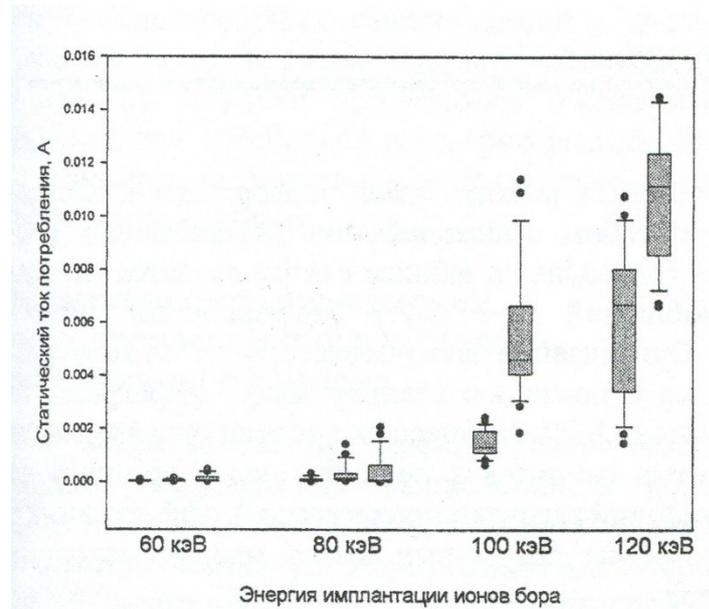


Рисунок 3.10 – Зависимость среднего значения и разброса по партии статического тока потребления ( $I_{cc}$ ) КМОП/КНС БИС после воздействия стационарного ионизирующего излучения для различных модификаций технологического маршрута их изготовления (1–5, 8–10). Доза имплантации при глубоком легировании «*p*-кармана», мкКл/см<sup>2</sup>: 1 – 0,15, 2 – 0,30, 3 – 0,45, 4 – 0,60, 5 – 0,75, 8 – 0,60, 9 – 0,40, 10 – 0,60; энергия имплантации бора, кэВ: 1–5 – 80 и 8–10 – 100 [169]



а



б

Рисунок 3.11 – Зависимость среднего значения и разброса по партии статического тока потребления ( $I_{cc}$ ) КМОП/КНС БИС после воздействия стационарного ионизирующего излучения для различных модификации технологического маршрута их изготовления. Доза имплантации бора при глубоком легировании «*p*-кармана» (а), мкКл/см<sup>2</sup>: 1 – 0,40, 2 – 0,75; энергия имплантации бора 60–120 кэВ [170]. Доза имплантации бора (б) 0,40 мкКл/см<sup>2</sup>, энергии 60–120 кэВ [171].

В [39] приведены результаты исследования зависимости величины  $I_{cc}$  от исходной толщины приборного слоя гетероструктур КНС. Средний статический ток потребления микросхем изготовленных по одному и тому же технологическому маршруту после воздействия стационарного ионизирующего излучения варьируется в интервале 0,05–0,4 мА, если исходная толщина приборного слоя используемых для изготовления микросхем гетероструктур КНС варьируется в интервале 0,32–0,35 мкм. Большей толщине приборного слоя соответствуют меньшие значения  $I_{cc}$ .

Таким образом, экспериментально обнаружена многопараметрическая зависимость величины тока утечки микросхем после воздействия стационарного ионизирующего излучения, характеризуемая величиной статического тока потребления ( $I_{cc}$ ), от режима ионно-лучевого легирования «*p*-кармана» *n*-канальных МОП транзисторов. Эту зависимость можно объяснить на основе результатов моделирования технологического процесса изготовления БИС, проведенных в разделах 3.3 и 3.4. Токи утечки КМОП/КНС БИС в значительной мере определяются токами утечки *n*-канальных МОП транзисторов по границе раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при напряжениях на затворе меньше порогового [37, 79]. Радиационные дефекты, возникшие в результате внедрения в сапфир ионов бора при глубоком легировании, захватывают носители заряда, генерируемые в сапфире при воздействии ионизирующего излучения. В сапфире

возникает положительный по знаку заряд, что приводит к обеднению приборного слоя основными носителями заряда (дырками в «*p*-кармане»). Степень обеднения определяется уровнем легирования кремния в этой области структуры, поверхностной плотностью заряда  $Q_{ss2}$  на гетерогранице, концентрацией заряженных радиационных дефектов в сапфире  $Q_{SA}$ . Как показано выше эти параметры зависят от начальной энергии имплантации и дозы глубокого легирования «*p*-кармана» бором. При бóльшей начальной энергии (ионы бора внедряются в сапфир) уровень легирования кремния меньше, а концентрация заряженных дефектов в сапфире больше, степень обеднения кремния выше (вплоть до инверсии типа проводимости), и вероятность образования канала токов утечки сток – исток выше. С уменьшением начальной энергии имплантации проявление этих негативных эффектов снижается. Увеличение дозы легирования приводит к повышению уровня легирования области кремния вблизи границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  но, в то же время, к увеличению эффективности дефектообразования в сапфире и увеличению концентрации заряженных радиационных дефектов. Рассчитанные распределения потенциала электрического поля, концентрации основных и неосновных носителей заряда в «*p*-кармане», иллюстрирующие образование канала токов утечки в зависимости от режима глубокого легирования, представлены на рисунках 3.7–3.9. При энергии имплантации бора 100 и 120 кэВ формируется область с инверсным типом проводимости. Это приводит к зарегистрированному экспериментально увеличению статического тока потребления КМОП/КНС БИС при воздействии стационарного ионизирующего излучения.

Вариации толщины приборного слоя исходных гетероструктур КНС эквивалентны изменению начальной энергии имплантации ионов бора при глубоком легировании: уменьшение толщины приводит к более глубокому внедрению ионов, увеличение – к тому, что меньшая их часть достигает границы раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и внедряется в сапфир. То есть при меньших толщинах приборного слоя исходных гетероструктур КНС возникают условия, способствующие образованию канала токов утечки *n*-канальных МОП транзисторов при идентичных режимах технологических операций.

В работе [66] экспериментально установлено, что профиль пространственного распределения фосфора, диффундирующего в КНС из имплантированного слоя, имеет пик на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  (глава 1, рисунки 1.3 и 1.4). Авторы [66] связывают образование этого пика с электрическим притяжением отрицательно заряженных ионов фосфора положительно заряженной гетерограницей. Возможное объяснение появления этого пика состоит в том, что на границе раздела  $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$  и на дефектах кристаллической структуры вблизи нее происходит сегрегация фосфора [151]. В технологическом процессе изготовления КМОП/КНС БИС ионно-лучевое легирование фосфором приборного слоя с последующим высокотемпературным отжигом производится для формирования стоковых и истоковых областей *n*-канальных МОП

транзисторов (после формирования «*p*-карманов»). Диффузия фосфора будет происходить не только к гетерогранице, но и в ее плоскости по ростовым дефектам кристаллической структуры (путям «ускоренного движения»), после чего возможна его электрическая активация. Таким образом, происходит дополнительное легирование области вблизи гетерограницы фосфором (донорами), компенсация легирования «*p*-кармана» бором (акцепторами), электрическое замыкание стоковой и истоковой областей транзисторов проводящим каналом, легированным фосфором. Возможность реализации описанного механизма формирования канала токов утечки *n*-канальных МОП/КНС транзисторов требует дополнительных исследований. В то же время, установленная экспериментально сильная зависимость величины токов утечки микросхем от режимов технологических операций формирования «*p*-кармана» при неизменных режимах формирования стоковой и истоковой областей транзисторов позволяет утверждать, что начальная энергия имплантации ионов бора при глубоком легировании приборного слоя, их доза и степень радиационного повреждения границы раздела Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и сапфира вблизи нее – основные факторы, влияющие на величину токов утечки (статического тока потребления) микросхем при воздействии ионизирующих излучений.

В [172] показано, что облучение гетероструктур КНС импульсным рентгеновским излучением даже «допороговых» энергий приводит к перестройке примесно-дефектного состава переходного слоя и границы раздела, находящихся в метастабильном фазовом и структурном состоянии. Полученные в [172] результаты могут быть объяснены влиянием упругих волн, возникающих вследствие ионизации комптоновскими электронами и кулоновского «расталкивания» групп Si-Si(P), SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [44]. Возникающие таким образом заряженные дефекты вблизи гетерограницы Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, могут также вносить вклад в образование канала токов утечки КМОП/КНС БИС, однако справедливость этой гипотезы нуждается в дополнительных исследованиях.

### 3.6 Выводы к главе 3

1. Характерные особенности строения гетероструктур КНС (высокая плотность ростовых дефектов кристаллической структуры и упругие напряжения), учитываемые по предложенной модели, влияют на профили пространственного распределения легирующих примесей, формируемые ионной имплантацией и высокотемпературным отжигом. Отличие концентрации бора в «*p*-кармане» *n*-канальных МОП транзисторов на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя достигает 1,4 раза по сравнению с результатами расчета без учета этих факторов. Для ионов фосфора при формировании стоковых и истоковых областей МОП транзисторов отличие составляет 1,5 раза и более.

2. Зарегистрированное экспериментально превышение допустимой величины статического тока потребления (токов утечки) КМОП/КНС БИС после воздействия стационарного ионизирующего излучения обусловлено режимом технологических операций формирования «*p*-карманов» *n*-канальных МОП/КНС транзисторов. Наибольшее влияние оказывает выбор начальной энергии имплантации ионов бора при ионно-лучевом легировании области вблизи границы раздела кремний/сапфир: в гетероструктурах КНС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм начальная энергия должна быть не более 80 кэВ. Образование канала токов утечки сток – исток *n*-канальных МОП/КНС транзисторов происходит в результате обеднения основными носителями заряда (дырками) или инверсии типа проводимости кремния вблизи границы раздела кремний/сапфир. Этот эффект обусловлен образованием значительной концентрации радиационных дефектов в сапфире, как предполагается пропорциональной концентрации ионов бора, внедренных в сапфир при глубоком легировании «*p*-кармана». Радиационные дефекты в сапфире заряжаются в результате захвата на уровни энергии в запрещенной зоне дырок, генерируемых в сапфире при воздействии ионизирующего излучения. При глубоком легировании «*p*-кармана» бором с начальной энергией 100 и 120 кэВ величина образующегося в сапфире заряда и уровень легирования «*p*-кармана» достаточны для инверсии типа проводимости кремния вблизи границы раздела кремний/сапфир и формирования канала токов утечки между стоком и истоком МОП транзисторов.

3. Вариации толщины приборного слоя исходных гетероструктур КНС (0,3 мкм) по поверхности пластин (около 20 нм) обуславливает разброс величины статического тока потребления (токов утечки) КМОП/КНС БИС после воздействия стационарного ионизирующего излучения. Так при одной и той же энергии имплантации ионов легирующих примесей уровень легирования приборного слоя и эффективность образования радиационных дефектов вблизи границы раздела кремний/сапфир и в сапфире больше для более тонких приборных слоев.

## ГЛАВА 4. ОБРАЗОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С САМОФОРМИРУЮЩИМИСЯ НАНООСТРОВКАМИ Ge(Si)/Si(001) В КАСКАДАХ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ

### 4.1 Введение

В настоящее время в качестве одного из перспективных направлений создания источников и приемников оптического излучения в диапазоне длин волн 1,3–1,55 мкм совместимых с технологией кремниевой микроэлектроники рассматривается использование гетероструктур с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si) (глава 1). В связи с этим оптимизируется технология их получения, и исследуются изменения характеристик при воздействии внешних дестабилизирующих факторов, в том числе, ионизирующих излучений. Поэтому изучение изменений электрических и оптических свойств этих гетероструктур при радиационных воздействиях имеет как фундаментальное, так и прикладное значение. Облучение полупроводников ионами, нейтронами, протонами, электронами (с энергией более 10 МэВ) приводит к образованию каскадов атомных смещений [53, 54], а после окончания динамической стадии, к образованию радиационных точечных дефектов и разупорядоченных областей (трехмерных кластеров радиационных дефектов). Ниже рассмотрены процессы, сопровождающие каскады атомных смещений, инициированные быстрыми нейтронами. Однако, сделанные выводы могут быть распространены и на другие виды перечисленных первичных излучений.

В работах [101, 102] исследовалась деградация спектров ФЛ и ЭЛ массивов наноструктур Ge(Si)/Si(001), используемых в качестве активной среды в фотоприемниках и светодиодах, при импульсном облучении нейтронами со средней энергией 1 МэВ и флюенсом  $10^{13}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup>. При интерпретации полученных данных авторами этих работ высказано предположение о том, что экспериментально наблюдаемое уменьшение интенсивности сигналов ФЛ и ЭЛ от облученных структур обусловлено уменьшением числа наноструктур, дающих вклад в измеряемый сигнал. Причина этого состоит в образовании в объеме таких наноструктур радиационных дефектов и безызлучательной рекомбинации носителей заряда через их уровни энергии в запрещенной зоне. С ростом флюенса нейтронов проявление эффекта усиливается, так как увеличивается количество наноструктур Ge(Si)/Si(001) с радиационными дефектами.

Нами предложены и исследованы теоретически возможные гипотезы, о причинах изменения оптических свойств многослойных массивов наноструктур Ge(Si)/Si(001) при образовании в них каскадов атомных смещений. Первая из них основана на предположении,

что деградация при облучении нейтронами спектров ФЛ и ЭЛ массивов наностроек Ge(Si)/Si(001), обнаруженная в [101, 102], происходит в результате каскадного перемешивания атомов Ge и Si на гетерограницах наностроек/спейсерный слой кремния [173]. Предпосылками к этой гипотезе послужил ряд экспериментальных фактов. Установлено, что ФЛ и ЭЛ массивов наностроек Ge(Si)/Si(001) зависят от их размеров, формы, поверхностной плотности и состава [174]. Так при уменьшении на стадии роста среднего содержания атомов Ge в наностройках от 45 до 37% и соответствующем росте доли Si, резко снижается интенсивность ЭЛ строек при комнатной температуре. Диффузия Si в строек при отжиге структур обуславливает сдвиг максимумов в спектрах ФЛ и ЭЛ в сторону больших энергий, а увеличение доли Ge от 45 до 51% при увеличении толщины разделяющего слоя наностроек слоя кремния – в сторону меньших энергий. В [92] приведены результаты расчетов спектров дырок в структурах с резкой и размытой в результате диффузионного перемешивания границами между слоем кремния и наностройком Ge(Si)/Si(001). Показано, что в случае размытой границы спектр содержит дублеты, отделенные друг от друга зазором 1–3 мэВ, а при переходе к резкой гетерогранице наблюдается дополнительное расщепление этих дублетов и энергетические зазоры возрастают до 7–10 мэВ. В [175] сообщалось о зафиксированных методом атомно-силовой микроскопии изменениях микроморфологии сформированных на поверхности кремния наностроек Ge(Si)/Si(001), после импульсного гамма-нейтронного облучения.

Вторая гипотеза, развивающая сформулированные в [101, 102] предположения, учитывает, что характерные размеры каскадов атомных смещений при облучении нейтронами превышают размеры наностроек Ge(Si)/Si(001) и среднее расстояние между ними в планарных массивах. То есть один каскад может попасть в несколько наностроек массива и создать радиационные дефекты в каждом из них. Для проверки этой гипотезы с помощью компьютерного моделирования нами исследовано пространственное распределение ТРД, образовавшихся в результате инициированных нейтронами каскадов атомных смещений в гетеростройках с многослойными массивами наностроек Ge(Si)/Si(001) [176]. Для проверки обеих гипотез использовалась специально разработанная на основе программы TRIS, программа TRISQD [176, 177].

Третья гипотеза заключается в том, что деградация оптоэлектронных свойств наностроек Ge(Si)/Si(001) происходит под действием электрических полей и упругих напряжений кристаллической решетки, создаваемых РО (кластерами радиационных дефектов) [178–180].

## 4.2 Компьютерная программа TRISQD

Для теоретического исследования процессов дефектообразования в гетероструктурах Ge(Si)/Si(001), сопровождающего каскады атомных смещений, нами использовалось компьютерное моделирование методом Монте-Карло с помощью специально разработанной программы TRISQD («TRansport of Ions to Solids with Quantum Dots») [177]. Программа TRISQD создана на основе ранее разработанной программы TRIS [109] (раздел 2.1.2). Блок-схема модифицированного алгоритма программы TRISQD представлена на рисунке 4.1 (пунктиром выделены добавленные этапы моделирования).

