



IRC^{NT}
St. Petersburg
State University

Электронные свойства кислородных преципитатов в кремнии

Вывенко Олег Федорович

*Санкт-Петербургский гос университет,
Санкт-Петербург, Петродворец
198504, Ульяновская 1
oleg.vyvenko@spbu.ru*

Соавторы

- **Данилов Д. В.**
- Лошаченко А.С.
- Маслова Н.А.
- Соболев Н.А.
- Вдовин В.И.

содержание

- Введение. Прежние данные
 - Размер и внутренний состав КП
 - Электрические и люминесцентные свойства
- Свойства КП в имплантированных кислородом образцах
 - Положительный заряд
 - Особенности эмиссии электронов с состояний КП (эксперимент)
 - Особенности эмиссии электронов с состояний КП (теория)
- Заключение

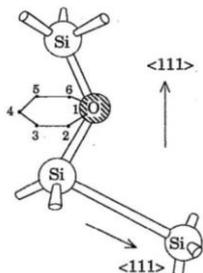
Состояние кислорода в кремнии

- Промышленный Cz-Si $[O] = 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$

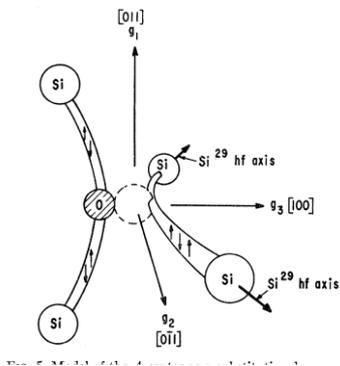
Низкие температуры

До 300 °C

Междуузельный



VO комплекс (А-центр)



300 °C – 500 °C

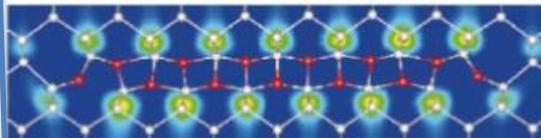
$VO_n, n=1-8$

Термодоноры

TD0 - TD16

$E_c - (0.05 - 0.07) \text{ эВ};$

$E_c - (0.12 - 0.16) \text{ эВ}$



кольца с 1-2
междуузельными
атомами кислорода

Промежуточные температуры

~700 °C

Зародышеобразование КП

Новые доноры

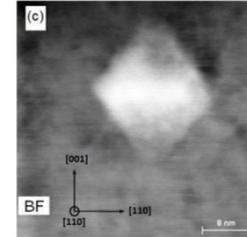
Rod-like defects

Состояние кислорода в кремнии

Высокие температуры

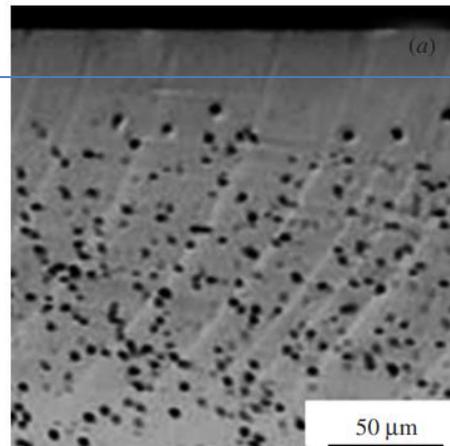
800 °C – 1100 °C

Кислородные преципитаты

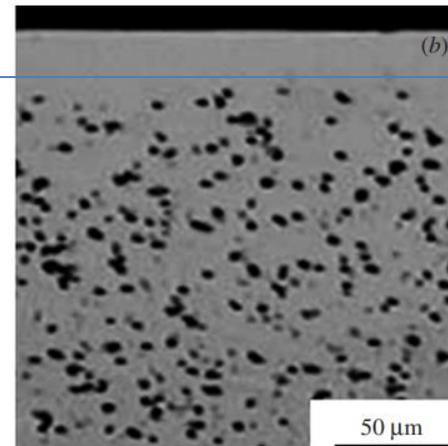


Основное использование:

- Рабочая область



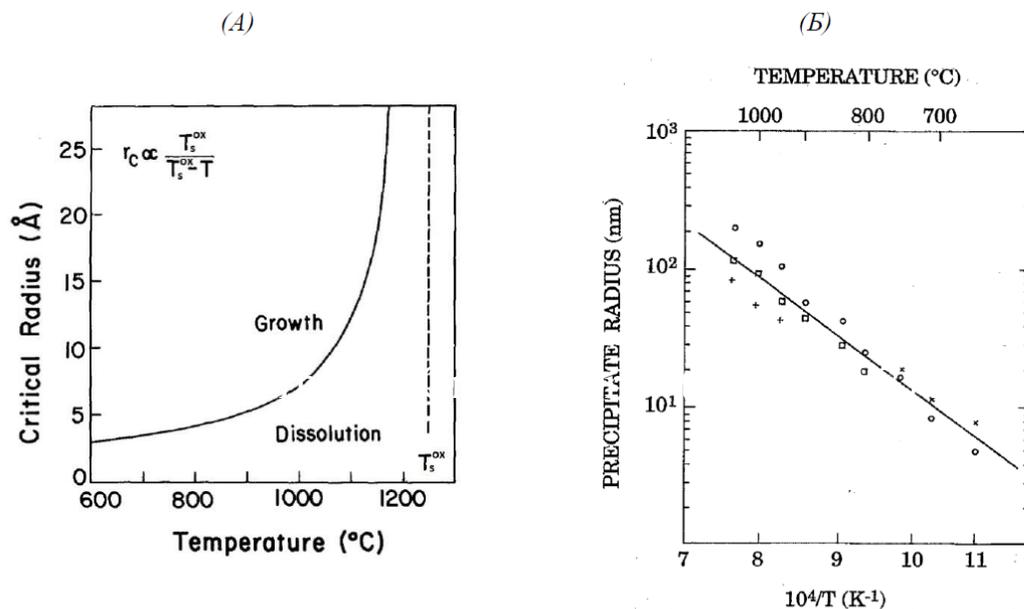
- Область
- внутреннего
- геттерирования
- примесей



- Механизм геттерирования продолжает изучаться

Размер кислородных преципитатов в Si

Размер vs T

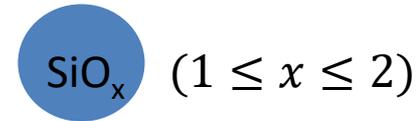


A. Borghesi et al J. Appl. Phys. 77 (9), 1995

Рис. 1.6 (А) Зависимость критического радиуса преципитата от температуры ($C_{v,i} = C_{v,i}^*, \delta = 0$) [141]. (Б) Температурная зависимость радиуса кислородного преципитата. Круги – кинетическая модель роста, перекрестия – результаты малоуглового нейтронного рассеяния, квадраты – экспериментальные данные из плотности ямок травления [62].

Элементный состав КП в Si

Средний состав варьируется



x experimental	average x with Eq. (2)	technique	thermal anneal
1.2 or 0.95	1.22	TEM, EELS	16 h 800 °C + 16 h 1050 °C
1 (fixed)	1	TEM, growth kinetics	200 h 700 °C
1 (fixed)	1	growth kinetics	400 h 700 °C
1 (fixed)	1.13	growth kinetics	400 h 900 °C
1.2 ± 0.1	1	TEM, FTIR	265 h 750 °C + 2 h 1050 °C
1 (EDX)	1.87	TEM, EDX, LST	1000 °C
1		growth kinetics	
1.17 (p ⁻) fixed	1.02	TEM, XRD growth kinetics	10 h 450 °C + 100 h 900 °C
2	1	TEM, FTIR	30 s 1250 °C + 64 h 800 °C
2	1.64–1.83	TEM, FTIR	30 s 1250 °C + 64 h 1000 °C
1.77 (p ⁺ , center of precipitate)	1.25	TEM, EDX	1 h 700 °C + 16 h 1000 °C
1.87 (p ⁻ , center of precipitate)	1.21	TEM, EDX	30 s 1250 °C + 17 h 1000 °C
1 (2 nm boundary layer)	1.22	TEM, EELS	30 s 1250 °C + 8 h 600 °C + 16 h 1000 °C

J. Vanhellemont,
Phys Status Solidi-
RRL, 9 (2015) 597-
602

Распределение O и Si по объему КП

D. Kot, G. Kissinger,
M.A. Schubert,
Sattler, Ecs Journal of
Solid State Science and
Technology, 6 (2017) N17

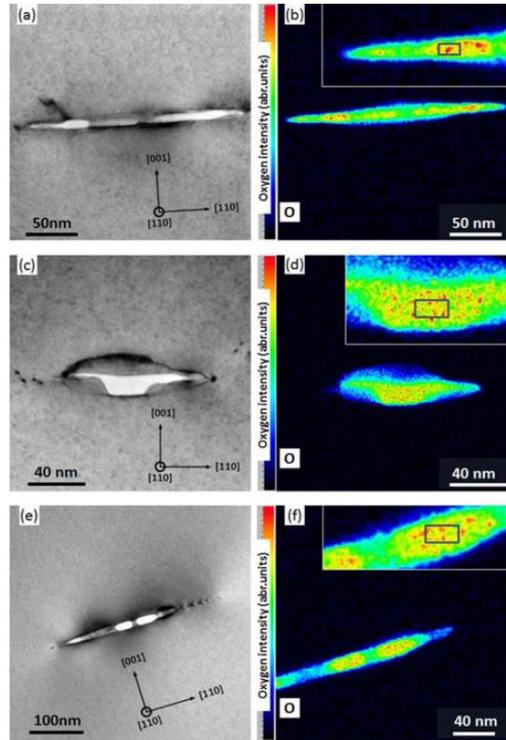


Figure 2 STEM BF image (a) and EDX map (b) of a plate-like precipitate observed in the RTA sample, STEM BF image (c) and EDX map (d) of a transitional form between plate-like and octahedral precipitate observed in the RTA sample, STEM BF (e) and EDX map (f) of a plate-like precipitate observed in the P2 sample.

