

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЛАСТЕЙ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ В КРЕМНИИ

Богатов Н.М., Коваленко М.С.

Кубанский государственный университет, г. Краснодар

bogatov@phys.kubsu.ru

Создана компьютерной программа моделирования плотности электронных состояний наноразмерных областей разупорядочения в кремнии. Рассчитаны численно с помощью этой программы зависимости распределения плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния от энергии для различных значений параметров областей разупорядочения и температуры. Показано, что в запрещенной зоне преобладают энергетические уровни, созданные вакансиями, хаотически распределенными в пределах области разупорядочения.

Использование активных областей с размерами менее 100 нм – одна из основных тенденций развития современных полупроводниковых технологий, т.к. полупроводниковые структуры с такими областями приобретают новые свойства. Облучение потоком ионизирующих частиц – один из методов изменения свойств материалов и структур. Этот метод позволяет осуществлять локальное воздействие на кремний и изменять его свойства в наноразмерных областях.

В отечественной и зарубежной литературе значительное внимание уделяется исследованию радиационной стойкости полупроводниковых материалов и приборов. Кремний является наиболее широко используемым и изученным материалом полупроводниковой электроники. Возрастающие требования к радиационной стойкости электронных приборов стимулировали глубокое изучение фундаментальных механизмов взаимодействия примесей и радиационных дефектов в этом материале.

Первые результаты исследования влияния ионизирующих излучений на свойства полупроводников опубликованы в работах [1, 2]. Современное состояние проблемы отражено в монографиях [3 – 9].

Радиационное дефектообразование традиционно рассматривается как причина деградации параметров кремния и приборов на его основе. С научной и практической точек зрения представляет интерес поиск положительных сторон в этом процессе: обнаружение новых свойств, обусловленных радиационными дефектами, создание материалов и приборов, использующих эти свойства. Наиболее полно изучены свойства точечных дефектов и их комплексов. Эти дефекты создают искажения кристаллического поля размером несколько периодов решётки. Более крупные образования – области разупорядочения с радиусом от 10 до 100 нм исследованы не столь полно. Их можно рассматривать как вкрапления аморфной фазы. С этой точки зрения структура переменного состава с наноразмерными областями разупорядочения является материалом, обладающим новыми свойствами.

Цель работы – установить закономерности формирования областей разупорядочения под действием ионизирующих частиц, создать компьютерную программу расчета плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния, созданных наноразмерными областями разупорядочения.

1. Модель распределения электронных состояний, созданных областями разупорядочения, в запрещенной зоне кремния

Получим основные соотношения, определяющие распределение плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния, созданных областями разупорядочения. Область разупорядочения характеризуется средними значениями радиуса R_{do} и числа неаннигилировавших вакансий N_{vdo} .

Многовакансионные комплексы зарождаются в зоне неустойчивости объемом $v_w = 4\pi a^3 / 3$ (a – период решетки, для кремния $a = 0,543$ nm). Число таких зон в области разупорядочения

$n = (R_{do}/a)^3$. Вероятность объединения k случайно расположенных вакансий в объеме v_w определяется распределением Пуассона [6].

$$\omega_k = \frac{(N_{vr} v_w)^k}{k!} \exp\{-N_{vr} v_w\}, \quad (1)$$

где $N_{vr} = \frac{3N_{vdo}}{4\pi R_{do}^3}$ – средняя концентрация выбитых атомов Si из области разупорядочения.

Число k -вакансионных комплексов в области разупорядочения $n_k = n\omega_k$. Комплекс из k вакансий создает в запрещенной зоне m_k энергетических уровней E_{ki} , $i = 1, \dots, m_k$, g_{ki} – фактор вырождения уровня. Тогда распределение электронных состояний в запрещенной зоне описывается формулой

$$N(E) = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \sum_{i=1}^{m_k} g_{ki} \delta(E - E_{ki}), \quad (2)$$

где $\delta(x - b)$ – δ -функция Дирака.