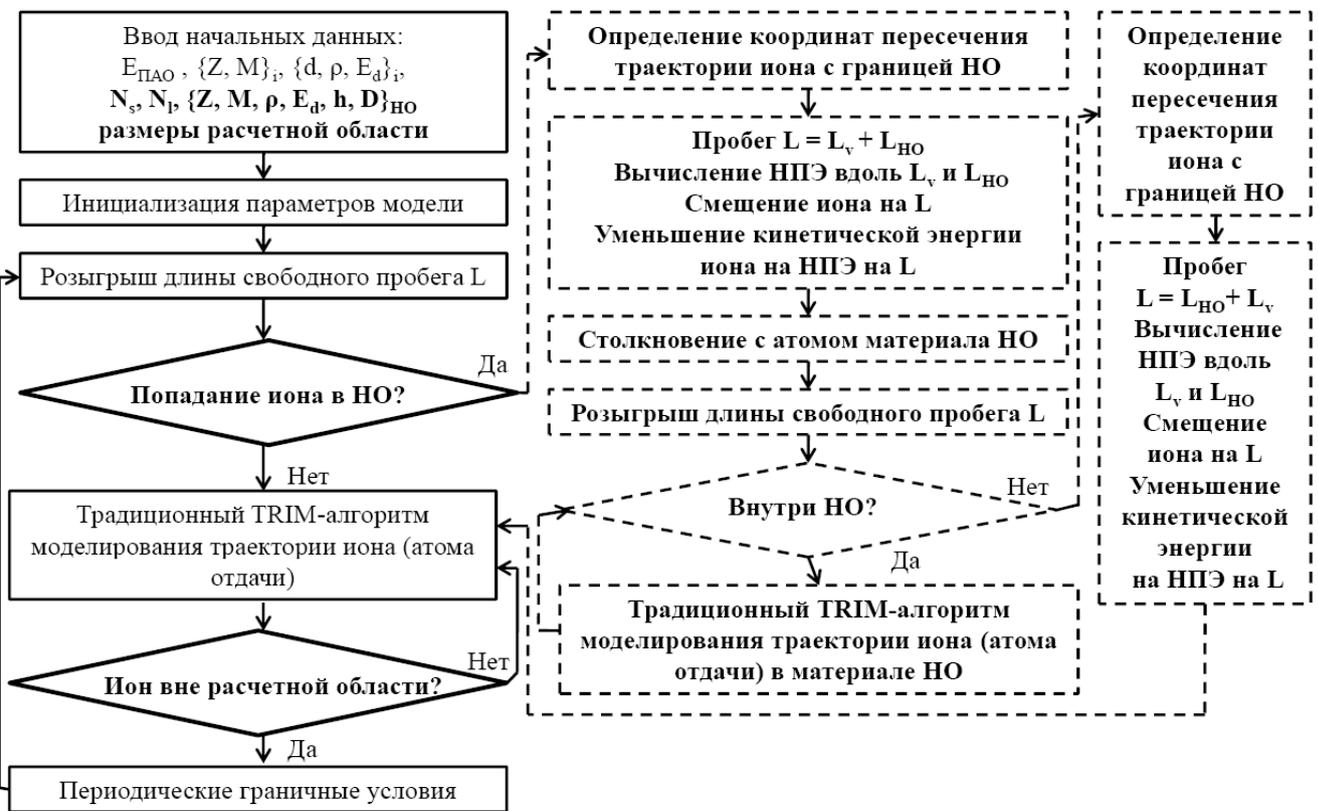


Рисунок 4.1 – Блок-схема алгоритма программы TRISQD (пунктиром выделены добавленные этапы). НО – наноструктура (включение линзообразной формы).  $E_{\text{ПАО}}$  – начальная энергия ПАО. В слоях гетероструктуры:  $\{Z, M, E_d\}_i$  – атомный номер и атомная масса, энергии смещения атомов в каждом слое;  $\{d, \rho\}_i$  – толщина и плотность слоев. В НО:  $\{Z, M, h, D, \rho, E_d\}_i$  – атомный номер и атомная масса атомов материала, высота, диаметр основания, плотность материала, энергия смещения атомов.  $N_s$  – поверхностная плотность НО;  $N_l$  – количество слоев в гетероструктуре. Остальные обозначения введены в тексте и на рисунке.

От известных программ, например, SRIM-2013 [106], TRISQD отличается возможностью задания в объеме «мишени» локальных областей линзообразной формы с химическим составом, плотностью и энергией  $E_d$ , отличающимися от этих параметров в окружающем

материале. Основания включений располагаются в одной геометрической плоскости, а их поверхностная плотность может варьироваться (допустимо задание одного включения). Программа имеет возможность в ходе моделирования накапливать данные о количестве возникших в объеме каждого включения первичных РТД, а затем проводить их статистическую обработку. Введение слоев со множеством линзообразных включений в TRISQD усложняет геометрическую модель «мишени», что влечет за собой увеличение затрат машинного времени на моделирование траекторий атомов отдачи. Поэтому расчеты выполняются внутри области в форме параллелепипеда, размеры которого меньше размеров реальной гетероструктуры. Для учета внедрения в эту область каскадов атомных смещений из окружающего объема в TRISQD реализованы периодические граничные условия. Для этого в ходе моделирования программа автоматически корректирует координаты и/или направление движения атома отдачи, если он выходит за пределы расчетной области. В результате атом отдачи может «вернуться» в расчетную область через противоположную грань расчетной области, «отразиться» от ее границы или покинуть ее. Таким образом, при отождествлении линзообразных включений с nanoостровками Ge(Si) программа TRISQD позволяет задать геометрическую модель гетероструктур с требуемой степенью детализации и исследовать процессы дефектообразования как в одном nanoостровке, так и в их многослойном массиве. Это позволяет проверить справедливость сформулированных выше гипотез о механизме радиационной деградации свойств nanoостроек Ge(Si) при облучении.

#### **4.3 Моделирование процессов образования радиационных точечных дефектов и каскадного перемешивания в одиночном nanoостровке Ge(Si)/Si(001)**

Проведены компьютерные эксперименты по моделированию развития каскада атомных смещений, инициированного первичным атомом отдачи Si с энергией 67, 134, 268 кэВ и точкой старта, расположенной на расстоянии  $L$  от вершины nanoостровка Ge(Si) (рисунок 4.2) [173]. Предполагается, что каскад атомных смещений возникает в результате взаимодействия быстрого нейтрона с энергией 1, 2 и 4 МэВ соответственно, с ядром атома кремния (как и в экспериментах [101, 102]). Начальная энергия первичных атомов отдачи (ПАО,  $E_{\text{ПАО}}$ ) в приближении упругого рассеяния нейтронов на ядрах атомов кремния вычислялась по формуле [53]:

$$E_{\text{ПАО}} = 2 \cdot M_n \cdot M_{\text{ПАО}} \cdot E_n / (M_n + M_{\text{ПАО}})^2, \quad (4.1)$$

где

$M_n$  – масса нейтрона (1,009 а. е. м.);

$E_n$  – кинетическая энергия нейтрона;

$M_{\text{ПАО}}$  – масса атома, с ядром которого происходит столкновение (для кремния  $M_{\text{ПАО}} = 28,086$  а. е. м.).

Расстояния  $L$  выбирались так, чтобы максимум упругих потерь энергии каскада лежал в объеме наноструктуры: 50, 140 и 330 нм соответственно. Начальное направление движения ПАО – к вершине (центру) наноструктуры. Для сравнения расчеты выполнены также для объемного кремния при тех же значениях  $E_{\text{ПАО}}$  и  $L$ . Количество выполненных в ходе расчета статистических испытаний –  $10^4$ .

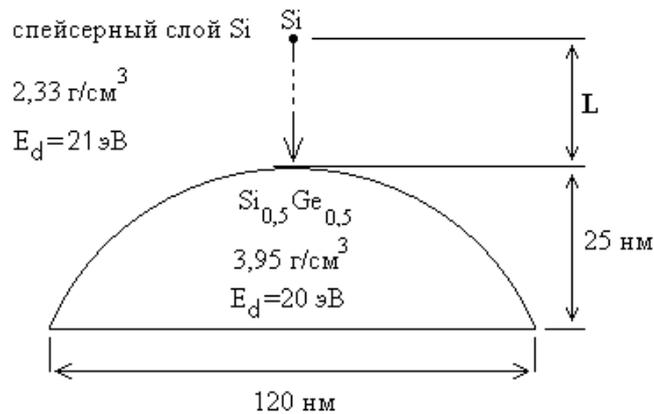


Рисунок 4.2 – Схематичное изображение геометрии расположения наноструктуры и точки старта ПАО

Построены профили пространственного распределения вдоль начального направления движения ПАО упругих потерь энергии атомов отдачи (рисунок 4.3), концентраций возникающих в каскадах смещений вакансий и междоузельных атомов Si и Ge (рисунок 4.4). Для удобства интерпретации результатов на рисунках построены вертикальные линии, соответствующие проекциям плоскостей, в которых лежат вершина (1) и основание наноструктуры (2).

Компьютерные эксперименты показали, что торможение атомов отдачи в наноструктуре Ge(Si) происходит более эффективно, величина их упругих потерь энергии больше, чем в объемном кремнии, поскольку плотность материала наноструктуры больше, чем спейсерного слоя (рисунок 4.3). Профили пространственного распределения концентрации междоузельных атомов и вакансий Si и Ge в объеме наноструктуры практически совпадают (рисунок 4.4), что свидетельствует о несущественном каскадном перемешивании на границе наноструктур/спейсерный слой. Из совпадения профилей вакансий и междоузельных атомов следует, что выбитые из своих положений в кристаллической решетке атомы Si спейсерного слоя практически не внедряются в объем наноструктуры Ge(Si). Концентрация РТД имеет градиент, который может влиять на перераспределение атомов Si и Ge через гетерограницу

наноостровков/спейсерный слой посредством взаимодействия с РТД, что не учитывается в расчете. При бóльших значениях начальной энергии ПАО увеличивается концентрация РТД в наноостровке.

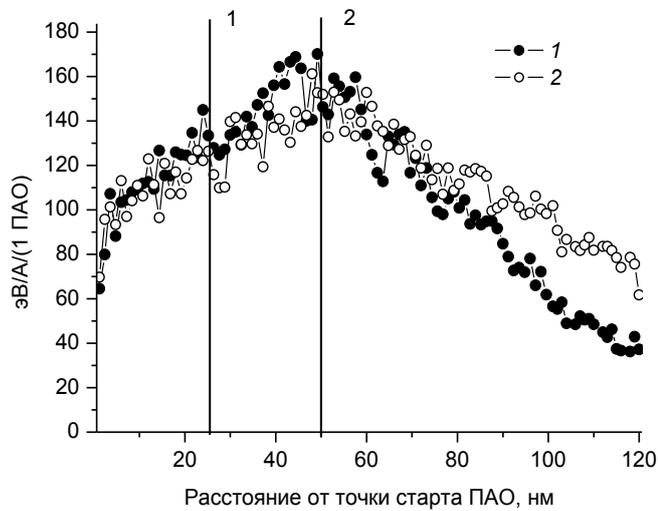


Рисунок 4.3 – Профили пространственного распределения упругих потерь энергии атомов отдачи в гетероструктуре с наноостровком Ge(Si) (1) и объемном кремнии (2). Начальная энергия ПАО 67 кэВ.

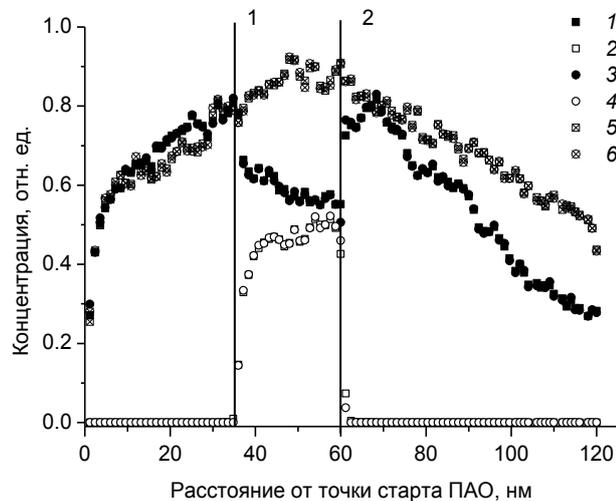


Рисунок 4.4 – Профили пространственного распределения междуузельных атомов (1, 2, 5) и вакансий (3, 4, 6) Si (1, 3, 5, 6) и Ge (2, 4) в гетероструктуре с наноостровком Ge(Si) (1–4) и объемном кремнии (5, 6). 1 – плоскость основания, 2 – вершина наноостровка. Начальная энергия ПАО 67 кэВ.

#### 4.4 Моделирование процессов образования радиационных точечных дефектов в гетероструктурах с многослойным массивом самоформирующихся наностроек Ge(Si)/Si(001)

Для исследования дефектообразования при облучении быстрыми нейтронами в многослойном массиве наностроек Ge(Si) моделированием по программе TRISQD [176, 177] была задана геометрическая модель структуры  $p-i-n$ -диода со встроенной решеткой самоформирующихся наностроек Ge(Si), исследования которой проводились в [101, 102]. Численные значения параметров геометрической модели  $p-i-n$ -диода выбирались равными приведенным на рисунке 4.5, а заданные в интервалах, приняты равными средним по интервалам. Согласно [181] плотность кремния  $2,33 \text{ г/см}^3$ , а твердого раствора  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  (при  $x = 0,45$ ) оцененная по формуле:  $\rho = 5,3256 - 2,5083y - 0,4853y^2$  ( $y = 1 - x$ ), равна  $3,80 \text{ г/см}^3$ . Поскольку значения энергии смещения атомов Si и Ge из узлов кристаллической решетки рассматриваемой гетероструктуры неизвестны, то для обоих типов атомов во всех материалах она задавалась равной 20 эВ, что характерно для объемного кремния [124].

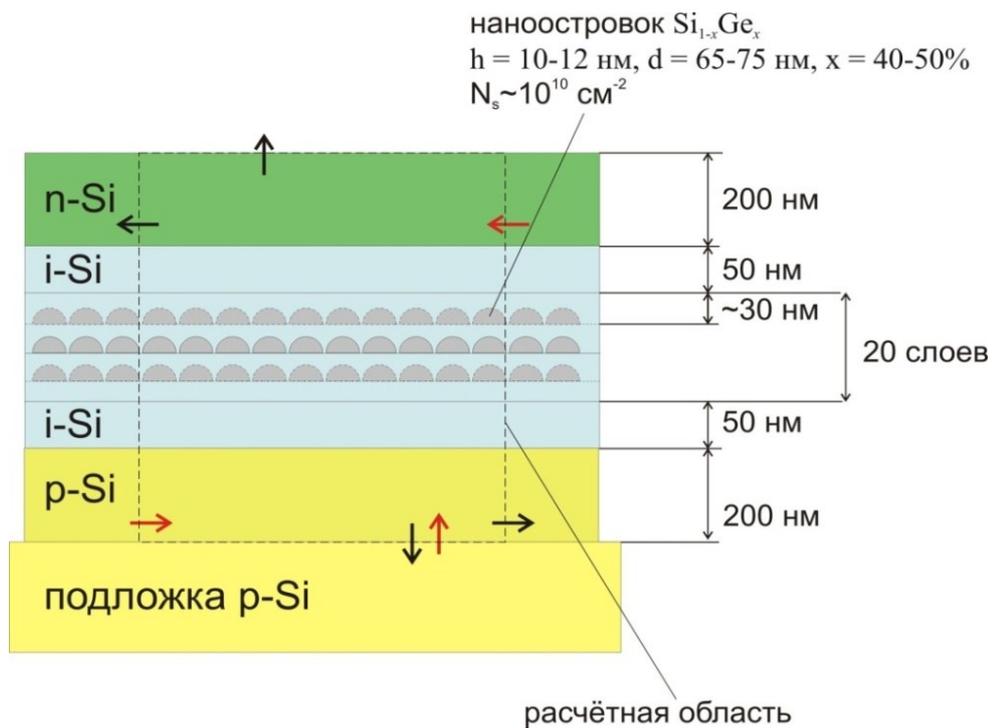


Рисунок 4.5 – Геометрическая модель гетероструктуры  $p-i-n$ -диода, в  $i$ -область которого встроена 20-периодная решетка наностроек Ge(Si), для моделирования процессов дефектообразования при облучении ее быстрыми нейтронами. Стрелками показаны направления пересечения атомами отдачи границ расчетной области для реализации «периодических» граничных условий

Энергетический спектр нейтронов реактора, где облучались гетероструктуры [101, 102], как и любой спектр деления урана содержит несколько компонент в интервале 0,1–8,0 МэВ. Поэтому практический интерес представляет оценка параметров дефектообразования при развитии каскадов, инициированных нейтронами с разными энергиями из этого интервала. Начальная энергия ПАО вычислялась по формуле (4.1). Выбранные из этого интервала значения  $E_n$  и соответствующие им округленные до целых значения  $E_{\text{ПАО}}$  представлены в таблице 4.1. Для упрощения ПАО Ge не рассматривались, поскольку содержание атомов этого элемента в гетероструктуре много меньше, чем атомов Si. Положение точек старта ПАО разыгрывались случайным образом из равномерных распределений по каждой из пространственных координат. Начальные направления движения ПАО – из равномерного распределения в пространстве согласно алгоритму, описанному в [182].

Для сокращения времени счета по программе TRISQD до приемлемых значений (несколько часов), моделирование каскадов атомных смещений выполнялось не во всем объеме  $p-i-n$ -диода, а в выбранной расчетной области размерами  $L \times L \times l_{\text{pin}}$ .  $L$  – размер области в плоскости эпитаксиального роста гетероструктуры,  $l_{\text{pin}}$  – ее толщина (1,07 мкм). При корректном выборе размеров расчетной области результаты моделирования будут близки к характерным для целого  $p-i-n$ -диода. При выборе значения  $L$  учитывалось, что оно должно быть существенно больше характерного размера каскада атомных смещений с данной  $E_{\text{ПАО}}$  для наиболее полного воспроизведения моделируемых процессов. В качестве характерного размера каскада принят удвоенный средний проецированный на начальное направление движения пробег ПАО с энергией  $E_{\text{ПАО}}$ . Множитель два введен для учета того, что все направления движения ПАО равновероятны. Для атомов Si с  $E_{\text{ПАО}}$  в интервале 67–536 кэВ средний проецированный пробег в кремнии составляет 0,1–0,7 мкм. В то же время в объеме расчетной области должно помещаться столько nanoостровков, чтобы при усреднении результатов расчета по их числу обеспечить достаточный объем выборки ( $\geq 10^4$ ). При указанной выше поверхностной плотности nanoостровков  $L$  должно быть  $\geq 2,3$  мкм. Значение  $L$  принято равным 3 мкм, так как удовлетворяет всем перечисленным критериям и приемлемо с точки зрения вычислительной эффективности.