Phys. Status Solidi RRL 9, No. 7, 405–409 (2015) / DOI 10.1002/pssr.201510194

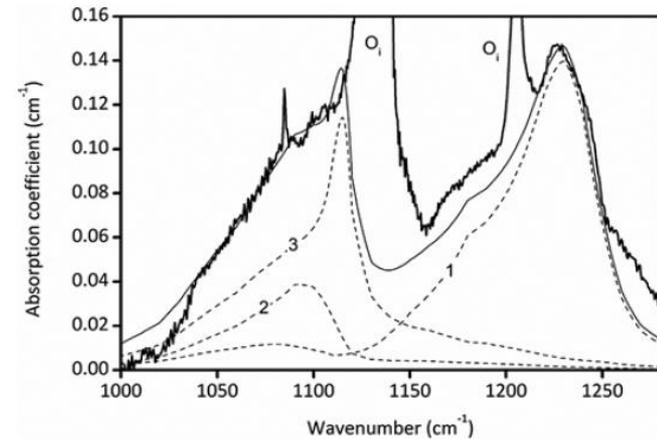


Figure 4 FTIR spectrum at liquid helium temperature of the RTA sample (thick solid curve), simulated spectrum (thin solid curve) consisting of the spectra of a prolate spheroid with aspect ratio $\beta_2 = 2$ (dashed curve 2) and oblate spheroids with aspect ratios $\beta_1 = 0.01$ (dashed curve 1) and $\beta_3 = 0.25$ (dashed curve 3).

КП = ядро SiO₂ + оболочка SiO_x



Кислородные преципитаты в кремнии

Распределение O и Si

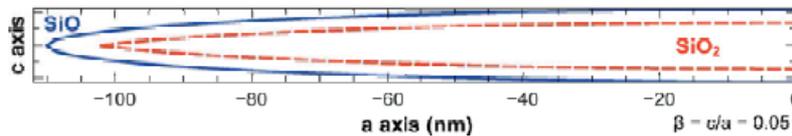


Figure 1 Schematic cross-section of half of a 220 nm equatorial diameter spheroidal $\text{SiO}_{1.22}$ precipitate with aspect ratio $\beta = 0.05$. The 2 nm thick SiO interface layer is indicated in blue and the transition to the SiO_2 core in red.

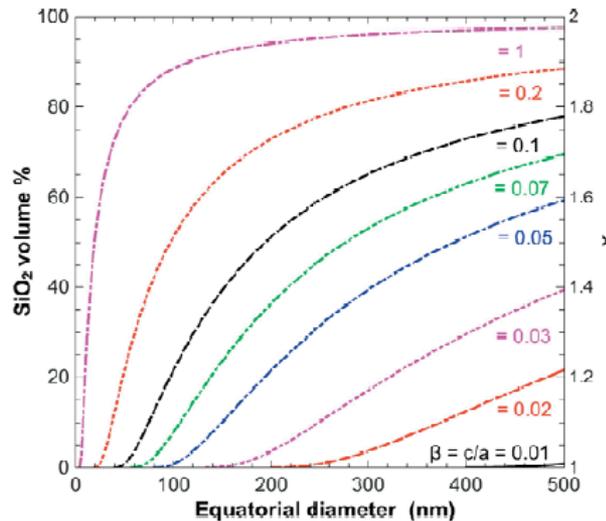


Figure 2 Average SiO_2 volume concentration and x as a function of spheroidal SiO_x precipitate size and aspect ratio, assuming a 2 nm SiO interface layer and a SiO_2 core. The line for a sphere (aspect ratio 1) coincides with that of an octahedral precipitate with edge length equal to the diameter of the sphere.

J. Vanhellemont,
Phys Status Solidi-
RRL, 9 (2015) 597-
602

Доля поверхностного слоя
увеличивается
с уменьшением размера КП и
при трансформации формы от
сферы к пластинке

Кислородные преципитаты в кремнии Данные EELS EDX ПЭМ

Стехиометрическое ядро SiO_2 + оболочка SiO_x



Электронные свойства КП в Si

Рекомбинация э-д пар и встроенный заряд КП

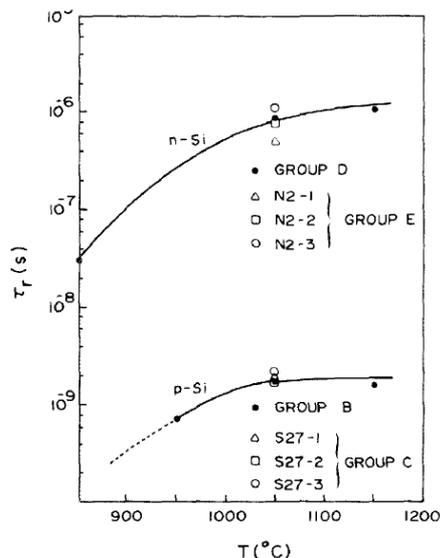


FIG. 6. Second-anneal temperature dependence of recombination lifetime for *p*-type samples (group B) and for *n*-type samples (group D). Recombination lifetimes for group C (*p*-type) and group E (*n*-type) samples annealed at 1050 °C fit reasonably well on the curves.

J.M. Hwang, D.K. Schroder, J Appl Phys, 59 (1986) 2476-2487.

- $\tau_{n\text{-type}} \gg \tau_{p\text{-type}}$

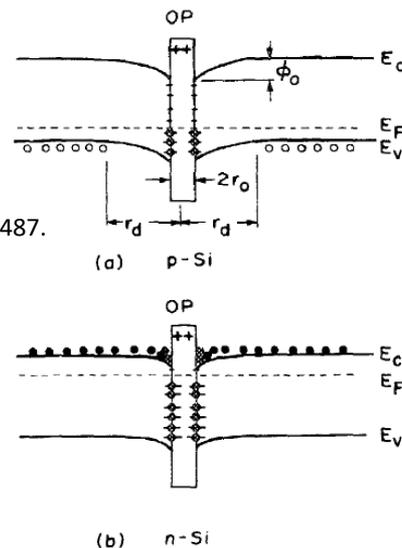


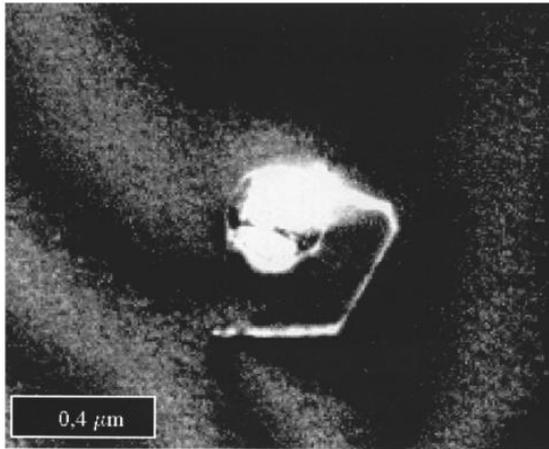
FIG. 12. Schematic band diagrams with band bending due to positive fixed charges in OP's which gives rise to (a) a depletion region in *p*-Si and (b) an accumulation layer around OP's in *n*-Si.