В реальном материале вследствие хаотического распределения k -вакансионных комплексов в области разупорядочения и температурного размытия уровней распределение электронных состояний из дискретного (2) превращается в непрерывное. Учитывая этот факт, заменим δ -функции Дирака функциями Гаусса с дисперсиями $\sigma_k = kT\sqrt{n_k}$:

$$N(E) = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \sum_{i=1}^{m_k} \frac{g_{ki}}{\sqrt{\pi}\sigma_k} \exp\left\{-\frac{(E - E_{ki})^2}{\sigma_k^2}\right\}. \quad (3)$$

Таким образом, в области разупорядочения достигается высокая плотность нарушенных валентных связей. За счет этого создаются электронные состояния в запрещенной зоне кремния. Эти состояния могут служить центрами захвата неравновесных электронов или дырок. Следовательно, области разупорядочения могут играть роль наноразмерных центров неравновесного объёмного заряда.

2. Программа расчета плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния, созданных наноразмерными областями разупорядочения

На основе построенной модели создана компьютерная программа расчёта плотности электронных состояний в областях разупорядочения [10]. Основное окно программы показано на рис.1. Программа предназначена для анализа распределения электронных состояний в запрещенной зоне полупроводника с наноразмерными областями разупорядочения. Программа обеспечивает выполнение следующих функций: расчет и построение зависимости плотности электронных состояний от энергии в запрещённой зоне для различных температур.

В программе задаются период решетки, количество выбитых атомов кремния, радиус области разупорядочения, ширина запрещенной зоны, температура, число точек разбиения по оси абсцисс (ось энергии в запрещенной зоне), форма распределения энергетических состояний (Gauss – формула (3), Delta – формула (2)). Используются значения энергии уровней в запрещенной зоне кремния, созданные вакансиями и их комплексами. Исходные данные, представленные в левой верхней части окна программы, загружаются из файла.

Результатом расчетов является энергетическая плотность электронных состояний $N(E)$ в запрещенной зоне кремния, представленная в виде графика в нижней части окна программы (рис. 1). Этот график можно сохранить в файле графического формата, скопировать в буфер обмена. Чтобы перейти к объёмной плотности состояний, значения $N(E)$ следует умножить на объёмную плотность областей разупорядочения.