Вклад в дефектообразование каскадов атомных смещений, возникших за пределами расчетной области и попавших в нее, учитывался с помощью периодических граничных условий. В ходе моделирования программа TRISQD автоматически корректирует координаты и/или направление движения атома отдачи, если он выходит за пределы расчетной области (указано на рисунке 4.5 стрелками). При пересечении атомом отдачи одной из граней расчетной области, перпендикулярных направлению роста гетероструктуры  $p-i-n$ -диода, соответствующие координаты изменяются так, что атом входит в расчетную область через

противоположную грань. Направление движения не изменяется. Если атом отдачи пересекает грань расчетной области, совпадающую с границей раздела кремниевой подложки и гетероструктуры  $p-i-n$ -диода, то его координата симметрично отражается относительно нее. Направление движения этого атома отдачи изменяется на противоположное. При пересечении атомом отдачи грани расчетной области, совпадающей с границей раздела  $n$ -слоя и верхнего металлического контакта  $p-i-n$ -диода, считается, что он покинул объем гетероструктуры и его траектория обрывается.

По результатам моделирования оценивалось среднее число наностроек, где образовались РТД в расчете на один каскад атомных смещений (ПАО)  $\bar{v}$ , характеризующее статистический разброс значения  $\bar{v}$  среднее квадратическое отклонение  $\Delta\bar{v}$ , среднее число вакансий в объеме всех наностроек  $\bar{d}_{is}$  и в окружающем их материале  $\bar{d}_v$  внутри расчетной области. Усреднение проводилось по  $10^4$  статистических испытаний (каскадам атомных смещений). Полученные значения  $\bar{v}$ ,  $\Delta\bar{v}$ ,  $\bar{d}_{is}$ ,  $\bar{d}_v$  для всех  $E_{ПАО}$  представлены в таблице 4.1. Также по результатам моделирования построены распределения относительных частот (вероятностей) образования РТД в заданном числе наностроек в процессе развития одного каскада атомных смещений при различных  $E_{ПАО}$  (рисунок 4.6). Значения  $\bar{v}$  и  $\Delta\bar{v}$  – математическое ожидание и дисперсия этого распределения соответственно.

Таблица 4.1 – Рассчитанные значения  $\bar{v}$ ,  $\Delta\bar{v}$ ,  $\bar{d}_{is}$ ,  $\bar{d}_v$ ,  $\bar{\epsilon}$  для различных энергий ПАО  $E_{ПАО}$

$E_n$ , МэВ	$E_{ПАО}$ , кэВ	$\bar{v}$	$\Delta\bar{v}$	$\bar{\epsilon}$ , %	$\bar{d}_{is}$ , вак./ПАО	$\bar{d}_v$ , вак./ПАО
1	67	0,62	0,86	0,03–3,31	41	690
2	134	1,17	1,33	0,06–6,24	70	1086
4	268	2,05	2,02	0,11–10,98	108	1566
8	536	3,28	2,78	0,18–17,56	147	2040

Примечание – Вак./ПАО – вакансий на один ПАО

Средняя доля поврежденных образованием РТД наностроек  $\bar{\epsilon} = \bar{N}/N_{is} \cdot 100\%$ .  $N_{is}$  – концентрация наностроек Ge(Si) в объеме  $p-i-n$ -диода, которая при указанных выше поверхностной плотности и толщинах слоев гетероструктуры равна  $1,9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Среднюю концентрацию наностроек, поврежденных образованием радиационных дефектов, можно оценить по формуле:

$$\bar{N} = \sigma_d(E_n) \cdot N_{\text{at}} \cdot F_n \cdot \bar{\nu},$$

где

$\sigma_d(E_n)$  – сечение упругого рассеяния нейтронов на ядрах атомов материала;

$E_n$  – энергия нейтронов;

$N_{\text{at}}$  – концентрация ядер атомов материала;

$F_n$  – флюенс нейтронов.

Эта формула аналогична используемой для оценки полного числа смещенных атомов в веществе при облучении нейтронами, если под  $\bar{\nu}$  понимается среднее число смещенных атомов, приходящееся на один ПАО [53]. Для кремния среднее значение  $\sigma_d(E_n)$  для  $E_n$  в диапазоне 0,5–10 МэВ составляет 2 барна [53],  $N_{\text{at}} \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Вычисленные границы интервалов  $\bar{\nu}$  при всех  $E_{\text{ПАО}}$  и  $F_n = (1-100) \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  [101, 102] приведены в таблице 4.1 (наименьшая граница интервала соответствует наименьшему флюенсу нейтронов).

Из данных таблицы 4.1 следует, что доля nanoостровков Ge(Si) в  $i$ -области  $p-i-n$ -диода, в которых образуются РТД при облучении нейтронами с энергией 8 МэВ и флюенсе  $10^{15} \text{ см}^{-2}$  достигает 18%. Эти значения параметров излучения можно считать предельными, они используются лишь для получения теоретической оценки сверху. На практике  $F_n$  – это интеграл по всему энергетическому спектру воздействующего на образец излучения реактора. Нейтронам с определенной энергией соответствует лишь доля в измеряемом флюенсе, причем с ростом  $E_n$  она уменьшается. Средняя энергия нейтронов в спектре при проведении экспериментов [101, 102] составляла 1 МэВ. При такой энергии нейтронов доля поврежденных РТД nanoостровков  $\approx 3\%$  даже при максимальном значении  $F_n$ . Поэтому образование радиационных дефектов в отдельных nanoостровках Ge(Si) в результате прямого попадания в них инициированных нейтронами каскадов атомных смещений нельзя считать основной причиной деградации спектров ФЛ и ЭЛ их массивов. Этот вывод подтверждает и рисунок 4.6, из которого следует что вероятность возникновения РТД в процессе развития одного каскада атомных смещений хотя бы в одном nanoостровке Ge(Si) не превышает 0,3.

Дефектообразование наиболее эффективно происходит в объеме  $p$ -,  $i$ -,  $n$ -областей диода и слоях кремния, разделяющих слои nanoостровков Ge(Si) в решетке. Из приведенных в таблице 4.1 данных видно, что количество РТД (на примере вакансий) в nanoостровках Ge(Si)  $\bar{d}_{\text{is}}$  составляет  $\leq 7\%$  от полного числа дефектов  $\bar{d}_v$  в расчете на один ПАО. Поэтому деградация спектров ФЛ и ЭЛ массивов nanoостровков Ge(Si), встроенных в  $i$ -область  $p-i-n$ -диода при облучении нейтронами, по-видимому, обусловлена изменением параметров переноса носителей заряда в  $p$ -,  $i$ -,  $n$ -областях из-за образования радиационных дефектов. Захват на ловушки и безызлучательная рекомбинация через создаваемые ими в запрещенной зоне кремния уровни

уменьшает поток носителей заряда к наноструктурам Ge(Si), а, следовательно, и интенсивность излучательной рекомбинации в них, что и наблюдается экспериментально.

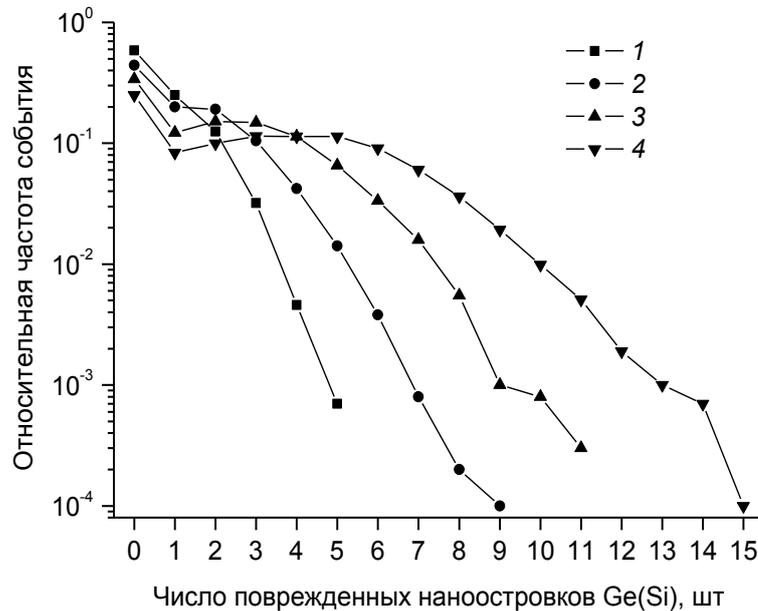


Рисунок 4.6 – Распределения относительных частот образования точечных радиационных дефектов (повреждения) заданного числа наноструктур Ge(Si) каскадом атомных смещений при начальных энергиях вызывающего его первичного атома отдачи, кэВ: 1 – 67, 2 – 134, 3 – 268, 4 – 536

Таким образом, основной результат состоит в том, что с помощью математического моделирования установлено: доля наноструктур Ge(Si), в которых после попадания инициированных нейтронами каскадов атомных смещений образуются точечные радиационные дефекты, составляет  $\approx 3\%$  от их полного числа в решетке. В то же время более 94% всех радиационных точечных дефектов образуются в объеме *p*-, *n*-, *i*-областей диода и разделяющих слоев наноструктур Ge(Si) слоев кремния. Следовательно, сложные стабильные радиационные дефекты, уменьшающие концентрацию, подвижность и время жизни носителей также локализованы в этих областях *p-i-n*-диода, а большая часть наноструктур Ge(Si) остается свободной от радиационных дефектов. На основании этих результатов можно предположить, что причина экспериментально наблюдаемой в [101, 102] деградации спектров ФЛ и ЭЛ массивов наноструктур Ge(Si) состоит в обусловленном радиационными дефектами уменьшении концентрации достигающих наноструктур носителей заряда и соответствующем уменьшении интенсивности излучательной рекомбинации через их энергетические уровни.

#### 4.5 Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства гетероструктур с многослойным массивом самоформирующихся наностроек Ge(Si)/Si(001)

Обнаруженное экспериментально уменьшение интенсивности ФЛ и ЭЛ массивов самоформирующихся наностроек Ge(Si) и других гетероструктур может быть обусловлено увеличением скорости безызлучательной рекомбинации носителей заряда в окружающей наностройке материале в результате возникновения радиационных дефектов при облучении. Еще одной возможной причиной изменения параметров излучательной рекомбинации носителей заряда в гетероструктурах при облучении нейтронами может быть образование разупорядоченных областей (кластеров радиационных дефектов). РО можно рассматривать как включения с характерным размером порядка 10 нм, состоящие из РТД и их комплексов с атомами легирующих и фоновых примесей, устойчивых при температуре облучения [53, 54]. РО имеет внутреннюю структуру: вакансионное ядро, окруженное примесно-дефектной атмосферой. РО деформирует окружающую кристаллическую решетку, что вызывает изменения энергетического спектра носителей заряда [183]. РО может быть заряжена, и создавать в окружающей материале электрическое поле. Под действием этого поля также может изменяться энергетический спектр носителей заряда. Области действия этих полей в полупроводнике могут иметь протяженность от центра РО, равную нескольким ее радиусам. Известно [91–93], что свойства наноразмерных гетероструктур, в том числе и оптические обусловлены их зонной структурой (энергетическим спектром носителей), поэтому вносимые РО искажения будут влиять и на свойства расположенных вблизи них наностроек (КТ).

Для определенности в дальнейшем рассматриваются РО, возникающие при облучении гетероструктур быстрыми нейтронами. В разделе 4.5.1 приведены оценки концентрации наностроек Ge(Si) в гетероструктурах, описание которых приведено в литературе, и их соотношение с концентрацией РО, возникающих при имеющих место в экспериментах флюенсах нейтронов. В разделе 4.5.2 рассчитана амплитуда упругих деформаций кристаллической решетки, создаваемых РО, и проведено сравнение ее с деформациями вблизи наностроек Ge(Si). В разделе 4.5.3 рассчитан потенциал электрического поля РО и протяженность области влияния электрического поля вокруг нее. В разделе 4.5.4 проанализированы некоторые механизмы влияния РО на оптоэлектронные свойства наностроек Ge(Si).

#### 4.5.1 Зависимость от флюенса нейтронов

Среднюю концентрацию РО можно оценить в приближении однократного упругого рассеяния нейтрона на ядрах атомов в объеме полупроводниковой структуры по формуле  $N_{DR} = \sigma_d(E_n) \cdot N_{at} \cdot F_n$ , и предположив, что один каскад атомных смещений приводит к образованию одной стабильной РО. Для кремния  $\sigma_d(E_n)$  варьируется от 1 до 10 барн в интервале энергий  $E_n$  от 0,1 до 10 МэВ, среднее сечение составляет 2 барн. Среднее расстояние между РО можно вычислить по формуле:  $L_{DR} = (3/(4\pi \cdot N_{DR}))^{1/3}$ . На рисунке 4.7 приведены зависимости  $N_{DR}$  и  $L_{DR}$  от  $F_n$  для  $\sigma_d(E_n)$  равных 1, 2 и 10 барн. Дальнейшие расчеты проведены для среднего значения сечения  $\sigma_d(E_n) = 2$  барн.

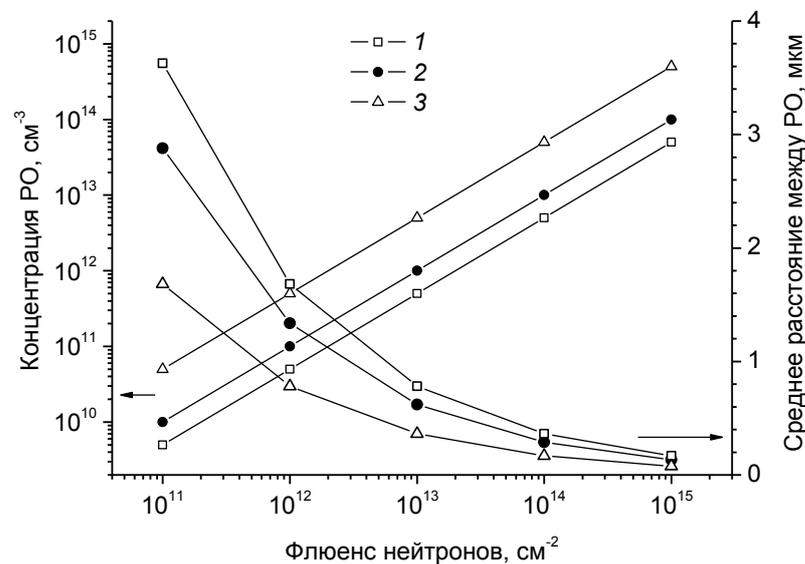


Рисунок 4.7 – Зависимости средней концентрации РО ( $N_{DR}$ ) и среднего расстояния ( $L_{DR}$ ) между ними от флюенса быстрых нейтронов для сечений их взаимодействия с ядрами атомов кремния, барн: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 10

Концентрация наносторок в многослойной гетероструктуре из их планарных массивов может быть оценена по формуле:

$$N_{is} = N_s \cdot n_l / d_h,$$

где

$N_s$  – поверхностная плотность наносторок;

$n_l$  – число слоев в гетероструктуре;

$d_h$  – толщина гетероструктуры с наностороками.

Среднее расстояние между наностороками  $L_{is} \approx (N_{is})^{1/3}$ . Результаты расчетов, выполненных для приборных гетероструктур из работ [102, 184], представлены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Параметры массивов наностроек приборных гетероструктур [102, 184]

$N_s, \text{см}^{-2}$	$n_1$	$d_h, \text{нм}$	$N_{is}, \text{см}^{-3}$	$L_{is}, \text{нм}$
$3 \cdot 10^{11}$	36	$1,1 \cdot 10^3$	$9,8 \cdot 10^{16}$	22
$10^{10}$	20	$6,4 \cdot 10^3$	$3,1 \cdot 10^{15}$	68
$10^9$	20	$6,4 \cdot 10^3$	$3,1 \cdot 10^{14}$	147

Из приведенных на рисунке 4.7 и в таблице 4.2 данных видно, что значения  $N_{DR}$  и  $N_{is}$  имеют один и тот же порядок ( $\approx 10^{15} \text{см}^{-3}$ ) лишь при максимальном флюенсе нейтронов ( $F_n \approx 10^{15} \text{см}^{-2}$ ). При таком флюенсе нейтронов  $L_{DR} \approx 0,1 \text{мкм}$ , с учетом радиуса РО (около 10 нм [108, 185]) в массивах наиболее крупных наностроек (высотой – до 12 нм, размером в плоскости основания – до 75 нм [102]), возможно прямое попадание РО в наностройки. Поскольку РО – устойчивый радиационный дефект, обладающий спектром уровней энергии в запрещенной зоне, это приведет к нарушению процессов генерации и рекомбинации носителей заряда в наностройках, сопровождающихся поглощением и испусканием фотонов, и исключению вклада этих наностроек в ФЛ и ЭЛ. При флюенсах нейтронов менее  $10^{15} \text{см}^{-2}$  вследствие значительно меньшей средней концентрации возникающих РО (при  $F_n = 10^{14} \text{см}^{-2}$   $N_{DR} = 10^{13} \text{см}^{-3}$ ) деградация оптоэлектронных свойств массивов наностроек ( $N_{is} \geq 10^{14} \text{см}^{-3}$ ) в результате прямого попадания РО в наностройки маловероятна. То же справедливо и для более плотных массивов наностроек высотой 1,5 нм и размером в плоскости основания 15 нм [184]. Среднее расстояние между ними в разы меньше, чем среднее расстояние между РО, поэтому даже при максимальном флюенсе нейтронов ( $10^{15} \text{см}^{-2}$ ) большая часть наностроек в гетероструктуре не будут повреждена образованием в них РО.