Предположение –

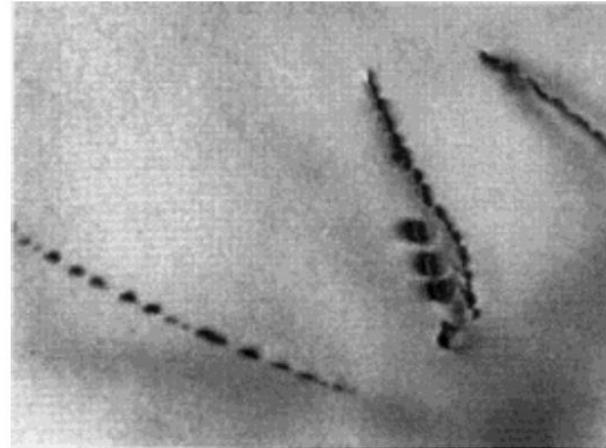
- Встроенный +заряд КП → барьер для захвата дырок.
- По аналогии с планарным Si/SiO₂ → +заряд на интерфейсе
- Дислокации не учитываются

Электронные свойства КП в Si

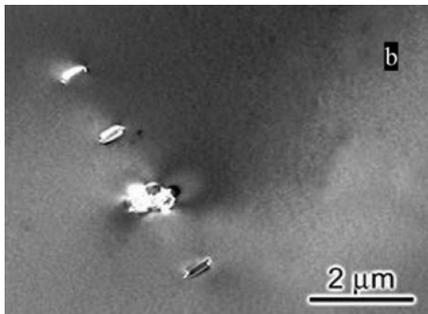
- КП генерируют дислокации
- Дислокации собирают КП



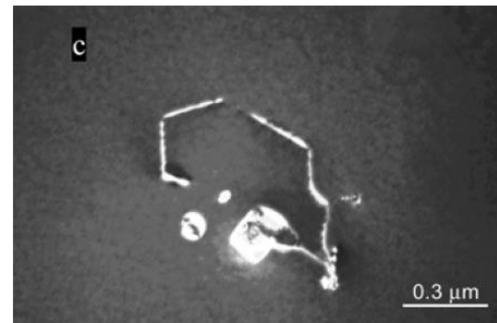
S. Pizzini, M. Guzzi, E. Grilli, G. Borionetti,
J Phys-Condens Mat. **2000**, 12, 10131-10143.



H.J. Moller, L. Long, M. Werner, D. Yang,
Physica Status Solidi a-Applied Research. **1999**, 171, 175-189.



E.A. Steinman, A.N. Tereshchenko, V.Y. Reznik, R.J. Falster, *Phys Status Solidi A.* **2007**, 204, 2238-2247



Электронные свойства КП в Si

1. Глубокие уровни (DLTS)

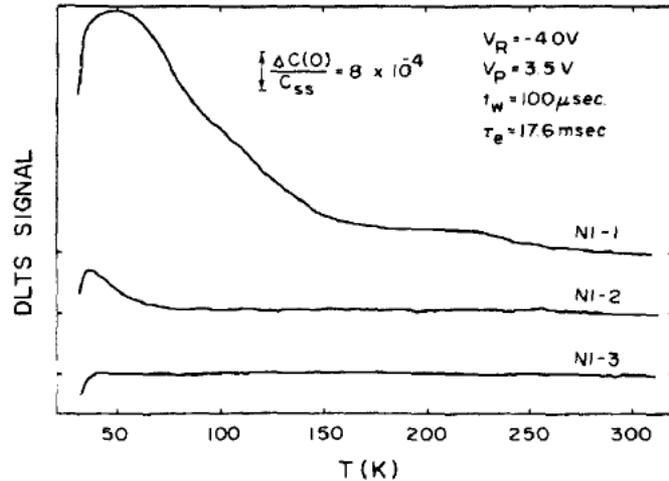


FIG. 4. DLTS spectra for group D samples (n type): two-step anneal; $750^\circ\text{C}/10\text{h O}_2 + 850^\circ\text{C}$ (N1-1), 1050°C (N1-2), and 1150°C (N1-3)/16 h O_2 .

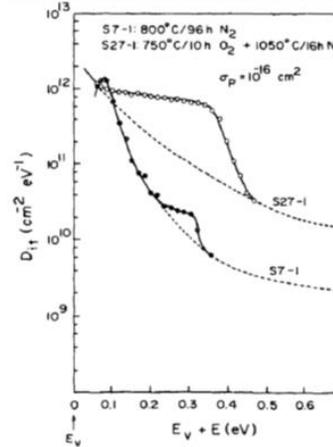


FIG. 7. Density distributions of Si/OP interface states in the lower half of band gap obtained from the DLTS spectra shown in Figs. 1 and 3 for two typical p -type samples, S7-1 and S27-1, respectively. The energy levels were determined by using Eq. (6) with the assumption of a constant capture cross section of $\sigma_p = 10^{-16}\text{ cm}^2$. The dashed curves are the extrapolated density distributions without the localized state at about $E_c + 0.3\text{ eV}$.

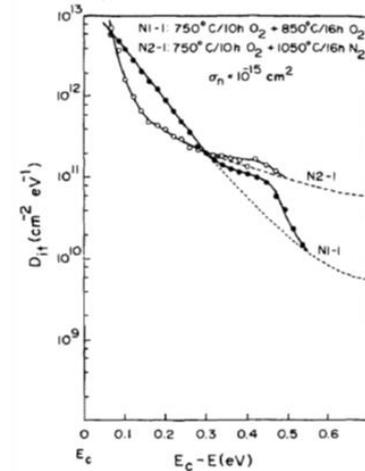


FIG. 8. Density distributions of Si/OP interface states in the upper half of band gap obtained from the DLTS spectra shown in Figs. 4 and 5 for two typical n -type samples, N1-1 and N2-1, respectively. The energy levels were determined by using Eq. (5) with the assumption of a constant capture cross section of $\sigma_n = 10^{-15}\text{ cm}^2$.

J.M. Hwang, D.K. Schroder, J Appl Phys, 59 (1986) 2476-2487.

Глубокие уровни КП могут быть мелкими с непрерывным распределением по энергии.
 $Nt_e \gg Nt_p$

Электронные свойства КП в Si

1. Глубокие уровни (DLTS)

S.S. Chan, C.J. Varker, J.D. Whitfield, R.W. Carpenter, MRS Proceedings, 46 (1985) 281-286

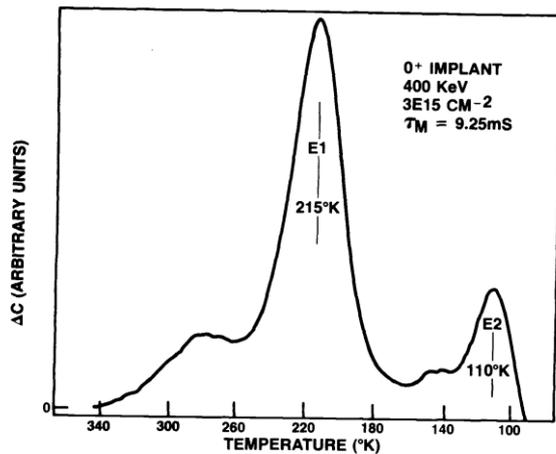
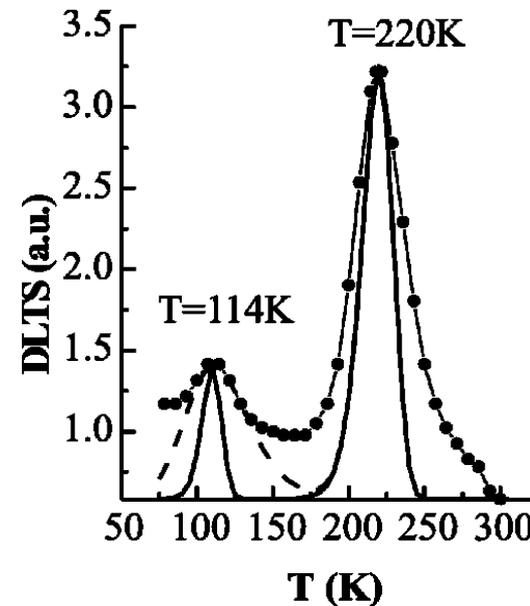


Figure 3. DLTS spectra for O⁺ implant, at 3E15 cm⁻² showing E1 and E2.

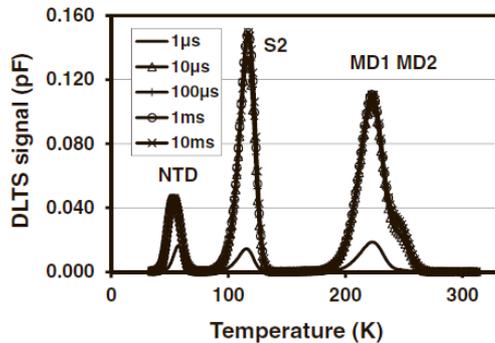
Jime'nez Tejada et al. J. Appl. Phys., Vol. 95, No. 2, 15 January 2004



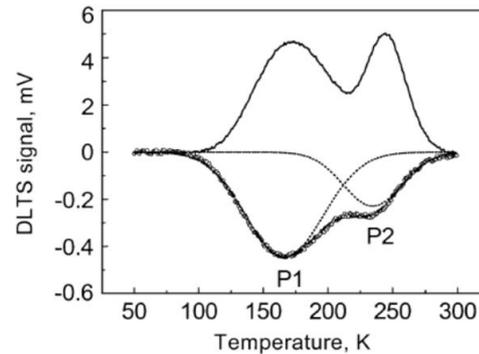
Глубокие уровни КП могут быть глубокими локальными уровнями

Электронные свойства КП в Si

1. Глубокие уровни (DLTS)



D. Kot, et al *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, **2** (1) P9-P12 (2013)



T. McHedlidze et al
J Appl Phys 1, 38 (1999) 3426-3432.

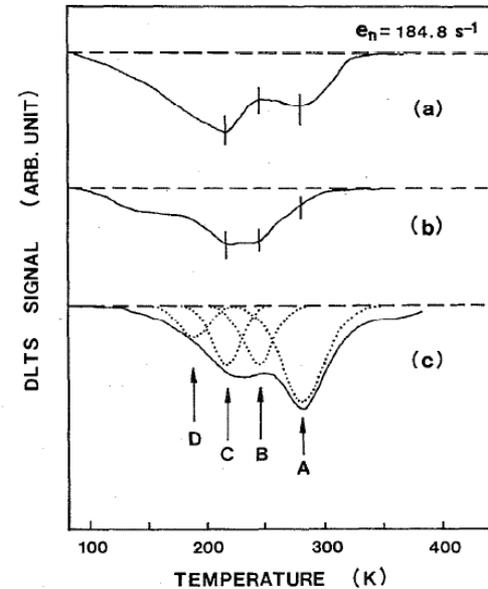


FIG. 2. DLTS spectra with 184.8 s^{-1} rate window for CZ-grown *n*-type silicon before (a) and after heat treatments. (b) and (c) represent the result for denuded zone and oxygen precipitated region of two-step annealed sample.