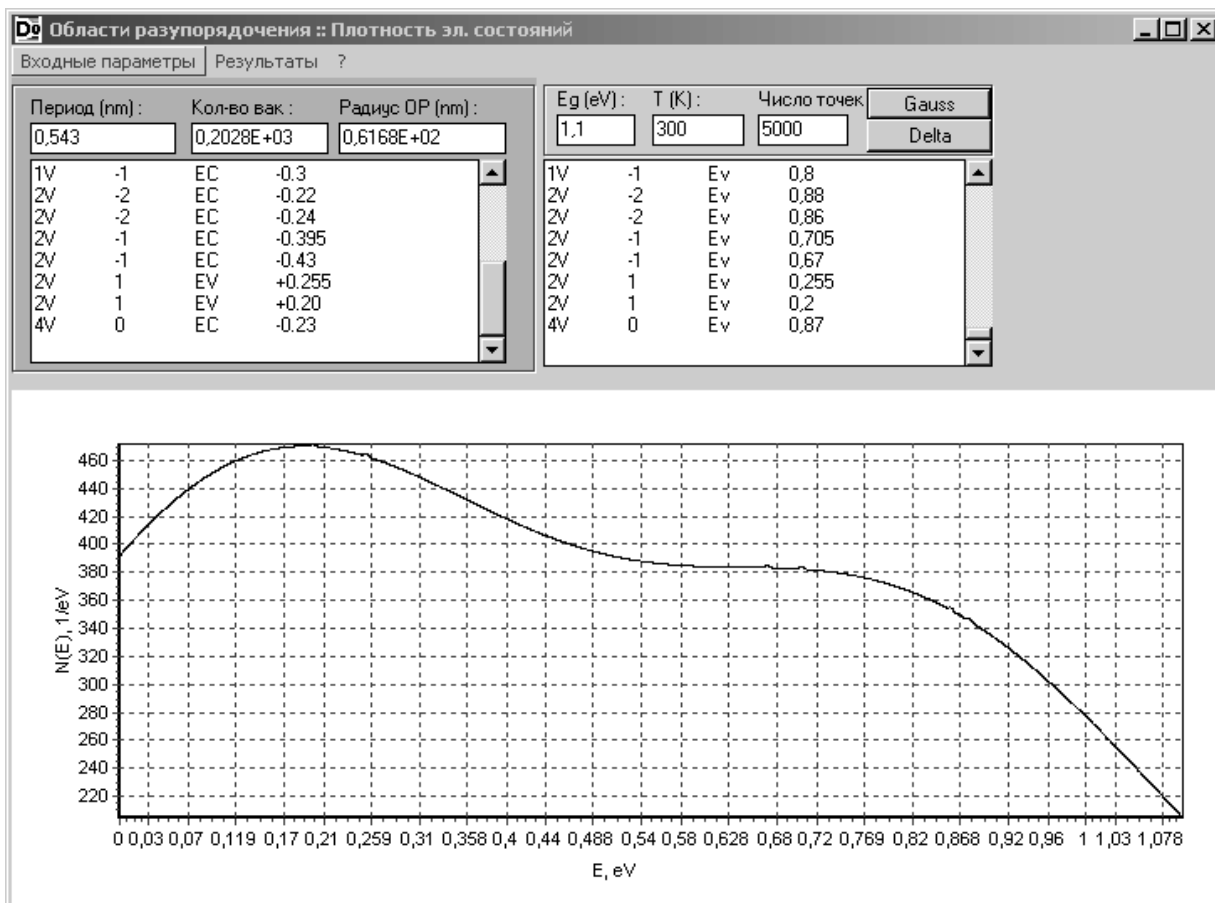


Рис.1. Окно программы расчёта плотности электронных состояний в областях разупорядочения

3. Анализ распределение плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния, созданных наноразмерными областями разупорядочения

С помощью созданной «Программы расчёта плотности электронных состояний в областях разупорядочения» проанализирована зависимость распределения плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния от параметров наноразмерных областей разупорядочения и температуры. Обнаруженные закономерности проиллюстрированы рис. 2 – рис. 5.

Расчет по формуле (1) показывает, что во всем диапазоне параметров наноразмерных областей разупорядочения R_{do} , N_{vdo} количество вакансий много больше, чем дивакансий и других много вакансионных комплексов. На рис. 2 – рис. 5 при $T = 4$ К высота вакансионных пиков много больше всех остальных. Поэтому основной вклад в распределение плотности состояний дают уровни вакансионного происхождения.

При $T = 4$ К распределение плотности состояний представлено набором пиков, ширина и высота которых увеличивается с ростом числа вакансий. При $T = 80$ К распределение плотности состояний оказывается непрерывным с явно выраженными максимумами, соответствующими положениям вакансионных пиков. При $T = 300$ К распределение плотности состояний превращается в сглаженную кривую, среднее значение которой возрастает с увеличением N_{vdo} .

Таким образом, наноразмерные области разупорядочения являются центрами повышенной плотности электронных состояний, значением которой можно управлять посредством изменения числа вакансий.