#### 4.5.2 Поле упругих напряжений разупорядоченной области

Упругие деформации, создаваемые в кристаллической решетке РО, можно оценить, используя следующую модель. Предположим, что РО представляет собой сферу радиусом  $R_1$  равным 10 нм [108, 185]. По оценкам [107] в момент окончания динамической стадии развития каскада атомных смещений, в результате которого возникает РО, давление ( $P_1$ ) в окружающей его кристаллической решетке достигает значения  $10^9 \text{Па}$ . Компоненты тензора деформаций от РО можно получить, используя решение задачи о распределении напряжений от полого шара, внутри которого действует давление  $P_1$ , а снаружи давление равно нулю [186]. В сферической системе координат, центр которой совпадает с центром РО, компоненты тензора деформации выражаются следующим образом:

$$\varepsilon_{rr} = -\frac{2b}{r^3}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{b}{r^3}$$

$$b = R_1^3 P_1 \frac{1 + \nu}{2E}$$

Подставляя в эти формулы значения упругих постоянных для кремния (коэффициент Пуассона  $\nu = 0,21$ , модуль Юнга  $E = 171,8$  ГПа [13]), получим, что величина  $\varepsilon_{rr}$  не превышает  $0,7 \cdot 10^{-2}$  вблизи поверхности РО. Зависимости компоненты деформации  $\varepsilon_{rr}$  от расстояния до центра РО для двух значений ее радиуса  $R_1$  представлены на рисунке 4.8а. Полученные значения деформации – оценка сверху, поскольку на стадии аккомодации РО к окружающей кристаллической решетке давление  $P_1$  внутри нее становится меньше принятого в расчетах значения.

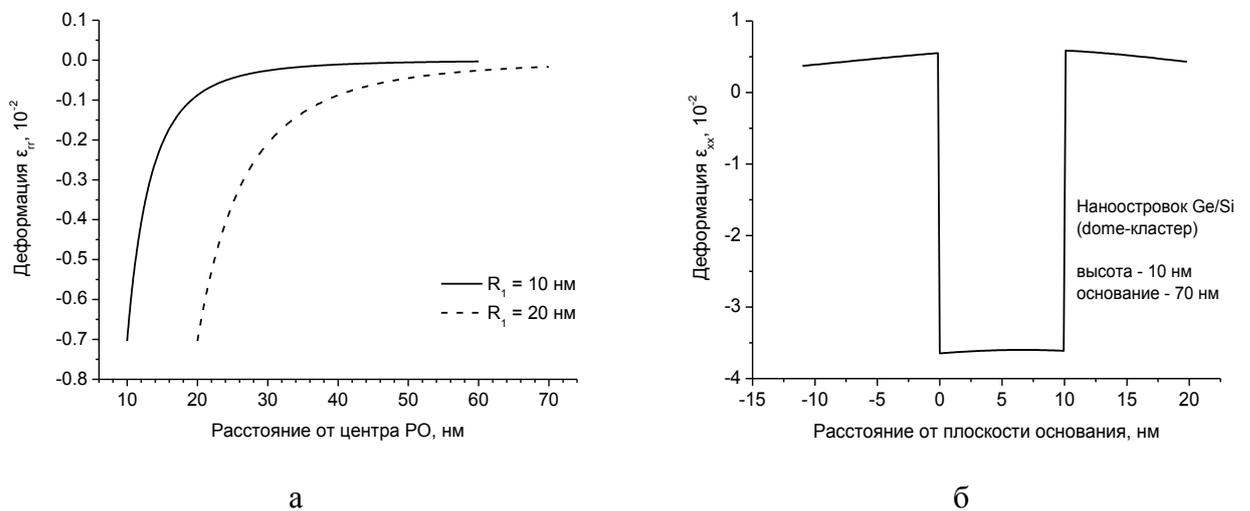


Рисунок 4.8 – Распределение деформации  $\varepsilon_{rr}$  вблизи РО (а) и компоненты  $\varepsilon_{xx}$  вблизи наноструктуры Ge(Si) (б)

Упругие деформации, возникающие вокруг наноструктуры, обусловлены рассогласованием постоянных кристаллических решеток материала, из которого они состоят, и материала, в объем которого они встроены. Для гетероструктур Ge(Si) это рассогласование равно  $(a_{Si} - a_{Ge})/a_{Si} = 4,2 \cdot 10^{-2}$ , где  $a_{Si}$ ,  $a_{Ge}$  – постоянные решеток кремния ( $a_{Si} = 0,357$  нм) и германия ( $a_{Ge} = 0,357$  нм) соответственно [2]. Пространственное распределение деформаций вокруг наноструктуры Ge(Si) (пирамида высотой 1,5 нм, длина основания 15 нм) рассчитано в работе [187]: характерная величина тензора деформаций составляет  $(0,5-1,0) \cdot 10^{-2}$  и уменьшается практически до нуля на расстоянии  $\geq 5$  нм от поверхности наноструктуры. Амплитуда деформаций, создаваемых наноструктурой Ge(Si) в форме усеченной пирамиды, аппроксимирующей dome-кластер высотой 10 нм и длиной стороны основания 70 нм [101, 102], была рассчитана в прямоугольных координатах по формулам из работы [188]. Амплитуда

деформаций составляет  $(2,5-6,5) \cdot 10^{-2}$ . Рассчитанное распределение компоненты деформации  $\varepsilon_{xx}$  такого наноструктура вдоль оси OZ (направление роста) представлено на рисунке 4.8б.

Из сравнения приведенных выше значений упругих деформаций от РО и наноструктура Ge(Si) следует, что деформации от РО на порядок меньше деформаций от наноструктура, поэтому деформации от РО не могут существенно повлиять на распределение деформаций от наноструктуров, и модифицировать их зонную структуру, определяющую оптические и электронные свойства.

### 4.5.3 Электрическое поле разупорядоченной области

Концентрация радиационных дефектов ( $N_2$ ) в ядре РО (ди- и тетравакансий, комплексов дефект – примесь и других) по оценкам может достигать  $10^{19}-10^{20} \text{ см}^{-3}$  [107, 108, 185]. На уровни энергии в запрещенной зоне этих дефектов захватываются носители заряда, РО заряжается, электрическое поле создает изгиб дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. Величина потенциального барьера в кремнии *n*-типа проводимости при комнатной температуре может достигать 0,24 эВ [185]. Следуя модели Госсика [108] можно получить выражение для потенциала электрического поля РО:

$$\varphi(r) = \frac{N_2 q}{6 \varepsilon \varepsilon_0} (3R_2^2 - r^2 - 2R_2^3/r), \quad (4.2)$$

где

$R_2$  – граница области пространственного заряда, окружающей РО;

$\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость кремния ( $\varepsilon = 12$ ).

$R_2$  определяется из уравнения (4.2) при  $\varphi(R_1) = \varphi_c$ . В собственном полупроводнике  $\varphi_c$  можно вычислить по формуле:

$$\varphi_c = E_g/2 - (E_v + 0,39),$$

где

$E_g$  – ширина запрещенной зоны кремния;

$E_v + 0,39$  – положение закрепленного в РО уровня Ферми в облученном собственном кремнии (за начало отсчета энергии принято положение потолка валентной зоны) [185].

Таким образом, при  $\varphi_c = 0,17$  эВ и  $R_1 = 10$  нм,  $R_2 = 150$  нм.

В современных гетероструктурах размеры наноструктуров Ge(Si) и толщины разделяющих их планарные массивы слоев составляют единицы и десятки нанометров, следовательно, электрическое поле одной РО может влиять на свойства нескольких наноструктуров, внутри сферической области радиусом  $R_2$ . Число таких наноструктуров в

активной области приборных гетероструктур можно оценить по формуле:  $n = 4\pi R_2^3 \cdot N_s \cdot n_1 / 3d_h$  (обозначения введены выше). Для фотодетектора с наиболее плотным массивом наностроек (таблица 4.2), описанного в работе [184],  $N_s = 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ,  $n_1 = 36$ ,  $d_h = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ , и  $n = 1350$  шт.

Как следует из рисунка 4.7 при флюенсе нейтронов  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ ,  $N_{DR} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ , среднее расстояние между РО  $L_{DR}$  составляет 300–400 нм. Таким образом, протяженность области пространственного заряда (ОПЗ) вокруг соседних РО  $2 \cdot R_2 \leq L_{DR}$ , поэтому при флюенсах нейтронов  $F_n \geq 10^{14} \text{ см}^{-2}$  будет происходить суперпозиция электрических полей от нескольких РО. Была вычислена доля наностроек от их полного числа в гетероструктуре, находящихся в ОПЗ РО:  $w = N_{DR}(F_n) \cdot n / N_{is} \cdot 100\%$ . Зависимость величины  $w$  от флюенса нейтронов представлена на рисунке 4.9. Область действия электрического поля РО ограничивалась сферой радиусом 100 нм (как будет показано ниже его влияние на зонную структуру наностроек наиболее существенно в пределах этого расстояния). Видно, что электрические поля множества РО оказывают влияние на 4% наностроек в многослойной гетероструктуре при флюенсе нейтронов  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ , доля наностроек возрастает до 40% при  $F_n = 10^{15} \text{ см}^{-2}$ .

Электрическое поле и рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах РО вызывает диффузионно-дрейфовое перераспределение носителей заряда в ОПЗ. В результате изменяются и абсолютная концентрация, и соотношение концентраций электронов и дырок вблизи наностроек, находящихся в ОПЗ РО. Изменения концентрации носителей заряда вблизи РО повлекут за собой изменения интенсивности оптических переходов в наностройках, попавших в их ОПЗ.

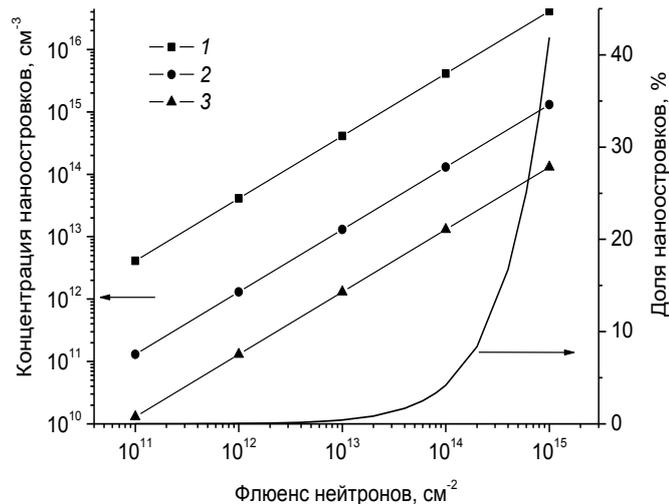


Рисунок 4.9 – Зависимости концентрации наностроек в многослойном массиве, находящихся в ОПЗ РО, от флюенса нейтронов. Расчет выполнен для различных поверхностных плотностей и числа слоев в гетероструктуре (таблица 4.2): 1 –  $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ , 36 слоев; 2 –  $10^{10} \text{ см}^{-2}$ , 20 слоев; 3 –  $10^9 \text{ см}^{-2}$ , 20 слоев

#### 4.5.4 Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства наностроек

Гетероструктуры Ge(Si)/Si(001) образуют гетеропереходы 2 типа [189]. Если размеры наностройка Ge(Si) малы [189], то в них проявляются эффекты размерного квантования энергии носителей заряда. Наностройка – потенциальная яма для дырок, поэтому спектр их энергии дискретен. Под действием упругих деформаций и кулоновского притяжения электронов дырками в наностройке дно зоны проводимости кремния вблизи него образует треугольную потенциальную яму для электронов. Глубина ямы в вертикально упорядоченном массиве КТ составляет 0,1 эВ [190]. Установлено, что поглощение и испускание фотонов наностройками Ge(Si), обладающими дискретным спектром носителей, определяется экситонами и экситонными комплексами. При фотогенерации электронно-дырочной пары дырка локализуется внутри наностройка, а электрон локализован в потенциальной яме в зоне проводимости вблизи него.

В [191] исследования межзонных оптических переходов в наностройках Ge(Si) в электрическом поле проведены методом токовой спектроскопии. При малых величинах электрического поля на спектрах наблюдается пик фототока симметричной формы, связанный с непрямым экситонным переходом между основным состоянием дырки в Ge и электрона в Si. С возрастанием величины электрического поля ширина пика фототока увеличивается и пик расщепляется на две составляющие. Полученные результаты объясняются тем, что дипольные моменты образовавшихся в наностройке экситонов противоположным образом ориентируются по отношению к направлению приложенного электрического поля. Для одного из диполей внешнее поле способствует увеличению перекрытия волновых функций электрона и дырки, росту энергии связи экситона, и смещению пика спектра фототока в область больших энергий оптических переходов. В диполе противоположного направления перекрытие волновых функций будет ослабляться, что приведет к уменьшению энергии связи и смещению пика в область меньших энергий. Напряженность электрического поля в образце в эксперименте [191] достигала 100 кВ/см.

По формуле (4.2) можно оценить напряженность электрического поля от РО:

$$E = -dU/dr \approx -(\varphi(r_a) - \varphi(r_b))/|r_a - r_b|,$$

где

$r_a, r_b$  – расстояния от центра РО до вершины и основания наностройка Ge(Si).

Используя приведенные выше значения параметров ( $|r_a - r_b| = h = 1,5$  нм,  $U = \varphi(r_a) - \varphi(r_b) \approx 0,006$  В,  $h$  – высота наностройка Ge(Si)), получим: напряженность электрического поля

на расстоянии 20 нм от центра РО составит 40 кВ/см. Однако, наноструктуры Ge(Si) окажутся на разных расстояниях от РО, электрическое поле которой будет иметь различную напряженность и в разной степени изменять их экситонный спектр. Поэтому экспериментально может наблюдаться лишь увеличение ширины спектральных пиков фототока или фотолюминесценции от наноструктур Ge(Si) облученных гетероструктур с РО.

В электрическом поле возможна также диссоциация экситонов, если энергия входящих в его состав носителей, превышает энергию связи экситона. Для наноструктур Ge(Si) энергия связи экситона, образованного находящимися в основном состоянии электрона и дырки составляет 38 мэВ [189]. Энергия, приобретаемая электроном и дыркой в поле РО, равна  $q \cdot U$ , где  $U$  – разность потенциалов на расстоянии, равном радиусу экситона. Учитывая пространственное распределение волновых функций носителей в наноструктуре Ge(Si) [189] в качестве радиуса экситона можно принять высоту наноструктура  $h$ . Используя вычисленное ранее значение разности потенциалов электрического поля РО между вершиной и основанием наноструктура,  $U = \varphi(r_a) - \varphi(r_b)$ , расположенной на расстоянии 20 нм от центра РО, получим, что энергия, приобретаемая электроном и дыркой экситона, составляет 6 мэВ. Таким образом, действие электрического поля РО не приводит к диссоциации экситонов вблизи наноструктура Ge(Si).

В наноструктурах Ge(Si) малых размеров проявляются свойства, характерные для квантовых точек. Положение уровней энергии основного состояния дырки ( $E_{111}$ ,  $E_{131}$ ,  $E_{133}$ ) в таких наноструктурах может быть оценено по модели «квантового ящика» с бесконечными стенками [192]. Эта модель обеспечивает хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными данными [192]. Наноструктура пирамидальной формы заменяется эффективным параллелепипедом с размерами  $h$  (высота пирамиды) и  $a$  (длина основания) соответственно в направлении роста и в плоскости роста. Тогда положение уровней энергии может быть вычислено по формуле:

$$E_{nmk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left( \frac{n^2}{h^2} + \frac{m^2}{a^2} + \frac{k^2}{a^2} \right), \quad (4.3)$$

где

$n, m, k = 1, 2, 3, \dots$  – квантовые числа;

$m^* = 0,3m_0$  – эффективная масса тяжелых дырок в Ge;

$m_0$  – масса свободного электрона.

Для расчета использовались следующие значения геометрических размеров наноструктура Ge(Si):  $a = 15$  нм,  $h = 1,5$  нм, глубина квантовой ямы в валентной зоне 0,75 эВ, высота барьера в зоне проводимости 0,4 эВ [193].

На рисунке 4.10 представлена зонная диаграмма кремния с наноструктурами Ge(Si) и РО для трех расстояний между их геометрическими центрами:  $L_1 \geq R_2$ ,  $L_2 = 20$  нм,  $L_3 = 40$  нм. За ноль отсчета энергии принято положение потолка валентной зоны в кремнии без РО. Положение зон рассчитывалось по формуле

$$E_{c(v)}(x) = E_{c(v)}^0 - e\varphi(x),$$

где

$E_{c(v)}^0$  – положение зоны проводимости (валентной) кремния;

$\varphi(x)$  – потенциал электрического поля РО (вычислен по формуле (4.2)).