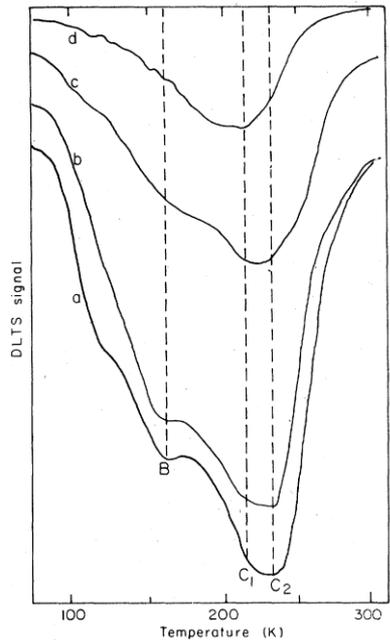
Hyeon Soo Kim, et al J. Appl. Phys., Vol. 69, 1991

Глубокие уровни КП могут быть глубокими локальными уширенными уровнями

Электронные свойства КП в Si

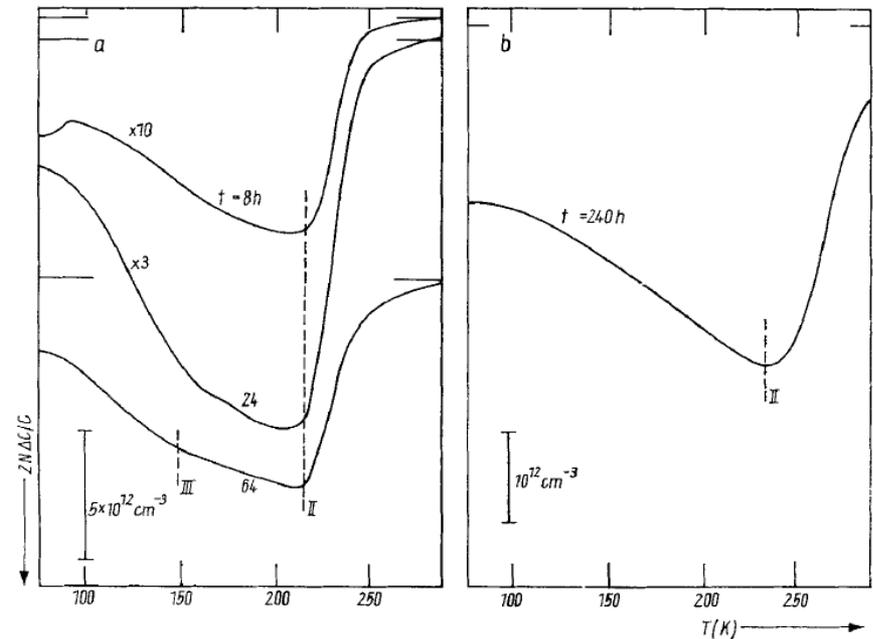
1. Глубокие уровни (DLTS)

Пластически деформированный Si



P. Omling, E.R. Weber, L. Montelius, H. Alexander, J. Michel, Phys Rev B, 32 (1985) 6571-6581

КП в Si

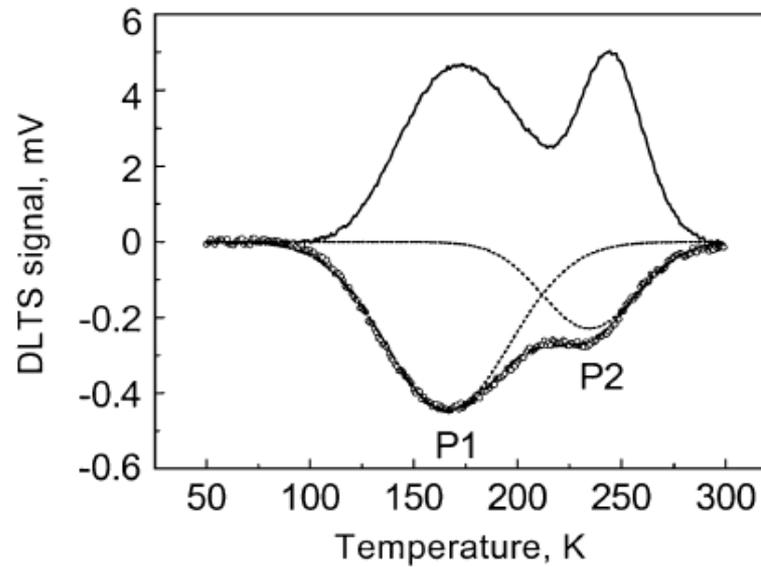


M. Koizuka, H. Yamada-Kaneta, *Journal of Applied Physics*. 1998,

DLTS спектры КП и дислокационного Si могут быть очень схожи

Электронные свойства КП в Si

1. Глубокие уровни (DLTS)



T. McHedlidze, K. Matsumoto, E. Asano, Jpn J Appl Phys 1, 38 (1999) 3426-3432.

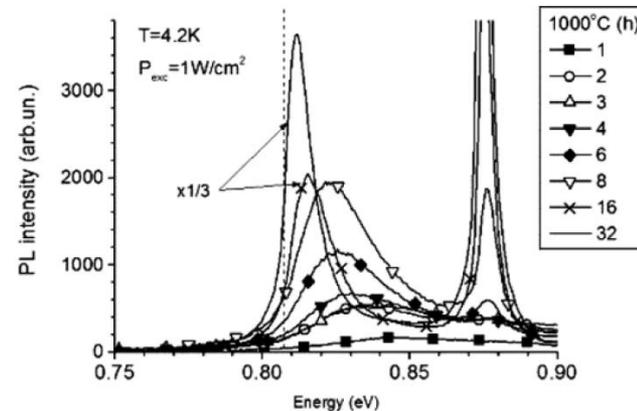
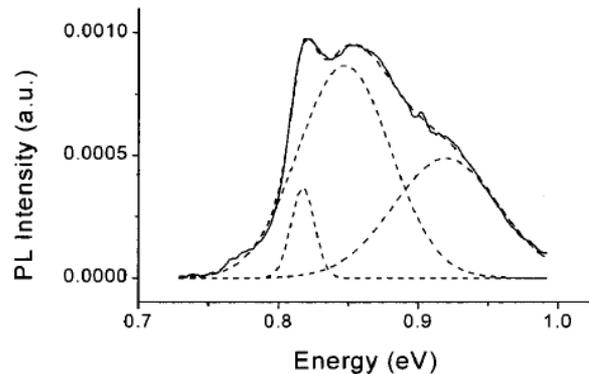
Из зависимости $N_t([OP]) \rightarrow$

P1 – пластинчатые КП, P2- дислокации (POD)

$N_{t_e} \gg N_{t_p}$

Электронные свойства КП в Si

2. Люминесценция



- [1] S. Pizzini, M. Guzzi, E. Grilli, G. Borionetti, *J Phys-Condens Mat.* **2000**, 12, 10131-10143.
[2] S. Pizzini, E. Leoni, S. Binetti, M. Acciarri, A. Le Donne, B. Pichaud, *Solid State Phenom.* **2004**, 95-96, 273-282.
[3] S. Binetti, S. Pizzini, E. Leoni, R. Somaschini, A. Castaldini, A. Cavallini, *J Appl Phys.* **2002**, 92, 2437-2445.
[4] E.A. Steinman, A.N. Tereshchenko, V.Y. Reznik, R.J. Falster, *Phys Status Solidi A.* **2007**, 204, 2238-2247.