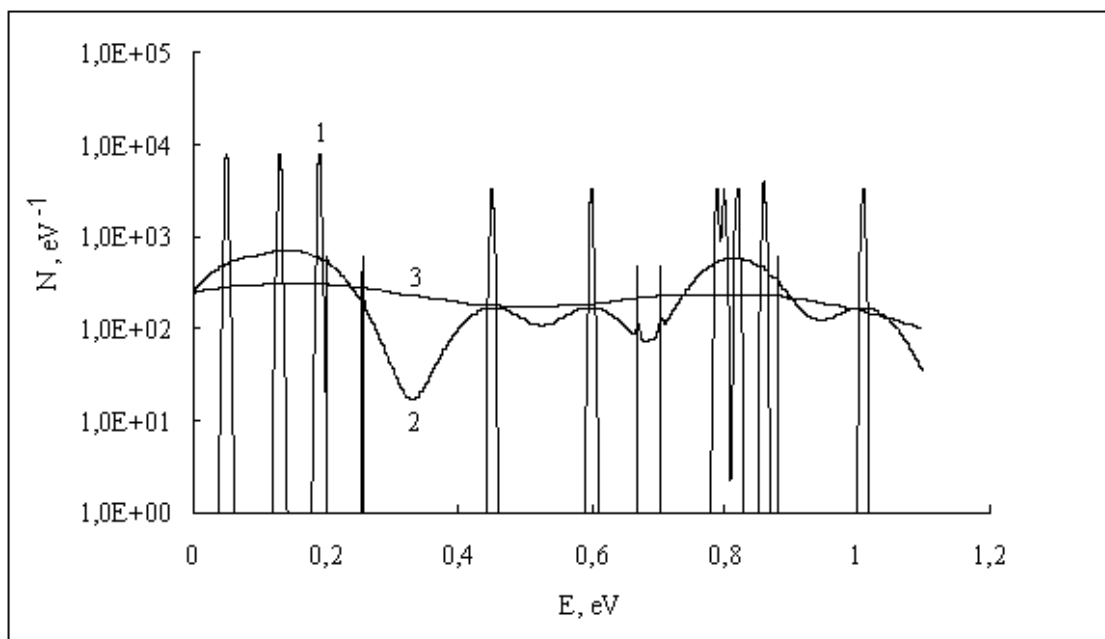


Рис.2. Плотность электронных состояний области разупорядочения с $R_{do} = 14.3$ нм, $N_{vdo} = 106$, созданной электронами с $E_e = 15,9$ Мэв: 1 – $T = 4$ К; 2 – $T = 80$ К; 3 – $T = 300$ К

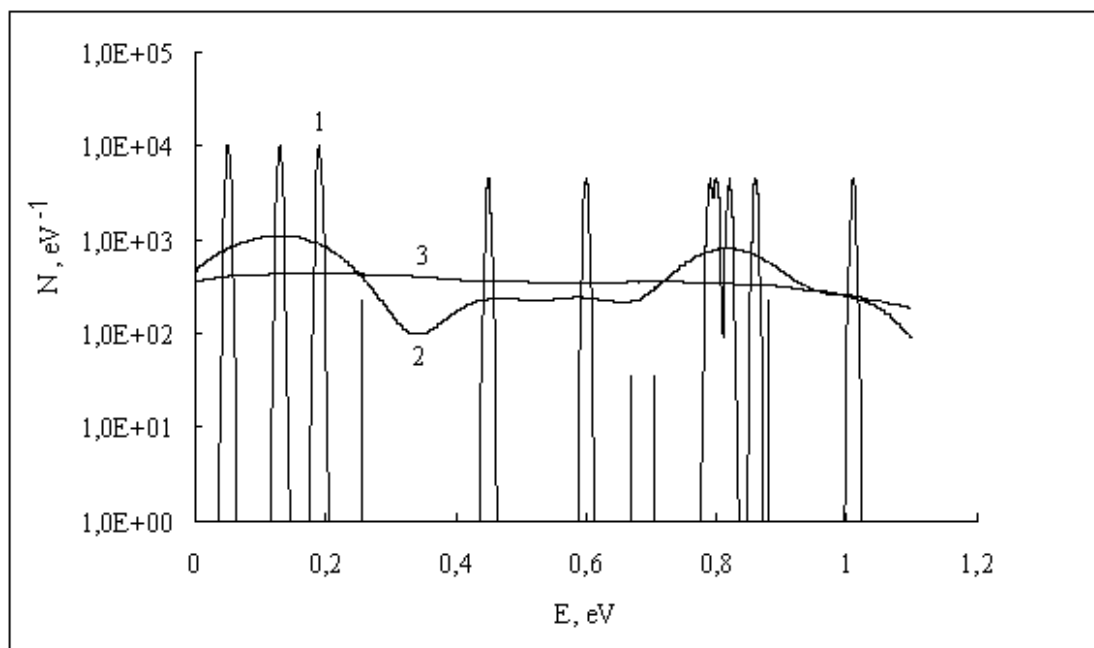


Рис.3. Плотность электронных состояний области разупорядочения с $R_{do} = 40$ нм, $N_{vdo} = 184$, созданной электронами с $E_e = 98,1$ Мэв: 1 – $T = 4$ К; 2 – $T = 80$ К; 3 – $T = 300$ К