При  $L_1$  влияние электрического поля на наноструктуру пренебрежимо мало. При  $L_2$  и  $L_3$  сдвиг уровней энергии основного состояния дырок в наноструктуре равен сдвигу дна квантовой ямы. Поэтому уровни энергии  $E_{111}$ ,  $E_{131}$ ,  $E_{133}$  при  $L_2$  и  $L_3$  смещаются относительно своего положения при  $L_1$  на ту же величину, что и дно «квантового ящика». На рисунке 4.10 показаны также уровни энергии дивакансий ( $V_2$ ) – основного дефекта в ядре РО [194, 195].

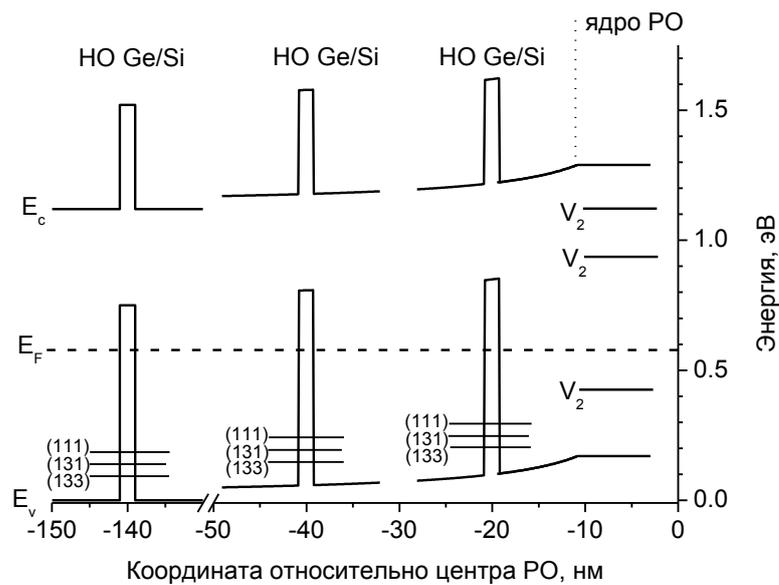


Рисунок 4.10 – Зонная диаграмма кремния с наноструктурой (НО) Ge(Si) и РО при расстояниях 20, 40, 140 нм между их центрами.  $E_{111}$ ,  $E_{131}$ ,  $E_{133}$  – энергии основного состояния дырок в квантовой яме НО,  $V_2$  – уровни дивакансий ( $E_c - 0,23$ ,  $E_c - 0,39$ ,  $E_v + 0,19$  эВ),  $E_F$  – уровень Ферми

Наноструктуры большего, чем в работах [189, 192] размера, представляют собой одномерную квантовую яму для дырок. Ширина этой квантовой ямы равна высоте наноструктуры. Энергию уровней размерного квантования для таких наноструктур можно вычислить, используя модель симметричной квантовой ямы с конечной высотой стенок [196]:

$E_n = k^2 \hbar^2 / (2m^*)$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $k$  зависит от  $n$ , и определяется из решения трансцендентного уравнения. Глубина ямы зависит от соотношения количества атомов германия и кремния в материале наностровка ( $x$ ) [193]:  $\Delta E_v = 0,54 \cdot x$ . При  $x$  равном 0,5,  $\Delta E_v$  равно 0,27 эВ. При  $h = 3$  нм,  $E_1 = 0,19$  эВ от потолка валентной зоны кремния. При  $h = 10$  нм,  $E_1 = 0,26$  эВ,  $E_2 = 0,22$  эВ, уровни с бóльшими значениями  $n$  также разделены энергетическим интервалом порядка  $k_B T$ .

Радиационные дефекты в РО неоднородно распределены вокруг ее центра [108, 185]. Поэтому возможны такие пространственные конфигурации дефектов и наностровка, при которых расстояние между ними будет меньше 10 нм, и будет возможно туннелирование носителей с уровня размерного квантования на уровни радиационных дефектов с последующей их безызлучательной рекомбинацией. Рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах разупорядоченных областей приведет также к возникновению диффузионного потока носителей к РО. Часть этих носителей может попадать в наностровки, находящиеся вблизи РО, и рекомбинировать в них с испусканием фотонов. Возможно, этим объясняется возрастание интенсивности люминесценции от наностроек при малых флюенсах воздействующих на гетероструктуры корпускулярных излучений [100, 103]. При возрастании флюенса излучений и накоплении радиационных дефектов в объеме гетероструктур рекомбинация носителей через их уровни в запрещенной зоне становится доминирующим механизмом удаления носителей.

Сделанные оценки согласуются с результатами экспериментальных исследований по облучению гетероструктур с наностройками Ge(Si) [101, 102]. В этих работах установлено, что интенсивность сигнала ФЛ и ЭЛ гетероструктур с наностройками сохраняется даже при воздействии нейтронов с флюенсом  $10^{15} \text{ см}^{-2}$ , поскольку сохраняется некоторая доля наностроек (согласно приведенным выше оценкам до 40%) без радиационных дефектов в объеме и с неискаженной электрическим полем РО спектром энергии носителей заряда.

#### 4.6 Выводы

1. Результаты моделирования показали, что попавшие в объем наностровка Ge(Si)/Si(001) каскады атомных смещений, инициируемые в объеме гетероструктуры атомами отдачи кремния с энергией 67–268 кэВ, не вызывают существенного каскадного перемешивания на гетерогранице наностроек/спейсерный слой.

2. Доля наностроек Ge(Si)/Si(001) с радиационными точечными дефектами составляет около 3% от их полного числа в массиве при плотностях каскадов атомных смещений, соответствующих флюенсам нейтронов с энергией 1 МэВ  $10^{14}$ – $10^{15} \text{ см}^{-2}$  (уровни воздействия, имевшие место в экспериментах [101, 102]).

3. Средняя концентрация разупорядоченных областей, возникающих в кремниевых гетероструктурах при облучении быстрыми нейтронами с флюенсом  $10^{13}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup>, более чем на порядок величины меньше, чем концентрация наностроек в экспериментально полученных гетероструктурах Ge(Si)/Si(001). Поэтому возникновение разупорядоченных областей в объеме наностроек, приводящее к деградации их оптоэлектронных свойств, маловероятно.

4. Упругие деформации кристаллической решетки, вызванные образованием РО ( $\sim 0,7 \cdot 10^{-2}$ ), из-за малой величины не влияют на деформации вокруг наностроек Ge(Si) ( $\sim 4,2 \cdot 10^{-2}$ ) и, как следствие, определяемые ими оптоэлектронные свойства (спектр энергии носителей заряда и др.).

5. Концентрация возникших в каскадах атомных смещений РО при флюенсах нейтронов  $10^{11}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup> составляет  $10^{10}$ – $10^{14}$  см<sup>-3</sup> соответственно. Электрические поля множества РО оказывают влияние на 4% наностроек Ge(Si)/Si(001) (от их полного числа в многослойной гетероструктуре) при флюенсе нейтронов  $10^{14}$  см<sup>-2</sup>, доля наностроек возрастает до 40% при возрастании флюенса до  $10^{15}$  см<sup>-2</sup>.

6. Электрическое поле РО изменяет положение дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в гетероструктурах с наностройками Ge(Si)/Si(001). Вместе с уровнями разрешенных зон на величину разности потенциалов между РО и невозмущенным кристаллом (0,17–0,24 эВ) смещаются и уровни размерного квантования энергии наностроек, расположенных в радиусе 100–150 нм от РО. Это приведет к изменению энергии оптических переходов в наностройках вблизи РО на величину 0,17–0,24 эВ.

7. При образовании РО в запрещенной зоне кремния возникает спектр уровней радиационных дефектов (дивакансий, комплексов точечный дефект – атомы примесей). Их положение таково, что возможен обмен носителями заряда посредством туннелирования между уровнями дефектов и разрешенными зонами энергии (или уровнями размерного квантования) наностроек Ge(Si)/Si(001), находящихся в радиусе около 10 нм от РО. Этот процесс может сопровождаться безызлучательной рекомбинацией носителей заряда через уровни радиационных дефектов и деградацией оптоэлектронных свойств гетероструктур.

8. Электрическое поле РО создает в зоне проводимости барьер для электронов и «яму» для дырок в валентной зоне, и, как следствие, области обеднения электронами и обогащения дырками. Поэтому вблизи наностроек, находящихся в радиусе 100–150 нм от РО, изменяется концентрация носителей заряда в зонах и эффективность их захвата в наностройки. Электрическое поле и рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах РО вызывает диффузионно-дрейфовое перераспределение носителей заряда в ОПЗ РО. В результате изменяются и абсолютная концентрация, и соотношение концентраций электронов и дырок

вблизи наностроек Ge(Si), находящихся в ОПЗ РО. Изменения концентрации носителей заряда вблизи РО повлекут за собой изменения интенсивности оптических переходов в наностройках, попавших в их ОПЗ.

9. При облучении гетероструктур с наностройками Ge(Si)/Si(001) нейтронами в качестве основной причины деградации их оптоэлектронных свойств должна рассматриваться безызлучательная рекомбинация носителей заряда через уровни радиационных дефектов в запрещенной зоне спейсерных и других объемных слоев.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Предложена модель переходного слоя кремний/сапфир гетероструктур «кремний на сапфире». На основе имеющихся в литературе экспериментальных данных было предположено, что переходный слой толщиной 50–100 нм может состоять из муллита ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , плотность –  $3,03 \text{ г/см}^3$ ), аморфного кремния (плотность –  $2,0 \text{ г/см}^3$ ), или из кристаллического кремния с высокой концентрацией ростовых дефектов кристаллической структуры. Таким образом, плотность, химический состав, пороговая энергия смещения атомов из узлов кристаллической решетки и среднее значения пробега внедряемых в КНС ускоренных ионов между столкновениями с атомами кремния будут зависеть от расстояния до границы раздела кремний/сапфир. Моделированием методом Монте-Карло исследовано влияние неоднородности этих физических свойств приборного слоя на параметры профилей пространственного распределения имплантируемых ионов бора, фосфора, кислорода, кремния и возникающих при этом радиационных дефектов. Установлено, что переходный слой с отличающейся от объемного кремния плотностью и химическим составом влияет на процессы, сопровождающие внедрение ионов, если их пробеги достигают границы кремний/переходный слой. Влияние проявляется в перераспределении внедряемых ионов и радиационных дефектов между кремнием, переходным слоем и сапфиром. Ростовые дефекты кристаллической структуры приборного слоя КНС слабо (в рамках предложенной модели) влияют на пробеги ускоренных ионов, однако, концентрация радиационных дефектов будет значительно (десятки процентов) больше, из-за наличия слабо связанных атомов вблизи них.

2. Предложена модель диффузионных процессов легирующих примесей в гетероструктурах «кремний на сапфире», учитывающая ростовые дефекты кристаллической структуры и упругие напряжения в приборном слое. Рассчитаны профили пространственного распределения имплантированных в КНС легирующих примесей бора и фосфора. Установлено, что упругие напряжения и ростовые дефекты в КНС обуславливают более эффективное перераспределение легирующих примесей в процессе отжига по сравнению с недеформированным совершенным кремнием: отличия концентрации бора на одном и том же расстоянии от поверхности приборного слоя может достигать 1,4 раза, фосфора – более 1,5 раз.

3. Выполнено комплексное исследование методом математического моделирования по предложенным моделям влияния режимов технологических операций формирования МОП/КНС транзисторов на деградацию их параметров при воздействии стационарного ионизирующего излучения. Показано, что зарегистрированное экспериментально превышение допустимой величины статического тока потребления КМОП/КНС БИС, характеризующее их

токи утечки, после облучения обусловлено режимом технологических операций формирования «*p*-карманов» *n*-канальных МОП/КНС транзисторов. Наибольшее влияние оказывает выбор начальной энергии имплантации ионов бора при ионно-лучевом легировании области вблизи границы раздела кремний/сапфир: в гетероструктурах КНС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм начальная энергия должна быть не более 80 кэВ. Образование канала утечки сток – исток *n*-канальных МОП/КНС транзисторов происходит в результате обеднения основными носителями заряда (дырками) или инверсии типа проводимости кремния вблизи границы раздела кремний/сапфир. Этот эффект обусловлен образованием значительной концентрации радиационных дефектов в сапфире, как предполагается пропорциональной концентрации ионов бора, внедренных в сапфир при глубоком легировании «*p*-кармана». Радиационные дефекты в сапфире заряжаются (преимущественно положительно) при воздействии ионизирующего излучения. При глубоком легировании «*p*-кармана» бором с начальной энергией 100 и 120 кэВ величина образующегося в сапфире заряда и уровень легирования «*p*-кармана» достаточны для инверсии типа проводимости кремния вблизи границы раздела кремний/сапфир и формирования канала утечки между стоком и истоком транзисторов. Полученные результаты позволили оптимизировать режим ионно-лучевого легирования в технологическом процессе изготовления КМОП/КНС БИС с толщиной приборного слоя 0,3 мкм и топологическим нормами проектирования 3 мкм в филиале ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю.Е. Седякова» (до 29.12.2017 ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седякова»). Корректность сделанных выводов была подтверждена технологическими экспериментами, показавшими, что процент выхода годных микросхем по параметру «статический ток потребления» повысился в 5–6 раз, а абсолютная величина их статического тока потребления снизилась на два порядка, и не превышает допустимых пределов даже после облучения микросхем низкоинтенсивным стационарным ионизирующим излучением в процессе радиационной отбраковки.

4. Исследованы радиационные эффекты в гетероструктурах с самоформирующимися nanoостровками Ge(Si)/Si(001) при облучении быстрыми нейтронами. Рассмотрены процессы образования точечных радиационных дефектов и разупорядоченных областей (трехмерных кластеров радиационных дефектов). Эти процессы могут быть вызваны также облучением гетероструктур протонами, ионами, электронами. По результатам математического моделирования оценено количество nanoостровков Ge(Si)/Si(001), в которых образуются точечные радиационные дефекты. Установлено, что их доля составляет около 3% от их полного числа в массиве при плотностях каскадов атомных смещений, соответствующих флюенсам  $10^{14}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup> нейтронов с энергией 1 МэВ. Сопоставление результатов аналитической оценки средней концентрации возникающих при облучении гетероструктур с nanoостровками Ge(Si)/Si(001) быстрыми нейтронами разупорядоченных областей (при флюенсах нейтронов

$10^{11}$ – $10^{15}$  см<sup>-2</sup> она составляет  $10^{10}$ – $10^{14}$  см<sup>-3</sup>) с концентрацией наностроек в уже изготовленных гетероструктурах ( $\sim 10^{15}$  см<sup>-2</sup>) показало, что возникновение разупорядоченных областей в объеме наностроек, приводящее к деградации их оптоэлектронных свойств, маловероятно. Исследовано влияние полей упругих и электрических напряжений разупорядоченных областей на изменение физических свойств наностроек, определяющих поглощение и испускание ими оптического излучения. Упругие деформации кристаллической решетки, вызванные образованием разупорядоченной области ( $\sim 0,7 \cdot 10^{-2}$ ), из-за малой величины не влияют на деформации вокруг наностроек Ge(Si) ( $\sim 4 \cdot 10^{-2}$ ) и, как следствие, определяемые ими физические свойства (спектр носителей заряда и др.). Электрические поля множества разупорядоченных областей оказывают влияние на 4% наностроек Ge(Si)/Si(001) от их полного числа в многослойной гетероструктуре при флюенсе нейтронов  $10^{14}$  см<sup>-2</sup>, доля наностроек возрастает до 40% при возрастании флюенса до  $10^{15}$  см<sup>-2</sup>. Таким образом, существенно уточнены и детализированы оценки, сделанные при анализе результатов экспериментальных работ. Сделан вывод о том, что при облучении гетероструктур с наностройками Ge(Si)/Si(001) нейтронами в качестве основной причины деградации их оптоэлектронных свойств должна рассматриваться безызлучательная рекомбинация носителей заряда через уровни радиационных дефектов в запрещенной зоне спейсерных и других объемных слоев.

Перспективы дальнейшей разработки темы диссертации состоят в следующем:

1. Переходный слой между кремнием и сапфиром будет существовать даже после твердофазной рекристаллизации приборного слоя гетероструктур КНС, поскольку сопрягаемые материалы отличаются параметрами кристаллических решеток, коэффициентом линейного термического расширения, значениями упругих постоянных. Поэтому для создания отечественного аналога технологии КНС с «ультратонким» приборным слоем потребуются исследование параметров переходного слоя рекристаллизованных гетероструктур КНС, его влияние на протекание технологических процессов, электрические характеристики микросхем и их радиационную стойкость. Для выбора оптимальных режимов технологических обработок целесообразно установление соотношений, связывающих необходимую дозу аморфизирующих ионов, температуру и длительность рекристаллизационного отжига и поддающихся экспериментальному измерению параметров примесно-дефектного состава исходных гетероструктур КНС.

2. Исследование методом математического моделирования диффузии точечных радиационных дефектов с учетом кинетики их рекомбинации и образования устойчивых комплексов в многослойных массивах наностроек Ge(Si)/Si(001). В качестве начальных распределений точечных радиационных дефектов целесообразно использовать результаты

расчета по программе TRISQD, полученные в диссертации. Уравнения диффузии междоузельных атомов и вакансий должны включать слагаемые, описывающие дрейф этих дефектов в поле упругих напряжений, действующих в многослойном массиве наностроек Ge(Si). Для расчета полей упругих напряжений целесообразно использовать результаты расчета этих полей, полученные в диссертации.