ИТД

- Многообразие люминесцентных спектров КП
- Близость спектральных полос КП и дислокационного Si
- Различные интерпретации их природы

0,83 эВ и 0,817 – ядра

0,87 эВ – преципитаты на дислокациях

0,79 эВ – напряженные преципитаты; дислокации и

термодоноры; преципитаты, индуцирующие дислокации

0.85 и 0.78 эВ – кислородные комплексы

Электронные свойства КП в Si

Проблема установление взаимосвязи этих свойств и структуры КП

Структура

- ПЭМ

Индивидуальные
Характеристики дефектов

Электронные свойства

- $C(V)$
- $I(V)$
- DLTS
- Люминесценция

Усредненные по площади и объему
Характеристики дефектов

Наша попытка решения проблемы –
Образцы, имплантированные O^+ с подходящими энергиями, E.

Электронные свойства КП в Si

Наша попытка решения проблемы

Образцы, имплантированные O+ с подходящими энергиями, E:

- $R_p(E) \sim$ полю зрения ПЭМ

- $R_p(E) <$ ширины ОПЗ диода

→ Сопоставимость структурных данных и электронных свойств

2 серии образцов:

- 1) Вариация размера КП изменением $T_{\text{отжига}}$
- 2) Многостадийный отжиг для разделения КП и дислокаций по глубине

Методы

- ПЭМ, СПЭМ
- C(V)
- DLTS
- Катодолюминесценция

Образцы I серии, n-тип, $[P]=1-2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$

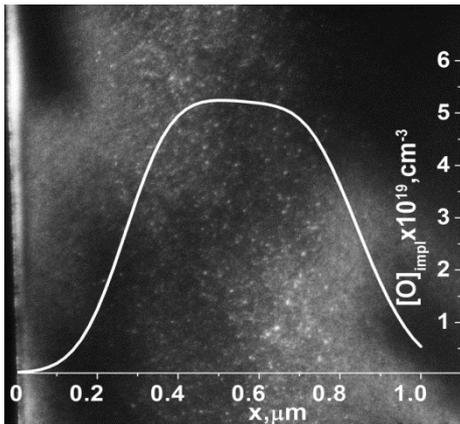
Пластина	Условия имплантации	Расчетный (S RIM) профиль распределения ионов кислорода	Условия термообработки	Образец
n-Cz-Si	Многостадийная (MS): · 350 кэВ / $1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ · 225 кэВ / $0.9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ · 150 кэВ / $0.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$		700 °C / XCA	MS-700°C
			950 °C / XCA	MS-950°C
			1100 °C / XCA	MS-1100°C
	Одностадийная (SS): · 150 кэВ / $1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$		800 °C / XCA	SS-800°C
			900 °C / XCA	SS-900°C
			1000 °C / XCA	SS-1000°C

$[O]_{\text{max}} = 2-3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} \gg [O]_{\text{исходной пластины}}$

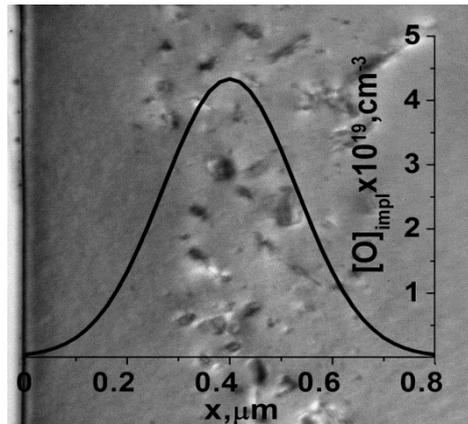
Au контакты $1,77 \text{ мм}^2$,
AlGa Омические контакты

Распределение протяженных дефектов по глубине

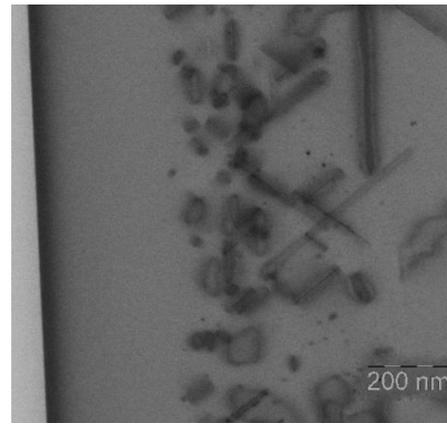
MS-700 °C



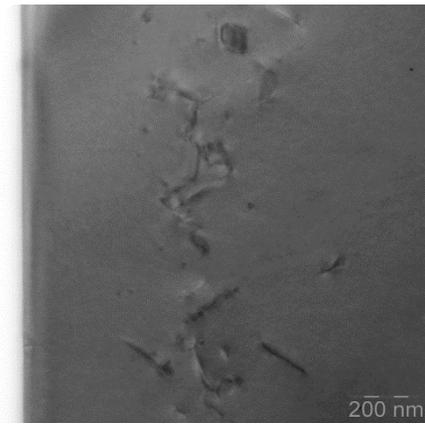
SS-800 °C



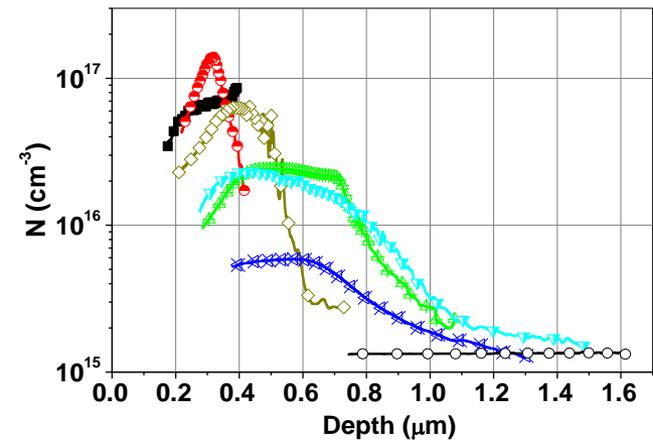
MS-950 °C



MS-1100 °C



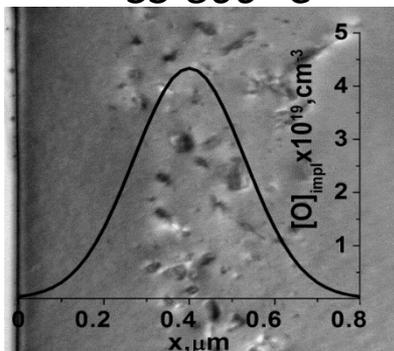
- Протяженные дефекты на глубине до 1 мкм
- Достижимая толщина ОПЗ 1.5 мкм



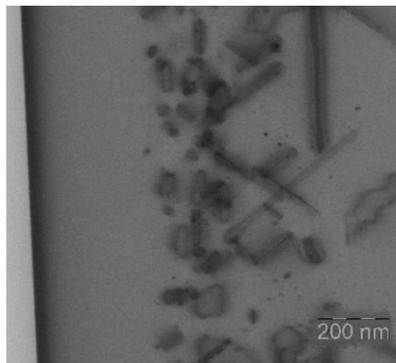
Изменение размера КП при повышении $T_{\text{отжига}}$

(из анализа ПЭМ-микрограмм по многим полям)

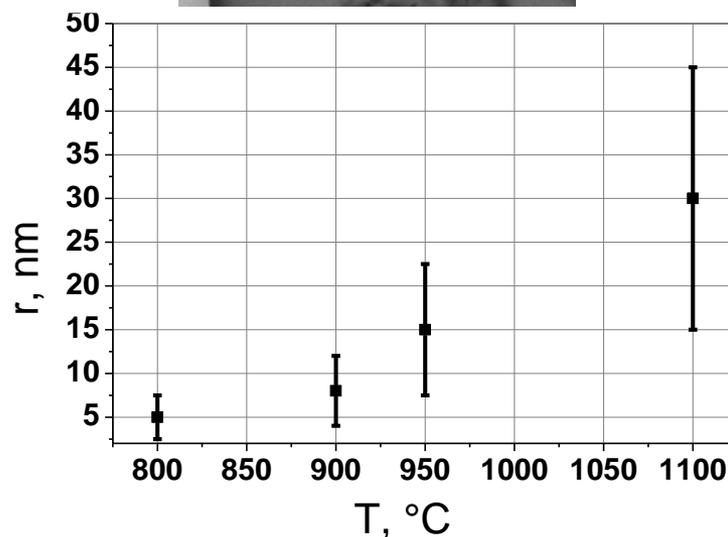
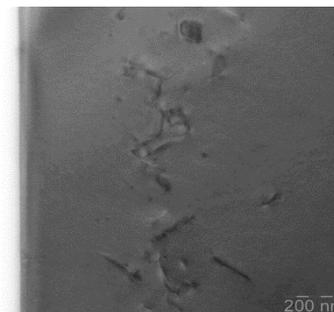
SS-800 °C