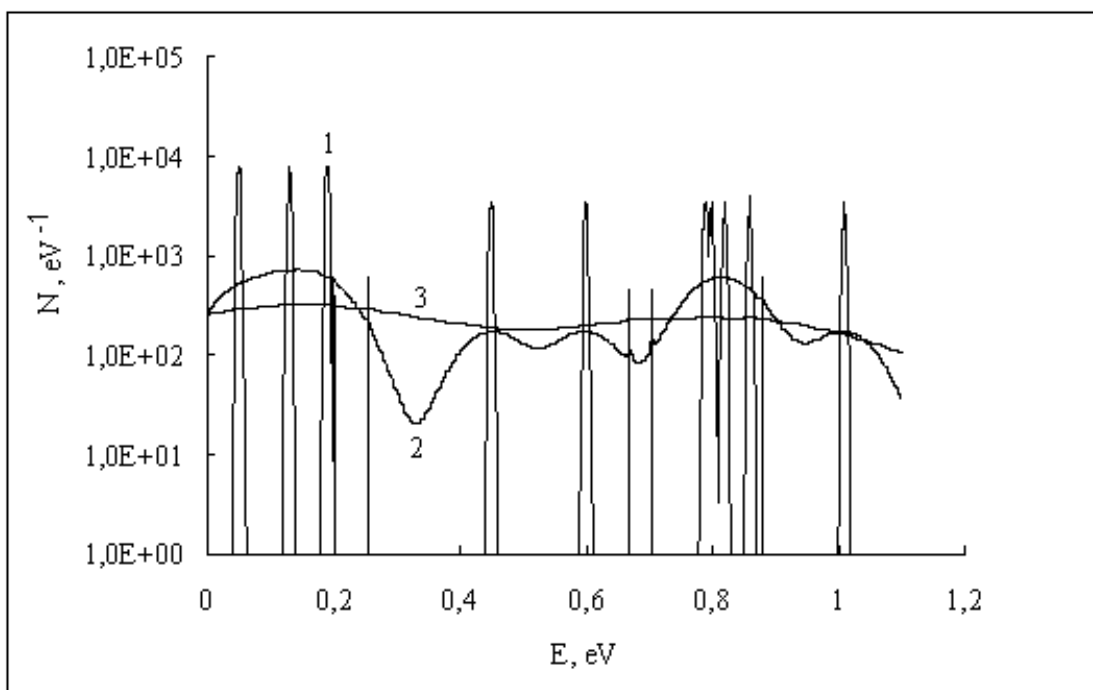


Рис.4. Плотность электронных состояний области разупорядочения с $R_{do} = 15$ нм, $N_{vdo} = 111$, созданной протонами с $E_p = 0,19$ Мэв: 1 – $T = 4$ К; 2 – $T = 80$ К; 3 – $T = 300$ К