3. Исследование методом математического моделирования диффузии и дрейфа носителей заряда вблизи наностроек Ge(Si) в электрическом поле разупорядоченной области. В диффузионно-дрейфовых уравнениях должны быть учтены процессы генерации носителей заряда в наностройках, их рекомбинация с испусканием фотонов, безызлучательная рекомбинация через уровни энергии радиационных дефектов в запрещенной зоне.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валиев, К.А. Кремниевая наноэлектроника: проблемы и перспективы / К.А. Валиев, В.В. Вьюрков, А.А. Орликовский // Успехи современной радиоэлектроники. – 2010. – №6. – С. 7–22.
2. Мильвидский, М.Г. Полупроводниковый кремний на пороге XXI века / М.Г. Мильвидский // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2000. – №1. – С.4–14.
3. Папков, В.С. Эпитаксиальные кремниевые слои на диэлектрических подложках и приборы на их основе / В.С. Папков, М.Б. Цыбульников. – Москва: Энергия, 1979. – 88 с.
4. Christoloveanu, S. Silicon films on sapphire / S. Christoloveanu // Report of Progress Physics. – 1987. – V. 50. – P. 327–370.
5. Козлов, Ю.Ф. Структуры кремния на сапфире: технология, свойства, методы контроля, применение / Ю.Ф. Козлов, В.В. Зотов. – Москва: МИЭТ, 2004. – 140 с.
6. Юдинцев, В.А. Интегральные схемы на диэлектрических подложках / В.А. Юдинцев // Зарубежная электронная техника. – 1975. – В. 23 (119). – С. 3–44.
7. Баранов, Ю.А. Состояние и перспективы использования КНС-технологии / Ю.А. Баранов // Зарубежная электронная техника. – 1989. – В. 11 (342). – С. 19–33.
8. Адонин, А.С. Новые возможности технологии БИС со структурой «кремний на сапфире» / А.С. Адонин // Электронные компоненты. – 2000. – №3. – С. 45–49.
9. Официальный сайт компании Honeywell Solid States Electronic Center [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ssec.honeywell.com>.
10. Nefyene, N. Adaptation of the pseudo-MOS transistor for the characterization of silicon-on-sapphire films / N. Nefyene, S. Cristoloveanu, G. Ghibaudo, P. Gentil // Solid-State Electronics. – 2000. – V. 44. – P. 1711–1715.
11. Стучебников, В.М. Структуры «кремний на сапфире» как материал для тензопреобразователей механических величин / В.М. Стучебников // Радиотехника и электроника. – 2005. – Т. 50. – №6. – С.678–696.
12. Сметанов, А.Ю. НПП «Сапфир» – на взлете / А.Ю. Сметанов, Ю.Р. Носов // Электроника: наука, технология, бизнес. – 2006. – №5. – С.4–10.
13. Францевич, И.Н. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник / И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута. – Киев: Наукова Думка, 1982. – 286 с.
14. Abrahams, M.S. Misfit dislocations in heteroepitaxial silicon on sapphire / M.S. Abrahams, C.J. Buicchi, J.F. Corboy, G.W. Cullen // Applied Physics Letters. – 1969. – V. 21. – №5. – P. 275.

15. Abrahams, M.S. Cross-sectional electron microscopy of silicone on sapphire / M.S. Abrahams, C.J. Buiocchi // *Applied Physics Letters*. – 1975. – V. 27. – №6. – P. 325–327.
16. Ponce, F.A. Imaging of the silicone on sapphire interface by high-resolution transmission electron microscopy / F.A. Ponce, J. Aranovich // *Applied Physics Letters*. – 1981. – V. 38. – №6. – P. 439–441.
17. Gartstein, E. Interfacial microstructure in Si-on-sapphire heterostructure / E. Gartstein, D. Mogilyanski, N. Frumin // *Journal of Crystal Growth*. – 1999. – V. 205. – P. 64–70.
18. Gartstein, E. On the interface strain distribution in Si-on-sapphire system / E. Gartstein, S. Lach, D. Mogilyanski, H. Metzger, J. Peisl // *Physica B*. – 1998. – V. 248. – P. 79–82.
19. Стучебников, В.М. Электрофизические характеристики КНС-структур / В.М. Стучебников, В.С. Папков // *Электронная промышленность*. – 1980. – В.8(92)-9(93). – С. 71–76.
20. McLeod, D. The electrical characterization of whole wafer silicone on sapphire for process control / D. McLeod, J.A. Shields, D.A. Shields, J.E.A. Maurits, D.H. Forbes // *Journal Vacuum Society Technology*. – 1989. – A7(3). – P. 1322–1328.
21. Troxell, J.R. Recombination-enhanced migration of interstitial aluminum in silicone / J.R. Troxell, A.P. Chatterjee, G.D. Watkins, L.C. Kimerling // *Physical Review B*. – 1979. – V. 19. – №10. – P. 5336–5348.
22. Schirra, P. Complexes, clustering and native-defect-assisted diffusion of aluminum in silicone / P. Schirra, G.M. Lopez, V. Fiorentini // *Physical Revue B*. – 2004. – V. 70. – P. 245201.
23. Гастев, В.В. Влияние высокотемпературных обработок на состояние границы раздела кремний-сапфир структур кремний на сапфире / В.В. Гастев, О.Г. Сухоруков, А.П. Лоцман // *Электронная техника. Сер. Микроэлектроника*. – 1985. – В.1(113). – С. 95–99.
24. Перевощиков, В.А. Геттерирование примесей и дефектов в полупроводниках / В.А. Перевощиков, В.Д. Скупов. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского университета, 2002. – 220 с.
25. Рейви, К. Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии / К. Рейви. – Москва: Мир, 1984. – 475 с.
26. Гастев, В.В. Особенности переходного слоя эпитаксиальный кремний-сапфир / В.В. Гастев, О.Г. Сухоруков, Б.В. Стрижков // *Электронная техника. Сер. Материалы*. – 1988. – В. 4(233). – С. 28–31.
27. Kuhl, Ch. An optically effective intermediate layer between epitaxial silicone and spinel or sapphire / Ch. Kuhl, H. Schlotterer, F. Schwidefsky // *Journal of Electrochemical Society*. – 1976. – V. 123. – №1. – P. 97–100.

28. Lagowski, J. Optical probing of silicon-sapphire interface of heteroepitaxial SOS films / J. Lagowski, L. Jastrzebski, G.W. Cullen // *Journal of Electrochemical Society*. – 1983. – V. 130. – №8. – P. 1744–1748.
29. Krusius, P. Interface polarization in silicone on sapphire / P. Krusius, C. Dube, J. Frey // *Applied Physics Letters*. – 1981. – V. 38. – №7. – P. 547–549.
30. Латышева, Н.Д. Новые возможности эллипсометрии в технологии производства полупроводниковых приборов / Н.Д. Латышева, А.Ю. Малков, Д.А. Николаев, В.Д. Скупов, В.К. Смолин // *Конверсия в машиностроении*. – 2004. – №4(65). – С. 51–56.
31. Тихомиров, Г.В. Контроль электрофизических параметров субмикронных слоев кремния на сапфире / Г.В. Тихомиров, А.П. Коровин, Н.В. Короткова, Л.Н. Михайлов, М.Н. Титов // *Электронная техника. Сер. Полупроводниковые приборы*. – 1984. – В. 6(172). – С. 37–45.
32. Латышева, Н.Д. Влияние ультразвуковой обработки на параметры приборных слоев структур «кремний на сапфире» / Н.Д. Латышева, В.Д. Скупов, В.К. Смолин // *Новые промышленные технологии*. – 2001. – В. 2–3 (301–302). – С. 3–6.
33. Козлов, Ю.Ф. Структуры КНС со сверхтонкими приборными слоями. Особенности технологии / Ю.Ф. Козлов, В.В. Зотов, Н.М. Зудков и др. // *Электронная промышленность. Наука. Технологии. Изделия*. – 2003. – №3. – С. 52–55.
34. Чумак, В.Д. Оценка качества структур кремния на сапфире / В.Д. Чумак // *Электронная промышленность. Наука. Технологии. Изделия*. – 2003. – №3. – С. 130–134.
35. Петуров, Н.И. Исследование электрофизических параметров структур КНС с толщиной гетероэпитаксиального слоя кремния 0,3 мкм / Н.И. Петуров, Ю.А. Кабальнов, Д.С. Николаев, В.Д. Чумак // *Конверсия в машиностроении*. – 2004. – №4(65). – С. 34–39.
36. Петров, А.Г. Исследования неоднородности токовых характеристик отклика ячеек памяти в составе КМОП КНС БИС ПЗУ 512К при импульсном ионизирующем воздействии / А.Г. Петров. – Тез. докл. Российской научной конференции «Радиационная стойкость электронных систем – Стойкость-2006», НИИ Приборов, Лыткарино, 6-8 июня 2006 г. – Москва: МИФИ, 2006. – С. 79–80.
37. Давыдов, Г.Г. Методика оперативного неразрушающего контроля дозовой стойкости КМОП БИС на КНС-структурах / Г.Г. Давыдов, А.В. Согоян, А.Ю. Никифоров и др. // *Микроэлектроника*. – 2008. – Т. 37. – №1. – С. 67–77.
38. Бородовский, П.А. Контроль качества структур КНС СВЧ методом / П.А. Бородовский, А.Ф. Булдыгин, Н.И. Петуров и др. // *Микроэлектроника*. – 2008. – Т. 37. – №2. – С. 101–110.
39. Яшанин, И.Б. Влияние параметров исходных КНС-структур на дозовую деградацию микросхем / И.Б. Яшанин, А.В. Скобелев, О.В. Распопина и др. // *Вопросы атомной науки и*

- техники. Сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. – 2009. – В. 4. – С. 29–32.
40. Сидоров, А.И. Исследование границы раздела кремний-сапфир структур КНС по измерению проводимости четырехзондовым методом с поперечным высоковольтным полем / А.И. Сидоров, Л.А. Сальников, Ю.Ф. Козлов и др. // Электронная техника. Сер. Материалы. – 1985. – В. 5(204). – С. 20–23.
41. Айвазов, А.А. Неупорядоченные полупроводники / А.А. Айвазов, Б.Г. Будагян, С.Р. Вихров, А.И. Попов – Москва: МЭИ, 1995. – 352 с.
42. Никифоров, А.Ю. Радиационные эффекты в КМОП ИС / А.Ю. Никифоров, В.А. Телец, А.И. Чумаков. – Москва: Радио и связь, 1994. – 164 с.
43. Зуев, В.А. Дефекты структуры в гетероэпитаксиальных пленках кремния на сапфире, облученных высокоэнергетическими частицами / В.А. Зуев, Т.П. Ларионова, Н.С. Минаев и др. // Электронная техника. Сер. Материалы. – 1988. – В. 4 (233). – С. 32–36.
44. Скупов, В.Д. Активация релаксационных процессов в структурах «кремний на сапфире» воздействием излучений «допороговых» энергий / В.Д. Скупов // Электронная промышленность. Технологии. Оборудование. Материалы. – 2003. – №4. – С. 66–69.
45. Киселев, А.Н. Применение метода атомно-силовой микроскопии для исследования полупроводников после радиационных воздействий / А.Н. Киселев, Г.А. Максимов, В.А. Перевощиков и др. // Микроэлектроника. – 2002. – Т. 32. – №4. – С. 223–227.
46. Киселев, А.Н. Различия в изменениях параметров компонентов структур «кремний на сапфире» после рентгеновского облучения со стороны эпитаксиального слоя и подложки / А.Н. Киселев, В.А. Перевощиков, В.Д. Скупов, Д.О. Филатов // Письма в журнал технической физики. – 2003. – Т. 29. – №23. – С. 8–12.
47. Obolenskii, S.V. Long-Range Action Effect in Irradiation of Semiconductor Structures with Internal Interfaces / S.V. Obolenskii, V.D. Skupov // Surface Investigation. – 2001. – V. 16. – P. 833–840.
48. Козырь, И.Я. Общая технология / И.Я. Козырь, Ю.И. Горбунов, Ю.С. Чернозубов, А.С. Пономарев. – Москва: Высшая школа, 1989. – 223 с.
49. Аваев, Н.А. Основы микроэлектроники / Н.А. Аваев, Ю.Е. Наумов, В.Т. Фролкин. – Москва: Радио и связь, 1991. – 288 с.
50. Зорин, Е.И. Ионное легирование полупроводников / Е.И. Зорин, П.В. Павлов, Д.И. Тетельбаум. – Москва: Энергия, 1975. – 73 с.
51. Риссел, Х. Ионная имплантация / Х. Риссел, И. Руге. – Москва: Наука, 1983. – 360 с.
52. Вопросы радиационной технологии полупроводников. Под ред. Л.С. Смирнова. – Новосибирск: Наука, 1980. – 294 с.

53. Физические процессы в облученных полупроводниках. Под ред. Л.С. Смирнова. – Новосибирск: Наука, 1977. – 255 с.
54. Винецкий, В.Л. Радиационная физика полупроводников / В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь. – Киев: Наукова Думка, 1979. – 336 с.
55. Троицкий, О.А. Радиация и прочность твердых тел / О.А. Троицкий. – Ташкент: Узбекистан, 1973. – 116 с.
56. Ларин, Р.Г. Зависимость радиационного повреждения кремния от плотности дислокаций / Р.Г. Ларин, Н.И. Маслов, И.М. Неклюдов // Вопросы атомной науки и техники. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1987. – №2(40). – С. 63.
57. Казакевич, Л.А. Взаимодействие точечных дефектов в дислокационном кремнии / Л.А. Казакевич, П.Ф. Лугаков // Физика и техника полупроводников. – 1983. – Т. 17. – №8. – С. 1517–1519.
58. Вавилов В.С. Дефекты в кремнии и на его поверхности / В.С. Вавилов, В.Ф. Киселев, Б.Н. Мукашев. – Москва: Наука, 1990. – 216 с.
59. Романов, С.И. О взаимодействии точечных дефектов с границей раздела  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  / С.И. Романов, Л.С. Смирнов // Физика и техника полупроводников. – 1976. – Т. 10. – №5. – С. 876–881.
60. Аброян, И.А. Физические основы электронной и ионной технологии / И.А. Аброян, А.Н. Андронов, А.И. Титов. – Москва: Высшая школа, 1984. – 320 с.
61. Rudolf, F. The diffusion coefficient of boron in epitaxial silicon layers / F. Rudolf, C. Jaccard // Thin Solid Films. – 1979. – V. 59. – P. 385–391.
62. Dowsett, M.G. Quantification of dopant implants in oxidized silicon on sapphire using secondary ion mass spectrometry / M.G. Dowsett, E.H.C. Parker, R.M. King, P.J. Mole // Journal of Applied Physics. – 1983. – V. 54. – №11. – P. 6340–6345.
63. Pawlik, M. Dopant profiling in silicone on sapphire using spreading resistance / M. Pawlik, R.D. Groves // Applied Physics Letters. – 1984. – V. 44. – №5. – P. 542–544.
64. Lin, A.L. Channel doping profile of silicon-on-sapphire transistor / A.L. Lin, R.L. Maddox, J.E. Mee // Journal of Applied Physics. – 1985. – V. 57. – №6. – P. 2091–2098.
65. Cowern, N.E.B. Dopant redistribution in silicon-on-sapphire films during thermal annealing / N.E.B. Cowern, K.J. Yallup, D.J. Godfrey // Applied Physics Letters. – 1986. – V. 48. – №11. – P. 704–706.
66. Rios, R. Modeling of effect of interfacial charge on impurity diffusion in silicon-on-sapphire device processing / R. Rios, A. Rothwarf, C.W. Magee, S.M. Tyson // IEEE Transaction on Electronic Devices. – 1986. – ED-33. – №9. – P. 1270–1277.