MS-950 °C

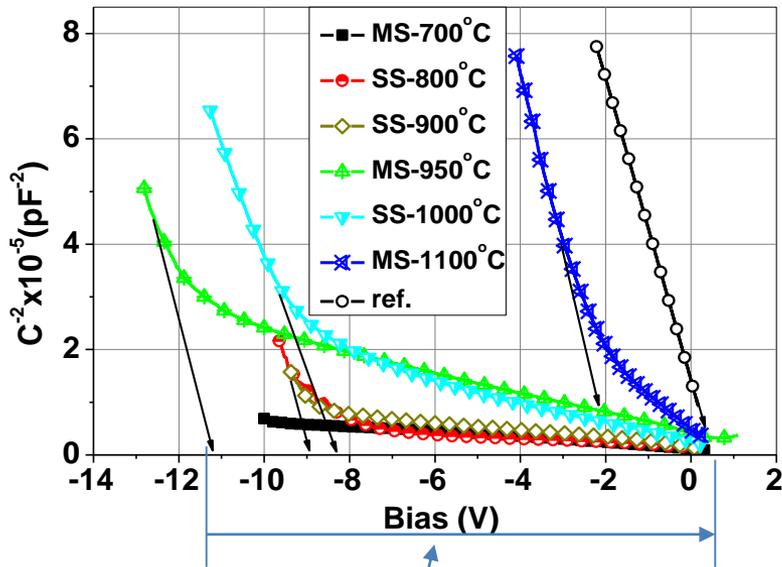


MS-1100 °C



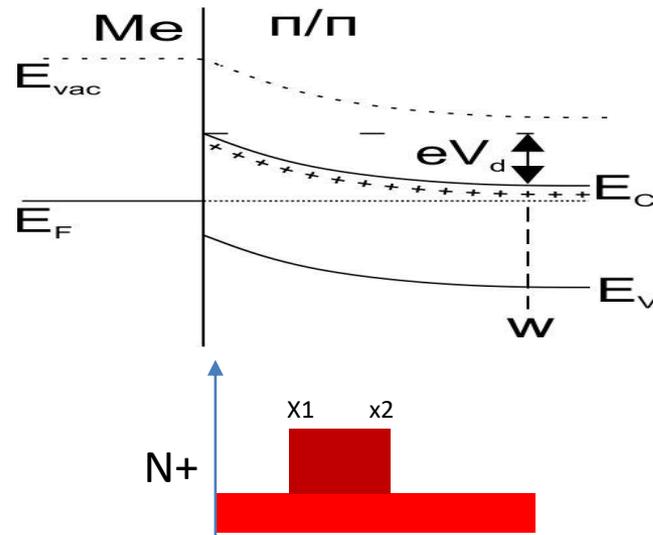
- Плотность КП падает с повышением T от 10^{15} до 10^{12} см^{-3}
- Размер КП r возрастет линейно с T (кинетическая модель роста)

Изменение встроенного напряжения



$$N_Q = \frac{\epsilon\epsilon_0\Delta V_d}{e} \left(\frac{2}{(x_2 - x_1)^2} \right).$$

1) При больших U_r – электронные уровни в ОПЗ пусты

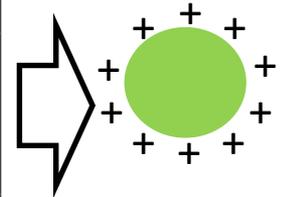
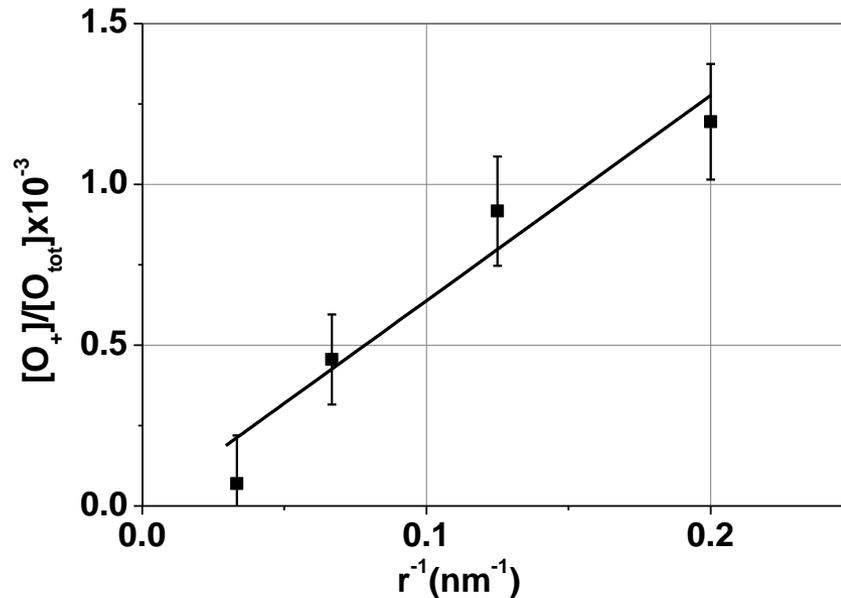
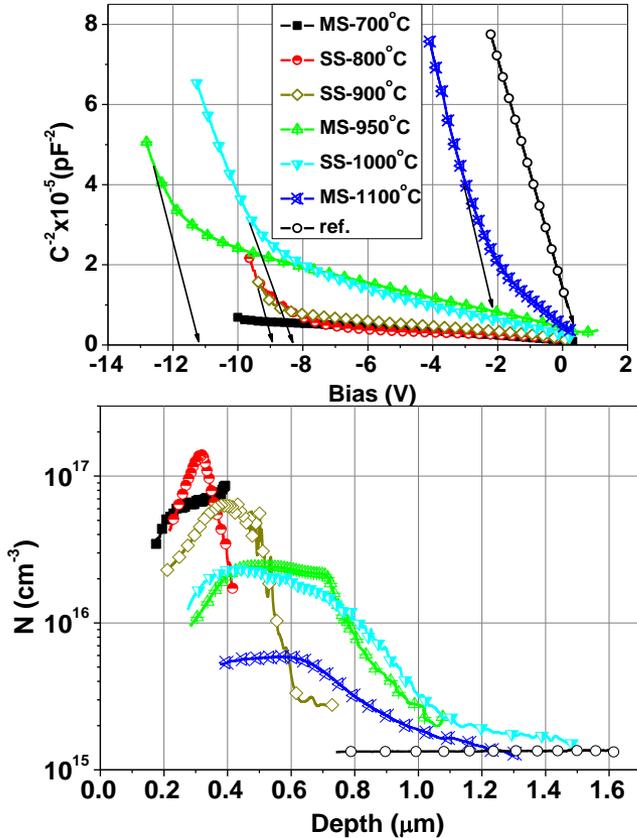


$$C = \sqrt{\frac{S^2\epsilon\epsilon_0eN_d}{2\left(V_d - V_a - \frac{kT}{e} - \frac{eN_Q(x_2 - x_1)^2}{2\epsilon\epsilon_0}\right)}}$$

Дополнительный положительный заряд в ОПЗ растет с понижением $T_{\text{отжига}}$

Зарядовое состояние

$$[O_+] = \frac{\epsilon\epsilon_0\Delta V_d}{e} \left(\frac{2}{x_2^2 - x_1^2} \right),$$



- доля «+» заряда, приходящаяся на один ион O+ обратно пропорциональна радиусу КП
- Большая часть внедренного O - нейтральна

+заряд локализован в оболочке КП

Образцы 2ой серии

Связь внутренней структуры и электрофизических характеристик – исследование больших преципитатов

Пластина (100)	Условия имплантации	Расчетный (SRIM) профиль распределения ионов кислорода	Условия термообработки	Образец
n-Cz-Si	Многостадийная (MS): · 350 кэВ / $1.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$ · 225 кэВ / $0.9 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$ · 150 кэВ / $0.7 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$		1) 1000 °C / 15 min / Ar	MS-n4
p-Cz-Si			2) 650 °C / 7 h / Ar	MS-p4
n-Cz-Si			3) 800 °C / 4 h / Ar	MS-n3
p-Cz-Si			4) 1000 °C / 6 h / XCA	MS-p3
			1) 650 °C / 7 h / Ar	MS-n3
			2) 800 °C / 4 h / Ar	MS-p3
			3) 1000 °C / 6 h / XCA	

$[O]_{\text{max}} = 2-3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3} \gg$
 $[O]_{\text{исходной пластины}}$.