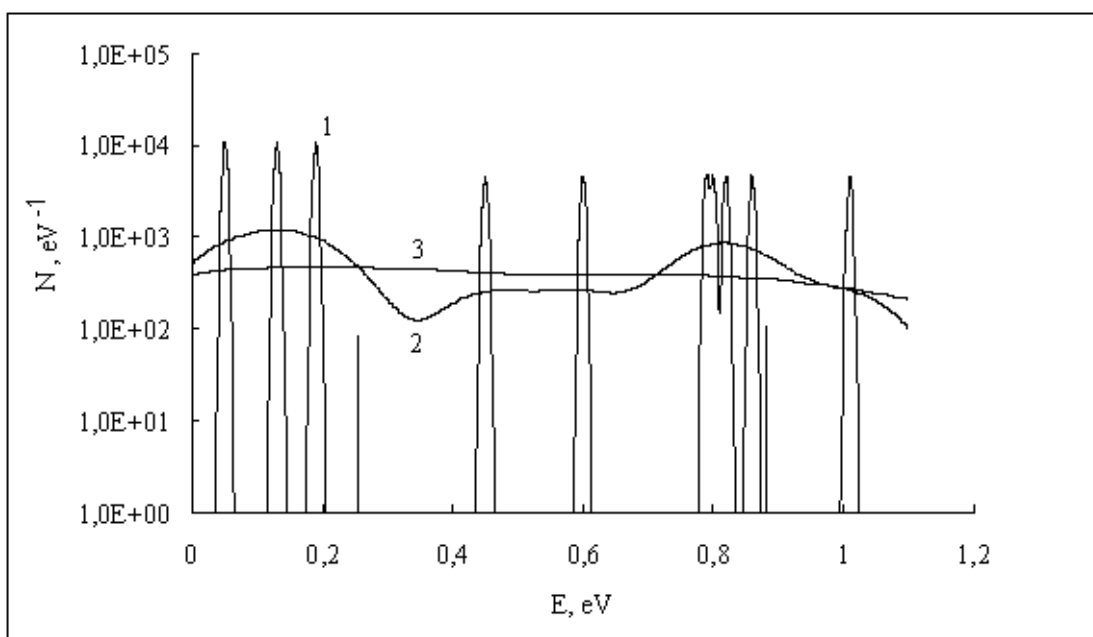


Рис.5. Плотность электронных состояний области разупорядочения с $R_{do} = 71$ нм, $N_{vdo} = 205$, созданной протонами с $E_p = 185$ Мэв: 1 – $T = 4$ К; 2 – $T = 80$ К; 3 – $T = 300$ К

Выводы

Построена модель распределения электронных состояний, созданных областями разупорядочения, в запрещенной зоне кремния. Эти состояния могут служить центрами захвата неравновесных электронов или дырок, поэтому области разупорядочения могут играть роль наноразмерных центров неравновесного объёмного заряда.

На основе построенной модели создана компьютерная программа расчёта плотности электронных состояний в областях разупорядочения. Распределение плотности электронных состояний по энергии зависит от периода решетки, количества выбитых атомов кремния,

радиуса области разупорядочения, ширины запрещенной зоны, температуры, значений энергии уровней в запрещенной зоне, созданных вакансиями и их комплексами.

Во всем диапазоне параметров наноразмерных областей разупорядочения R_{do} , N_{vdo} количество вакансий много больше, чем дивакансий и других много вакансионных комплексов. Поэтому основной вклад в распределение плотности состояний дают уровни вакансионного происхождения.

Распределение плотности состояний изменяется от дискретного при $T = 4$ К к непрерывному при $T = 80$ К с явно выраженными максимумами, соответствующими положениям вакансионных пиков. При $T = 300$ К среднее значение плотности состояний возрастает с увеличением числа вакансий в области разупорядочения.

Наноразмерные области разупорядочения являются центрами повышенной плотности электронных состояний. Воздействуя локально потоком ионизирующих частиц с заданной энергией, можно создавать области разупорядочения как конструктивные элементы полупроводниковых приборов. Этот метод позволяет управлять электрической и рекомбинационной активностью полупроводниковых структур в наноразмерных областях посредством изменения числа вакансий в них.

Литература

1. *Lark-Horovitz K., Bleuler E., Davis R.E., Tendam D.L.* Deut ron-bombarded semiconductors. // Phys. Rev. 1948. V.73. № 10. P. 1256-1286.
2. *Ларк-Горовиц К.* Бомбардировка полупроводников нуклонами. // Полупроводниковые электронные приборы. М.: ИЛ. 1953. С. 203-233.
3. *Вавилов В.С., Кив А.Е., Ниязова О.Р.* Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М.: Наука. 1981.
4. *Емцев В.В., Машовец Т.В.* Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М.: Радио и связь. 1981.
5. *Бургуэн Ж., Ланно М.* Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты. М.: Мир. 1985.
6. *Кузнецов Н.В., Соловьев Г.Г.* Радиационная стойкость кремния. М.: Энергоатомиздат. 1989.
7. *Вавилов В.С., Киселев В.Ф., Мукашев Б.Н.* Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука. 1990.
8. *Васильев А.В., Баранов А.И.* Дефектно-примесные реакции в полупроводниках. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2001. – 256 с.
9. *Булярский С.В., Светухин В.В.* Физические основы управления дефектообразованием в полупроводниках. Ульяновск: УлГУ, 2002.
10. *Коваленко М.С., Богатов Н.М.* Программа расчета плотности электронных состояний в областях разупорядочения. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2009614755. Зарегистрировано: 3.09.2009 г.