67. Amberiadis, K. Comparison of phosphorus, arsenic and boron implants into bulk silicon and SOS / K. Amberiadis, M.R. Kump, C.W. Magee // *Solid-State Electronics*. – 1990. – V. 33. – №6. – P. 651–654.
68. Maldonado, C.D. Thermal redistribution of impurities in silicon-on-sapphire: theoretical development / C.D. Maldonado, G. Mandel, G. Kinoshita // *Journal of Applied Physics*. – 1976. – V. 47. – №6. – P. 2269–2276.
69. Maldonado, C.D. Nonlinear thermal redistribution of boron impurities in SOS device structures / C.D. Maldonado, W.D. Murphy // *Journal of Applied Physics*. – 1978. – V. 49. – №9. – P. 4812–4819.
70. Grivitskas, V. Picoseconds photoconductivity measurements of mobility and lifetime in silicon-on-sapphire films / V. Grivitskas, M. Willander, J.A. Tellefsen // *Journal of Applied Physics*. – 1984. – V. 55. – №8. – P. 3169–3172.
71. Cooke, D.G. Transient terahertz conductivity in photoexcited silicon nanocrystal films / D.G. Cooke, A.N. MacDonald, A. Hryciw et al. // *Physical Review B*. – 2006. – V. 73. – P. 193311.
72. Адонин, А.С. Глубокие центры захвата в гетероэпитаксиальных слоях КНС, подвергнутых различным обработкам / А.С. Адонин, А.В. Беспалов, Т.С. Китиченко, и др. // *Микроэлектроника*, 2000. – Т. 29. – №4. – С. 279–295.
73. Inoue, T. Crystalline disorder reduction and defect type-change in silicone on sapphire films by silicone implantation and subsequent thermal annealing / T. Inoue, T. Yoshii // *Applied Physics Letters*. – 1980. – V. 36. – №1. – P. 64–66.
74. Amano, J. A novel three-step process for low-defect-density silicone on sapphire / J. Amano, K. Carey // *Applied Physics Letters*. – 1981. – V. 39. – №2. – P. 163–165.
75. Reedy, R.E. Suppressing outdiffusion in implantation amorphized and recrystallized silicone on sapphire films / R.E. Reedy, T.W. Sigmon, L.A. Christel // *Applied Physics Letters*. – 1983. – V. 42. – №8. – P. 707–709.
76. Yamamoto, Y. Influence of radiation induced damage in sapphire upon improvement of crystalline quality of silicone on sapphire / Y. Yamamoto, H. Kobayashi, T. Takahashi, T. Inada // *Applied Physics Letters*. – 1985. – V. 47. – №12. – P. 1315–1317.
77. Parker, M.A. Lattice images of defect-free silicone on sapphire prepared by ion implantation / M.A. Parker, R. Sinclair, T.W. Sigmon // *Applied Physics Letters*. – 1985. – V. 47. – №6. – P. 626–628.
78. Sai-Halasz, G.A. Stress-relieved regrowth of silicone on sapphire by laser annealing sapphire / G.A. Sai-Halasz, F.F. Fang, T.O. Sedgwick, A. Segmuller // *Applied Physics Letters*. – 1980. – V. 36. – №6. – P. 419–422.
79. Yaron, G. Laser annealing effects on the electrical characteristics of SOS transistors / G. Yaron, L.D. Hess, S.A. Kokorowski // *Solid-State Electronics*. – 1980. – V. 23. – P. 893–904.

80. Thompson, M.O. Silicone melt, regrowth and amorphization velocities during pulsed laser irradiation / M.O. Thompson, J.W. Mayer, A.G. Cullis et. el. // *Physical Review Letters*. – 1983. – V. 50. – №12. – P. 896–899.
81. Staab, D.R. CMOS circuitry with shortened p-channel length on ultrathin silicon on insulator / D.R. Staab, R.M. Greene, M.L. Burgener, A. Reedy // US 5973363, 26.10.1999, Peregrine Semiconductor Corp.
82. Александров, П.А. Применение имплантации ионов кислорода и процесса твердофазной рекристаллизации для улучшения кристаллической структуры кремния на сапфире / П.А. Александров, К.Д. Демаков, С.Г. Шемардов, Ю.Ю. Кузнецов // *Нано- и микросистемная техника*. – 2008. – №3. – С. 54–56.
83. Александров, П.А. Особенности процесса твердофазной рекристаллизации аморфизированных ионами кислорода структур кремний-на-сапфире / П.А. Александров, К.Д. Демаков, С.Г. Шемардов, Ю.Ю. Кузнецов // *Физика и техника полупроводников*. – 2009. – Т. 43. – №5. – С. 627–629.
84. Александров, П.А. Рекристаллизация с границы раздела кремний-сапфир как новый метод получения структурно совершенных пленок кремния на сапфировой подложке / П.А. Александров, К.Д. Демаков, С.Г. Шемардов, Ю.Ю. Кузнецов // *Физика и техника полупроводников*. – 2010. – Т. 44. – №10. – С. 1433–1435.
85. Воротынцев, В.М. Применение имплантации ионов кремния для формирования структурно-совершенных слоев кремния на сапфире / В.М. Воротынцев, Е.Л. Шоболов, В.А. Герасимов // *Физика и техника полупроводников*. – 2011. – Т. 45. – №12. – С. 1662–1666.
86. Александров, П.А. Исследование рекристаллизации КНС-структур при разных энергиях аморфизирующего пучка ионов / П.А. Александров, К.Д. Демаков, С.Г. Шемардов, Ю.Ю. Кузнецов // *Физика и техника полупроводников*. – 2013. – Т. 47. – №2. – С. 270–272.
87. Roche, P. Impacts of Front-End and Middle-End Process Modifications on Terrestrial Soft Error Rate / P. Roche, G. Gasiot // *IEEE Transaction Device and Materials Reliability*. – 2005. – V. 5. – №3. – P. 382–396.
88. Алферов, Ж.И. История и будущее гетероструктур / Ж.И. Алферов // *Физика и техника полупроводников*. – 1998. – Т. 32. – №1. – С. 3–18.
89. Алферов, Ж.И. Наноматериалы и нанотехнологии / Ж.И. Алферов, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов и др. // *Микросистемная техника*. – 2003. – №8. – С. 3–13.
90. Леденцов, Н.Н. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин и др. // *Физика и техника полупроводников*. – 1998. – Т. 32. – №4. – С. 385–410.

91. Bimberg, D. Quantum Dot Heterostructures / D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov. – John Wiley & Sons Ltd., 1999. – 328 p.
92. Герасименко, Н.Н. Кремний – материал нанoeлектроники / Н.Н. Герасименко, Ю.Н. Пархоменко. – Москва: Техносфера, 2007. – 352 с.
93. Harrison, P. Quantum Wells, Wires and Dots. Forth edition / P. Harrison, A. Valavanis. – John Wiley & Sons Ltd., 2016. – 610 p.
94. Лобанов, Д.Н. Влияние параметров Ge(Si)/Si(001) самоформирующихся нанoостровков на их электролюминесценцию при комнатной температуре / Д.Н. Лобанов, А.В. Новиков, К.Е. Кудрявцев и др. // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43. – №3. – С. 332–336.
95. Kasper, E. Silicon Quantum Integrate Circuits / E. Kasper, D.J. Paul. – Springer, 2005. – 367 p.
96. Герасименко, Н.Н. Радиационная стойкость нанoструктур / Н.Н. Герасименко, Д.И. Смирнов // Нано- и микросистемная техника. – 2008. – №9. – С. 2–11.
97. Sobolev, N.A. Radiation Effects in Quantum Dot Structures / N.A. Sobolev // Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics. – Elsevier, 2008. – P. 392–447.
98. Александров, П.А. Отличия воздействия излучения на нанoeлектронные материалы, приборы, схемы и на их микроелектронные аналоги / П.А. Александров, Е.К. Баранова, И.В. Баранова и др. // Нано- и микросистемная техника. – 2012. – №4. – С. 2–11.
99. Claeys, C. Radiation effects in advanced semiconductor materials and devices / C. Claeys, E. Semoen. – Springer, 2002. – 417 p.
100. Leon, R. Change in luminescence emission induced by proton irradiation: InGaAs/GaAs quantum wells and quantum dots / R. Leon, G.M. Swift, B. Magnesset et al. // Applied Physics Letters. – 2000. – V. 76. – P. 2074–2076.
101. Новиков, А.В. Влияние радиационного воздействия на люминесцентные свойства низкоразмерных гетероструктур SiGe/Si(001) / А.В. Новиков, А.Н. Яблонский, В.В. Платонов и др. // Физика и техника полупроводников. – 2010. – Т. 44. – №3. – С. 346–351.
102. Красильник, З.Ф. Сравнительный анализ радиационного воздействия на электролюминесценцию кремния и SiGe/Si(001)-гетероструктур с самоформирующимися нанoостровками / З.Ф. Красильник, К.Е. Кудрявцев, А.Н. Качемцев и др. // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45. – №2. – С. 230–234.
103. Байдусь, Н.В. Особенности излучательных характеристик гетероструктур InGaAs/GaAs с квантовыми ямами и точками, облученных нейтронами / Н.В. Байдусь, О.В. Вихрова, Б.Н. Звонков и др. // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49. – №3. – С. 370–374.
104. Sobolev, N.A. Radiation effects in Si-Ge quantum size structures / N.A. Sobolev // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47. – №2. – С. 182–191.

105. Сайт программы SRIM. – Режим доступа: [www.srim.org](http://www.srim.org).
106. Экштайн, В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела / В. Экштайн. – Москва: Мир, 1995. – 321 с.
107. Артемьев, В.А. Влияние упругих напряжений на кинетику формирования областей разупорядочения в кремнии / В.А. Артемьев, В.В. Михнович // Физика и техника полупроводников. – 1986. – Т. 20. – №1. – С. 167–170.
108. Новиков, В.А. Влияние неоднородного распределения радиационных дефектов в GaAs на спектры DLTS / В.А. Новиков, В.В. Пешев // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32. – №4. – С. 411–416.
109. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010617268. Программа для численного моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных твердотельных гетерокомпозициях с внутренней структурой при движении в их объеме ускоренных ионов («TRIS») / А.В. Скупов // Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. – 2010.
110. Mendenhall, M.H. Algorithms for the rapid computation of classical cross sections for screened Coulomb collisions / M.H. Mendenhall, R.A. Weller // Nuclear Instruments and Methods in Physical Research. – 1991. – V. B58. – P. 11–17.
111. Буренков, А.Ф. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскадах атомных смещений в твердых телах / А.Ф. Буренков, Ф.Ф. Комаров, М.А. Кумахов, М.М. Темкин. – Москва: Энергоатомиздат, 1985. – 248 с.
112. Скупов, А.В. Особенности моделирования процессов в структурах «кремний на сапфире» при ионно-лучевом легировании / А.В. Скупов, В.К. Киселев, С.В. Оболенский // Сб. тез. докладов X «Нижегородской сессии молодых ученых (физика, химия, медицина, биология)», «Голубая Ока», 17–22 апреля 2005 г. – Нижний Новгород: Гладкова О. В., 2005. – С. 85–86.
113. Скупов, А.В. Моделирование процессов дефектообразования, происходящих при ионной имплантации в гетерокомпозиции «кремний на сапфире» с учетом особенностей их строения / А.В. Скупов, В.К. Киселев, С.В. Оболенский // Сб. тез. докладов IV Международной молодежной научно-технической конференции «Будущее технической науки», Нижний Новгород, 26–27 мая 2005 г. – Нижний Новгород: НГТУ, 2005. – С. 184–185.
114. Скупов, А.В. Моделирование профилей распределения внедряемой примеси и радиационных дефектов в компонентах полупроводниковых гетероструктур при ионно-лучевом легировании / А.В. Скупов, В.К. Киселев, С.В. Оболенский // Сб. докладов IV научно-технической конференции «Молодежь в науке», Саров, 1–3 ноября 2005 г. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005 – С. 292–295.

115. Скупов, А.В. Исследование методом компьютерного моделирования влияния переходных слоев гетерокомпозиции «диоксид кремния-кремний-сапфир» на параметры профилей пространственного распределения ионов и радиационных дефектов при ионно-лучевом легировании / А.В. Скупов, В.Д. Скупов, С.В. Оболенский // Сб. тез. докл. 1-й Всероссийской конференции «Физические и физико-химические основы ионной имплантации», Нижний Новгород, 24–27 октября 2006 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета. – С. 18–19.
116. Скупов, А.В. Особенности моделирования методом Монте-Карло профилей пространственного распределения внедряемых ионов и радиационных дефектов в гетерокомпозициях «кремний на сапфире» / А.В. Скупов, С.В. Оболенский, В.Д. Скупов // Физика и химия обработки материалов. – 2006. – №4. – С. 5–11.
117. Хохлов, А.Ф. Аллотропия кремния / А.Ф. Хохлов, И.И. Машин. – Нижний Новгород: Издательство государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 2002. – 222 с.
118. Куколев, В.Г. Химия кремния и физическая химия силикатов / В.Г. Куколев. – Москва: Высшая школа, 1966. – 463 с.
119. Бабичев, А.П. Физические величины: Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др. – Москва: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
120. Голоденко, А.Б. Оценка адекватности фрактальной модели атомной структуры аморфного кремния / А.Б. Голоденко // Физика и техника полупроводников. – 2010. – Т. 44. – №1. – С. 87–91.
121. Барабан, А.П. Электроника слоев  $\text{SiO}_2$  на кремнии / А.П. Барабан, В.В. Булавинов, П.П. Конов. – Ленинград: Издательство Ленинградского университета, 1988. – 304 с.
122. Витовский, Н.А. О величине пороговой энергии смещения атомов в полупроводниках / Н.А. Витовский, Д. Мустафакулов, А.П. Чекмарева // Физика и техника полупроводников. – 1977. – Т. 11. – №9. – С. 1747–1753.
123. Вавилов, В.С. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках / В.С. Вавилов, А.Е. Кив, О.Р. Ниязова. – Москва: Наука, 1981. – 368 с.
124. Вавилов, В.С. Миграция атомов в полупроводниках и изменения числа и структуры дефектов, инициируемые возбуждением электронной подсистемы / В.С. Вавилов // Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167. – №4. – С. 407–412.
125. Jagielski, J. Friction properties of ion implanted  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ceramic / J. Jagielski, A. Piatkowska, Z. Librant et al. // Nuclear Instruments and Methods B. – 2003. – V. 206. – P. 1097–1100.
126. Schnohr, C.S. Ion-beam induced effects in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  at 15K / C.S. Schnohr, E. Wendler, K. Gartner et al. // Nuclear instruments and methods B. – 2006. – V. 250. – P. 85–89.

127. Kestemich, W. Search for radiation-induced electrical degradation in ion irradiated sapphire and polycrystalline  $\text{Al}_2\text{O}_3$  / W. Kestemich // *Journal Applied Physics*. – 1999. – V. 85. – №2. – P. 748–752.
128. Скупов, А.В. Влияние структурных дефектов гетерокомпозиции «кремний на сапфире» на результаты моделирования методом Монте-Карло процесса ионно-лучевого легирования / А.В. Скупов, С.В. Оболенский // Сб. тез. докл. XI Нижегородской сессии молодых ученых (технические науки), «Татинец» 12–16 февраля 2006 г. – Нижний Новгород: Гладкова О. В., 2006. – С. 58.
129. Скупов, А.В. Модель учета дислокационной структуры «мишени» при расчете профилей пространственного распределения имплантируемых ионов методом Монте-Карло / А.В. Скупов // Сб. тез. докл. 13 Всероссийской межвузовской научно-технической конференции «Микроэлектроника и информатика – 2006», Зеленоград, 19–21 апреля 2006 г. – Москва: МИЭТ. – С. 109.
130. Скупов, А.В. Моделирование процесса ионно-лучевого легирования гетерокомпозиции «кремний на сапфире» методом Монте-Карло с учетом влияния дислокационной структуры / А.В. Скупов, С.В. Оболенский // Сб. тез. докл. XXXVI Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц кристаллами, Москва, 30 мая – 1 июня 2006 г. – Москва: «Университетская книга» – С. 146.
131. Skupov, A.V. Monte-Carlo Algorithm Modification for Ion Implantation Simulation Tacking into Account Local Structure and Properties Heterogeneity of the “Target” / A.V. Skupov // *Book of abstracts of The 20-th International Conference on Transport Theory (ICTT-20)*, Obninsk, July 22–28 2007. – P. 223–224.
132. Скупов А.В Моделирование процесса ионно-лучевого легирования гетерокомпозиции «кремний на сапфире» методом Монте-Карло с учетом влияния дислокационной структуры / А.В. Скупов, С.В. Оболенский // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2007. – №4. – С. 37–42.
133. Бару, В.Г. Влияние облучения на поверхностные свойства полупроводников / В.Г. Бару, Ф.Ф. Волькенштейн. – Москва: Наука, 1978. – 288 с.
134. Линник, Л.Н. Тензорационный эффект в полупроводниковых структурах / Л.Н. Линник, Л.Н. Патрикеев, В.Д. Попов, Н.М. Ройзин // *Известия ВУЗов СССР. Радиоэлектроника*. – 1982. – Т. 25. – №5. – С. 90–92.
135. Тихончев, М.Ю. Пороговые энергии атомных смещений в  $\alpha$ -Fe под деформацией: моделирование методом молекулярной динамики / М.Ю. Тихончев, В.В. Светухин // *Письма в Журнал технической физики*. – 2017. – Т. 43. – №7. – С. 56–62.
136. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лотте. – Москва: Атомиздат, 1972. – 600 с.