$p^+ - n$ и $n^+ - p$ переходы → Газофазная эпитаксия
 Омические контакты →

Сравнение ПЭМ, ВИМС, SRIM

прорастающие дислокации (ПД), структурные дефекты (СД) и КП

SRIM(z), SIMS(z) ~ плотности СД+КП

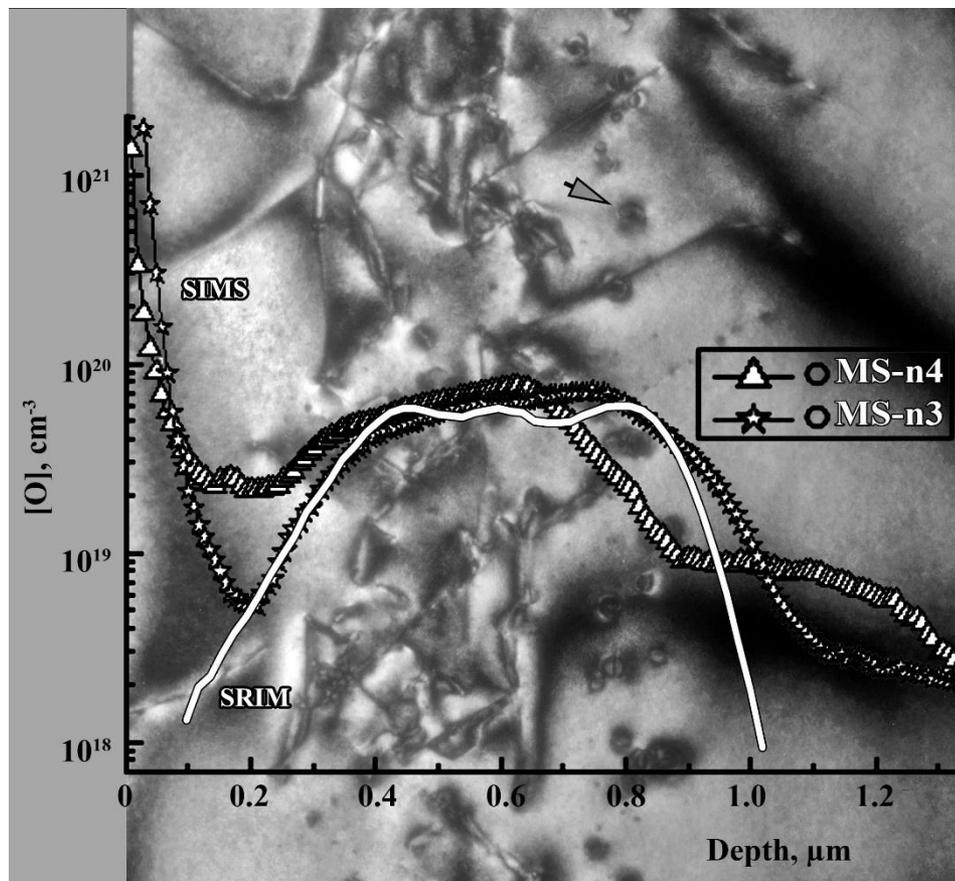
+прорастающие дислокации у поверхности $\sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$
(релаксация напряжений)

Кислородные преципитаты

MS-n3 $\sim 0.9 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

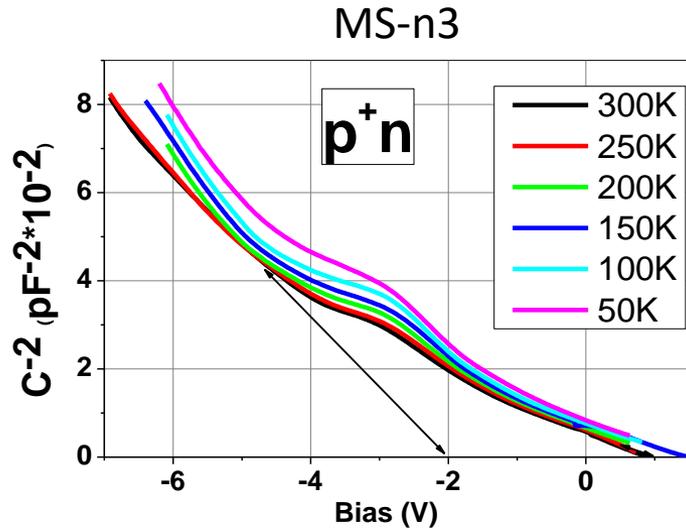
MS-n4 $\sim 1.2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

$R(\text{MS-n3}) > R(\text{MS-n4})$

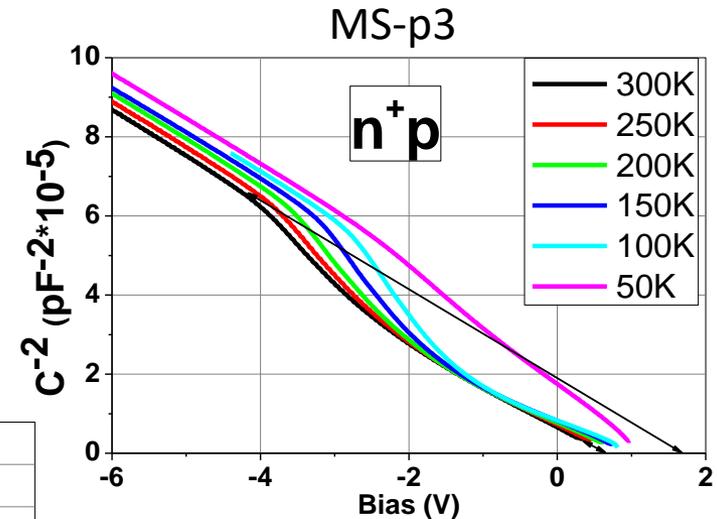
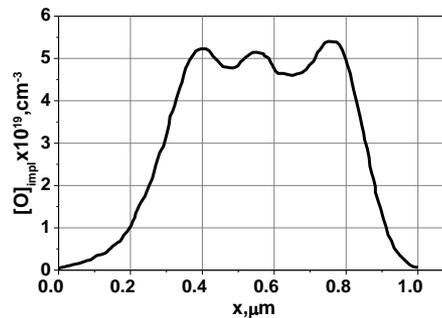


Глубина и размеры слоев позволяют их отдельно исследовать при вариации U_{diode}

Полный заряд дефектной области



$5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

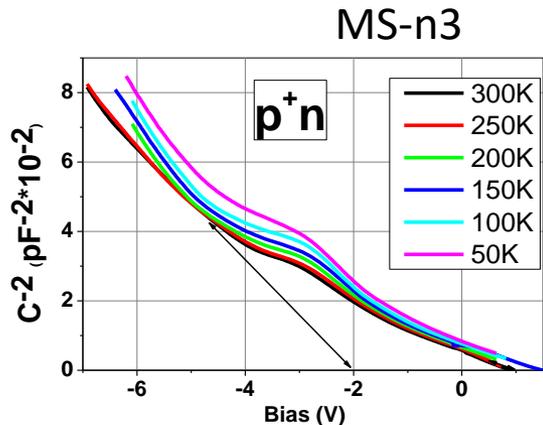


$1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

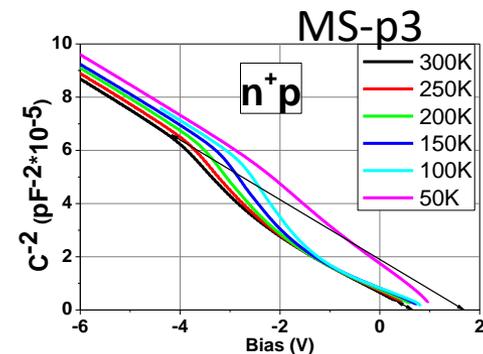
$$N_Q = \frac{\epsilon \epsilon_0 \Delta V_d}{e} \left(\frac{2}{x_2^2 - x_1^2} \right),$$

- «+» заряд высокой плотности в области имплантации как в n-, так и в p-типе кремния

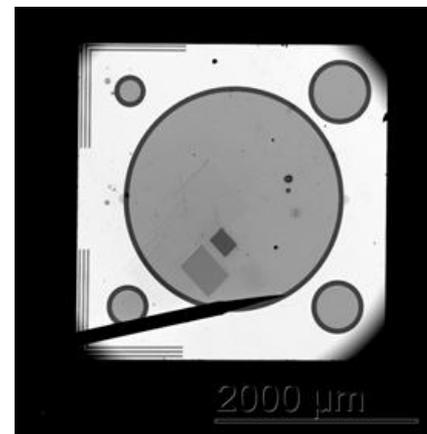
Зарядовое состояние дефектов



$$N_Q = \frac{\epsilon \epsilon_0 \Delta V_d}{e} \left(\frac{2}{x_2^2 - x_1^2} \right),$$



EBIC



- в p-типе кремния – дефектная область образует канал n-типа
- «+» заряд высокой плотности в области имплантации