137. Томсон, М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах / М. Томсон. – Москва: Мир, 1971. – 368 с.
138. Алехин, В.П. Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов / В.П. Алехин. – Москва: Наука, 1983. – 280 с.
139. Горелик, С.С. Материаловедение полупроводников и диэлектриков / С.С. Горелик, М.Я. Дашевский. – Москва: МИСиС, 2003. – 480 с.
140. Бехштедт, Ф. Поверхности и границы раздела полупроводников / Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. – Москва: Мир, 1990. – 488 с.
141. Емцев, В.В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках / В.В. Емцев, Т.В. Машовец. – Москва: Радио и связь, 1981. – 248 с.
142. Maszara, W.P. Kinetic of damage production in silicon during self-implantation / W.P. Maszara, G.A. Rozgonyi // *Journal of Applied Physics*. – 1986. – V. 60. – №7. – P. 2310–2315.
143. Kang, H.J. Computer simulation of damage processes during ion implantation / H.J. Kang, R. Shimizu, T. Saito, H. Yamakawa // *Journal of Applied Physics*. – 1987. – V. 62. – №7. – P. 2733–2738.
144. Roorda, S. Structural relaxation and defect annihilation in pure amorphous silicon / S. Roorda, W.C. Sinke // *Physical Review B*. – 1991. – V. 44. – №8. – P. 3702–3725.
145. Гвердцители, И.Г. Об аморфизации полупроводников при ионной бомбардировке / И.Г. Гвердцители, А.И. Гулдамашвили // *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение*. – 1989. – №1(48). – С. 56–59.
146. White, C.W. Ion implantation and annealing of crystalline oxides / C.W. White, C.J. McHargue, P.S. Skladetel. // *Materials Science Reports*. – 1989. – V. 4. – P. 41–146.
147. Yamamoto, Y. Crystalline quality improvement of silicone on sapphire film by oxygen implantation and subsequent thermal annealing / Y. Yamamoto // *Journal of Applied Physics*. – 1982. – V. 53. – №1. – P. 793–796.
148. Шемухин, А.А. Механизмы дефектообразования и рекристаллизации в пленках кремния на сапфире при ионном облучении / А.А. Шемухин, Ю.В. Балакшин, В.С. Черныш, С.А. Голубков и др. // *Физика и техника полупроводников*. – 2014. – Т. 48. – №4. – С. 535–538.
149. Скупов, А.В. Моделирование процесса аморфизации приборного слоя структур «кремний на сапфире» имплантацией ионов кремния или кислорода / А.В. Скупов / *Сб. тез. докл. VII Всероссийской конференции и школы молодых ученых и специалистов «Физические и физико-химические основы ионной имплантации»*, Нижний Новгород, 7–9 ноября 2018 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского государственного университета. – С. 161.
150. Атомная диффузия в полупроводниках. Под редакцией Д. Шоу. – Москва: Мир, 1975. – 684 с.

151. Краут, И. Диффузия по границам зерен и фаз / И. Краут, В. Густ. – Москва: Машиностроение, 1991. – 448 с.
152. Колобов, Н.А. Диффузия и окисление полупроводников / Н.А. Колобов, М.М. Самохвалов. – Москва: Металлургия, 1975. – 456 с.
153. Павлов, П.В. Влияние полей упругих напряжений на процессы диффузии примесей вдоль дислокаций / П.В. Павлов / Активируемые процессы технологии микроэлектроники. Межвузовский тематич. научн. сб. – Таганрог: ТРТИ. – 1979. – В. 5. – С. 1–11.
154. Павлов, П.В. Диффузия алюминия в пластически деформированном кремнии / П.В. Павлов, Э.В. Доброхотов // Физика твердого тела. – 1974. – Т. 16. – №1. – С. 3–8.
155. Пантелеев, В.А. Влияние упругих напряжений на диффузионные процессы в полупроводниках / В.А. Пантелеев, Т.С. Гугина, В.А. Муравьев // Физика твердого тела. – 1978. – Т. 20. – №2. – С. 562–564.
156. Болтакс, Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках / Б.И. Болтакс. – Ленинград: Наука, 1972. – 462 с.
157. Мильвидский, М.Г. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников / М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. – Москва: Металлургия, 1985. – 160 с.
158. Скупов, А.В. Особенности моделирования профилей распределения примесей и дефектов в гетероструктурах при ионной имплантации / А.В. Скупов, В.К. Киселев, С.В. Оболенский, В.А. Перевощиков // Сборник трудов 6-ой международной конференции «Рост монокристаллов и теплоперенос» (ICSC-2005), Обнинск, 25–30 сентября 2005 г. – Обнинск: ГНЦ РФ ФЭИ, 2005. – Т. 2. – С. 513–519.
159. Скупов, А.В. Моделирование процессов ионно-лучевого легирования и отжига гетерокомпозиций «кремний на сапфире» с учетом особенностей их строения / А.В. Скупов // Сб. тез. докл. IV Российской конференции с международным участием по физике, материаловедению и физико-химическим основам технологии получения легированных кристаллов кремния и приборных структур на их основе («Кремний-2007»), Москва, 3–6 июля 2007 г. – Москва: МИСиС. – С. 165.
160. Скупов, А.В. Особенности моделирования диффузионных процессов в гетерокомпозициях «кремний на сапфире» / А.В. Скупов, В.Д. Скупов, С.В. Оболенский // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2007. – №4. – С. 45–49.
161. Александров, Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок / Л.Н. Александров. – Новосибирск: Наука, 1985. – 223 с.
162. Chen, M.-J. Effect of uniaxial strain on anisotropic diffusion in silicon / M.-J. Chen, Y.-M. Sheu // Applied Physics Letters. – 2006. – V. 89. – P. 161908.

163. Александров, О.В. Модель ослабления диффузии, ускоренной окислением, в сильнолегированных слоях кремния / О.В. Александров, Н.Н. Афонин // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37. – №6. – С. 649–656.
164. Самарский, А.А. Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. – Москва: Наука, 1971. – 553 с.
165. Balestra, F. Deep depletion SOI MOSFETs with back potential control: a numerical simulation / F. Balestra, J. Brini, P. Gentil // Solid-State Electronics. – 1985. – V. 28. – №10. – P. 1031–1037.
166. Абрамов, И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем / И.И. Абрамов. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 152 с.
167. Скупов, А.В. Влияние дефектообразования в подложках при ионном легировании активных областей на характеристики КМОП-КНС БИС / А.В. Скупов, С.В. Оболенский // Сб. тез. докл. VII Международной конференции и VI школы молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе («Кремний-2010»), Нижний Новгород 6–9 июля 2010 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского государственного университета. – С. 194.
168. Tseng, W.F. Silicon-on-sapphire films with negative and positive interfacial charges / W.F. Tseng, J.L. Repace, H.L. Hughes, A. Christou // Thin Solid Films. – 1982. – V. 82. – P. 213–216.
169. Исследование спецстойкости БИС на КМОП-КНС и КНИ структурах и путей ее повышения: отчет о НИР / И.Б. Яшанин, А.В. Скобелев, С.В. Оболенский, Е.В. Комарова и др. – Нижний Новгород: ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седакова», 2008. – 140 с.
170. Разработка и применение методов прогнозирования спецстойкости микросхем на различных этапах технологического цикла изготовления: отчет о НИР / И.Б. Яшанин, Ю.А. Кабальнов, А.В. Скобелев, Н.В. Бадалова и др. – Нижний Новгород: ФГУП «ФНПЦ НИИИС им. Ю.Е. Седакова», 2008. – 277 с.
171. Яшанин, И.Б. Влияние технологии изготовления на дозовую деградацию тока потребления КМОП/КНД БИС / И.Б. Яшанин, А.В. Скобелев, В.В. Маслов Г.Г. Давыдов // Вопросы атомной науки и техники. С. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. – 2009. – В. 4. – С. 33–35.
172. Качемцев, А.Н. Особенности пространственных изменений структурно-чувствительных свойств компонентов гетерокомпозиций «кремний-на-сапфире» после рентгеновского облучения / А.Н. Качемцев, В.К. Киселев, А.В. Скупов, В.Д. Скупов // Тезисы докладов VIII-й Международной конференции и VII-й школы молодых специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе «Кремний-2011», Москва, 5–8 июля 2011 г. – Москва: Изд. дом «МИСиС», 2011. – С. 213.

173. Скупов, А.В. Моделирование процессов каскадообразования в структурах с самоформирующимися островками Ge(Si) при корпускулярном облучении / А.В. Скупов // Труды XVIII Международного симпозиума «Нанопфизика и нанопфотоника», Нижний Новгород, 10–14 марта 2014 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2014. – Т. II. – С. 626–627.
174. Лобанов, Д.Н. Влияние параметров Ge(Si)/Si(001) самоформирующихся островков на их электролюминесценцию при комнатной температуре / Д.Н. Лобанов, А.В. Новиков, К.Е. Кудрявцев, Д.В. Шенгуров и др. // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43. – №3. – С. 332–336.
175. Довбыш, Л.Е. Влияние морфологии и состава самоформирующихся наноструктур германия в матрице кремния на радиационную стойкость оптоэлектронных приборов / Л.Е. Довбыш, И.А. Дроздов, М.М. Иванова, В.К. Киселев и др. // Сб. тезисов докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе «Кремний-2012», Санкт-Петербург, 9–13 июля 2012. – Санкт-Петербург: ФТИ им. Иоффе, 2012. – С. 374.
176. Скупов, А.В. Моделирование процессов образования радиационных дефектов в гетероструктурах с самоформирующимися наноструктурами Ge(Si)/Si(001) при облучении нейтронами / А.В. Скупов // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49. – №5. – С. 634–637.
177. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017613086. Программа для моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных полупроводниковых гетероструктурах с нановключениями при корпускулярном облучении «TRISQD» / А.В. Скупов // Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. – 2017.
178. Скупов, А.В. Модель гашения фотолюминесценции наноструктур Ge(Si) кластерами радиационных дефектов / А.В. Скупов // Материалы XX Международного симпозиума «Нанопфизика и нанопфотоника», Нижний Новгород, 14–18 марта 2016 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2016. – Т. 2. – С. 728–729.
179. Скупов, А.В. Модель деградации спектра фотолюминесценции самоформирующихся наноструктур Ge(Si)/Si(001) при облучении быстрыми нейтронами / А.В. Скупов // Труды XXI Международного симпозиума «Нанопфизика и нанопфотоника», Нижний Новгород, 13–16 марта 2017 г. – Нижний Новгород: Изд. Нижегородского госуниверситета, 2017. – Т. II. – С. 722–723.

180. Оболенский, С.В. Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства облученных гетероструктур с наноструктурами Ge/Si / С.В. Оболенский, А.В. Скупов // Сб. тез. докл. XLIX Международной тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, Москва, 28–30 мая 2019 г. – Москва: Изд. дом «КДУ», «Университетская книга», 2019. – С. 15.
181. Adachi, S. Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors / S. Adachi. – John Wiley & Sons Ltd., 2009. – 400 p.
182. Соболев, И.М. Численные методы Монте-Карло / И.М. Соболев. – Москва: Наука, 1973. – 311 с.
183. Полякова, А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов / А.Л. Полякова. – Москва: Энергия, 1979. – 168 с.
184. Якимов, А.И. Фотодиоды Ge/Si со встроенными слоями квантовых точек Ge для ближней инфракрасной области (1,3–1,5 мкм) / А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.И. Никифоров и др. // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37. – №11. – С. 1383–1388.
185. Васильев, А.В. О параметрах разупорядоченных областей в кремнии // Физика и техника полупроводников / А.В. Васильев, М.И. Изтелеулов, С.А. Смагулова, Л.С. Смирнов. – 1985. – Т. 19. – №11. – С. 2073–2074.
186. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. В 10-ти т. Т. VII. Теория упругости. 4-е изд. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Наука, 1987. – 248 с.
187. Nenashev, A.V. Spatial Distribution of elastic Deformations in Ge/Si Structures with Quantum Dots / A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2000. – V. 91. – №3. – P. 497–503.
188. Pearson, G.S. Analytical solution for strain in pyramidal quantum dot / G.S. Pearson, D.A. Faux // Journal of Applied Physics. – 2000. – V. 88. – №2. – P. 730–736.
189. Двуреченский, А.В. Квантовые точки 2 типа в системе Ge/Si / А.В. Двуреченский, А.И. Якимов // Физика и техника полупроводников. – 2001. – Т. 35. – №9. – С. 1143–1153.
190. Якимов, А.И. Связывание электронных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками 2-го типа / А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.А. Блошкин, А.В. Ненасhev // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2006. – Т. 83. – №4. – С. 189–194.
191. Двуреченский, А.В. Квантовые точки Ge/Si во внешних электрическом и магнитном полях / А.В. Двуреченский, А.И. Якимов, А.В. Ненасhev, А.Ф. Зиновьева // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – №1. – С. 60–62.

192. Талочкин, А.Б. Спектр электрон-дырочных состояний структуры Si/Ge с квантовой точками Ge / А.Б. Талочкин, И.Б. Чистохин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 140. – №3. – С. 583–589.
193. El Kurdi, M. Band-edge alignment of SiGe/Si quantum wells and SiGe/Si self-assembled islands / M. El Kurdi, S. Sauvage, G. Fishman, P. Voucaud // Physical Review B. – 2006. – V. 73. – P. 195327.
194. Козлов, В.А. Легирование полупроводников радиационными дефектами при облучении протонами и  $\alpha$ -частицами / В.А. Козлов, В.В. Козловский // Физика и техника полупроводников. – 2001. – Т. 35. – №7. – С. 769–795.
195. Ермолов, П. Нейтронно-наведенные эффекты в зонном кремнии, обусловленные дивакансионными кластерами с тетравакансионным ядром / Д. Карманов, А. Лефлат, В. Мананков, М. Меркин, Е. Шабалина // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36. – №10. – С. 1194–1201.
196. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. В 10-ти т. Т. III. Квантовая механика. 4-е изд. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Наука, 1989. – 768 с.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А.

## СВИДЕТЕЛЬСТВА О ГОСУДАРСТВЕННОЙ РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММ ДЛЯ ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2010617268

Программа для численного моделирования процессов дефектообразования в многослойных многокомпонентных твердотельных гетерокомпозициях с внутренней структурой при движении в их объеме ускоренных ионов («TRIS»)

Правообладатель(ли): *Федеральное государственное унитарное предприятие федеральный научно-производственный центр «Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова» (RU)*

Автор(ы): *Скунов Антон Владимирович (RU)*

Заявка № 2010614495

Дата поступления 26 июля 2010 г.

Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ  
29 октября 2010 г.



*Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам*

*Б.П. Симонов*

## РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2017613086

**«Программа для моделирования процессов  
дефектообразования в многослойных многокомпонентных  
полупроводниковых гетероструктурах с нановключениями  
при корпускулярном облучении «TRISQD»».**

Правообладатели: *Российская Федерация, от имени которой выступает  
Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом» (RU),  
Федеральное государственное унитарное предприятие федеральный  
научно-производственный центр «Научно-исследовательский  
институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова» (RU)*

Автор: *Скупов Антон Владимирович (RU)*



Заявка № **2017610175**

Дата поступления **11 января 2017 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **10 марта 2017 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

*Г.П. Ивлиев*

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б.

## АКТ ВНЕДРЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

УТВЕРЖДАЮ

Первый заместитель директора

РФЯЦ-ВНИИЭФ – директор филиала,  
доктор технических наук, доцент

Седаков А.Ю.

2019 г.

АКТ

№195-95-30-3220/256 от 24.06.2019

внедрения в филиале Федерального государственного унитарного предприятия «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» «Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова» результатов диссертационной работы Скупова Антона Владимировича «Моделирование ионно-лучевого легирования гетероструктур «кремний на сапфире» и облучения нейтронами гетероструктур с наноструктурами Ge(Si)», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников.

Комиссия, созданная приказом первого заместителя директора РФЯЦ-ВНИИЭФ – директора филиала от 14.06.2019 №195-95/769-вр, в составе:

Председатель комиссии	Яшанин И.Б., главный научный сотрудник, к.ф.-м.н.;
Члены комиссии:	Труфанов А.Н., начальник научно-исследовательского отдела спецстойкости, надежности и механической прочности, к.т.н.;
	Кабальнов Ю.А., ведущий научный сотрудник научно-исследовательской группы спецстойкости, к.т.н.;
	Скобелев А.В., ведущий специалист научно-исследовательской группы испытаний на радиационную стойкость

рассмотрела диссертационную работу Скупова А.В. и констатирует следующее.

Диссертационная работа Скупова А.В. посвящена математическому моделированию процессов ионно-лучевого легирования гетероструктур «кремний на сапфире» с учетом особенностей строения и физических свойств

приборного слоя. Результаты расчетов, полученные в ходе выполнения диссертационной работы, использовались при выполнении НИР «Исследование спецстойкости БИС на КНС и КНИ структурах и путей ее повышения» и «Исследование и разработка технологии специспытаний имитационными методами» в 2006–2011 годах. Комплексное использование технологических экспериментов и результатов расчетов позволило оптимизировать режимы ионно-лучевого легирования в технологических маршрутах изготовления КМОП/КНС БИС серий 1825 и 1620 микропроцессорного набора. Это обеспечило уменьшение величины статического тока потребления микросхем после воздействия стационарного ионизирующего излучения на два порядка и увеличение процента выхода годных микросхем по параметру «статический ток потребления» в 5–6 раз.

В диссертационной работе Скупова А.В. методом математического моделирования исследованы процессы, происходящие в гетероструктурах с наноструктурами Ge(Si)/Si(001) при облучении нейтронами. Данные гетероструктуры были применены в качестве активной среды перспективных оптоэлектронных приборов на квантовых эффектах на основе полупроводникового кремния. Полученные результаты моделирования использованы для интерпретации экспериментальных данных в НИР «Исследование перспективных конструкций и технологических принципов создания радиационно-стойких приборов, в том числе, в интегральном исполнении, на основе Si-SiGe», проводившейся в 2011–2013 г.г. в соответствии с Федеральной целевой программой «Развитие ЭКБ и радиоэлектроники» на 2008–2015 годы.

Для решения поставленных в диссертации задач Скуповым А.В. разработаны новые компьютерные программы TRIS и TRISQD. Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ: на программу TRIS №2010617268, на программу TRISQD №2017613086.

Председатель комиссии



Яшанин И.Б.

Члены комиссии:



Труфанов А.Н.



Кабальнов Ю.А.



Скобелев А.В.