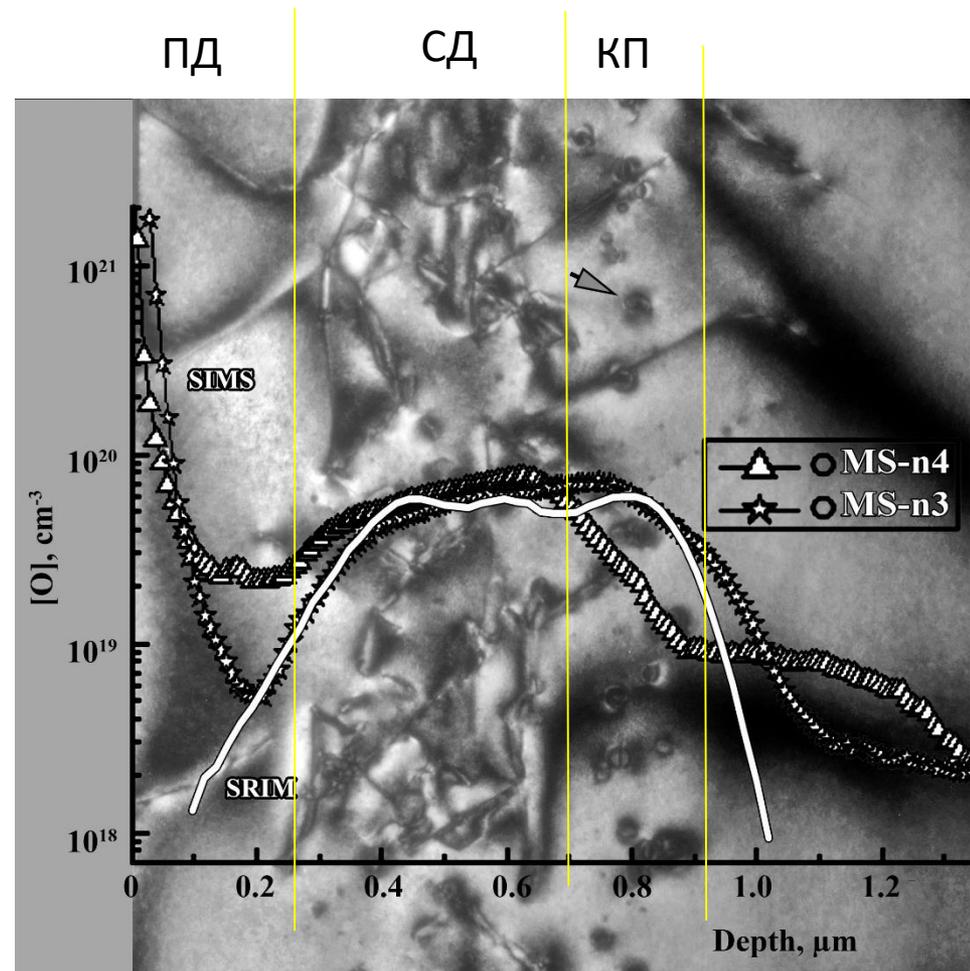
Послойное разделение 3х типов дефектов

прорастающие дислокации (ПД), структурные дефекты (СД) и КП

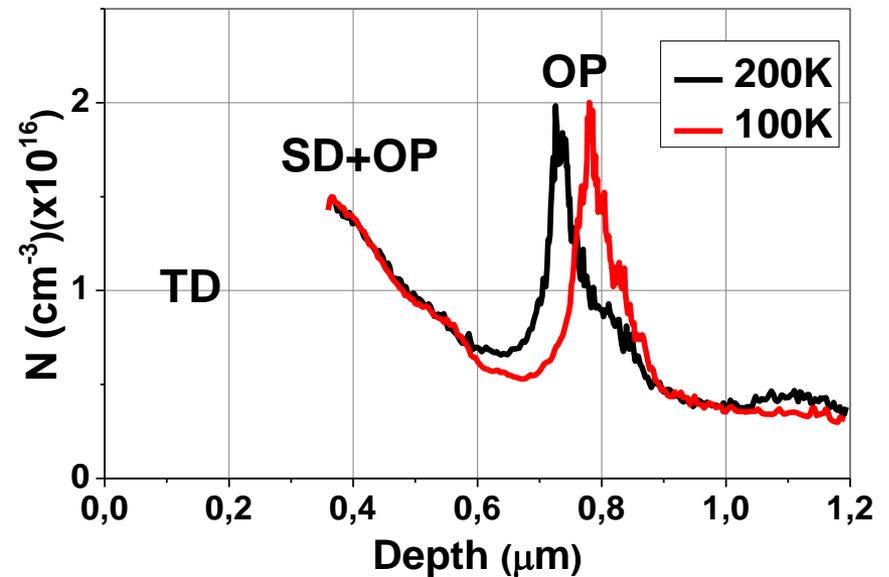
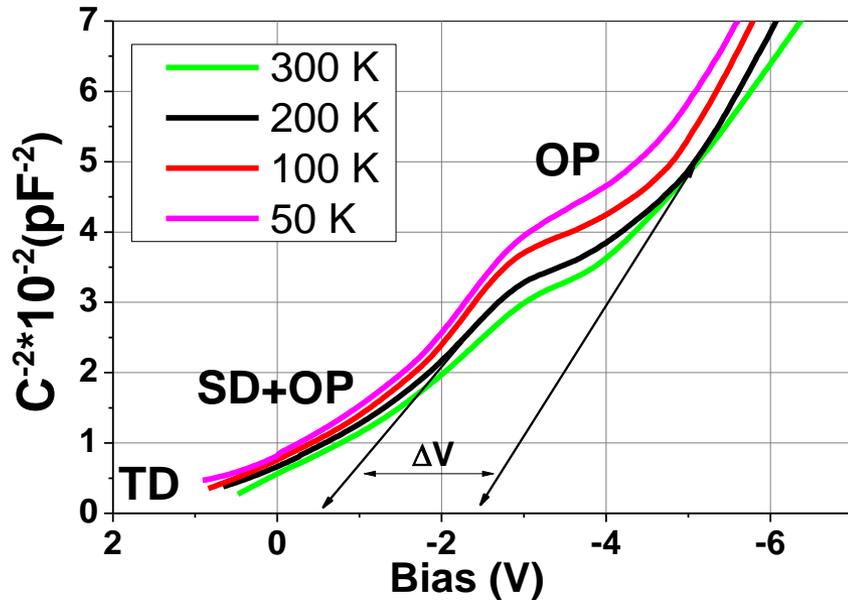
ПД $\sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

КП $\sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

Слой КП на тыльной стороне,
слой ПД – поверхности
хорошо отделены от области СД



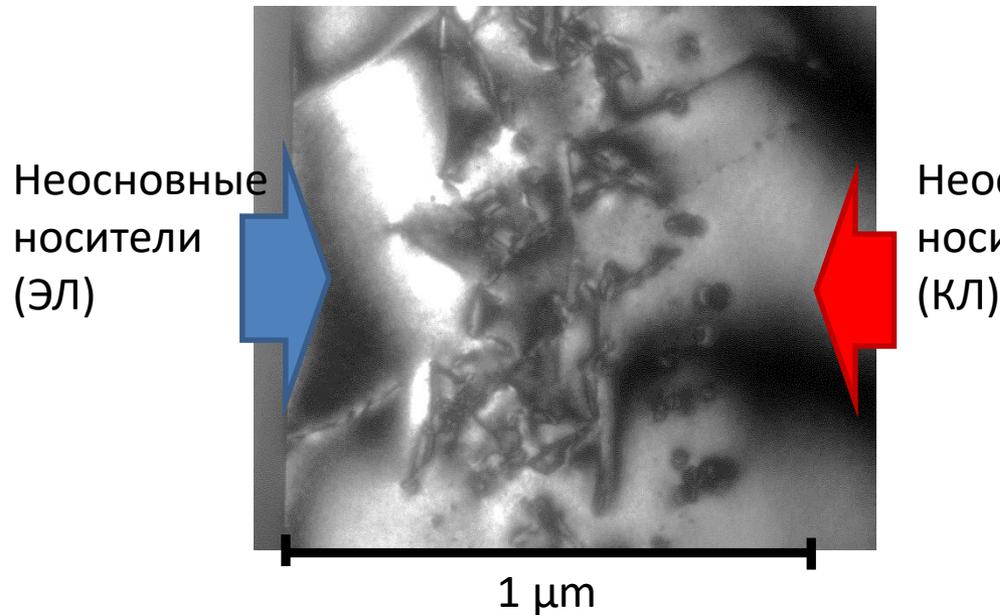
Оценка заряда кислородных преципитатов



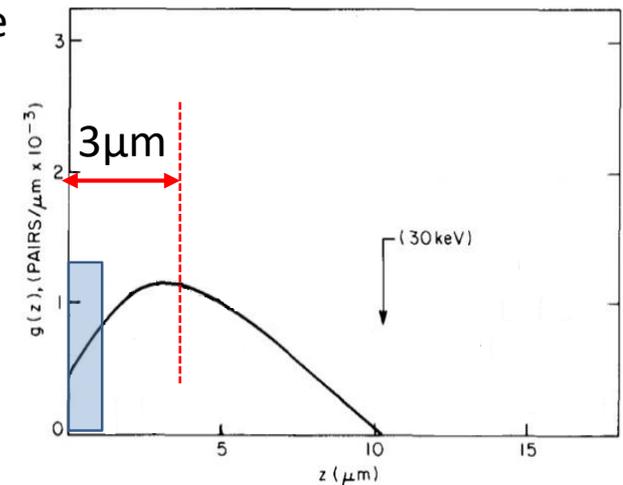
$$N_S = \frac{\epsilon \epsilon_0 \Delta V_d}{x_0 e} = 2 * 10^{11} \text{cm}^{-2} \quad N_p = 10^{10} \text{cm}^{-2}$$

- Заряд 1 преципитата примерно равен 20 элементарным зарядам

Электро- (ЭЛ) и Катодолюминесценция



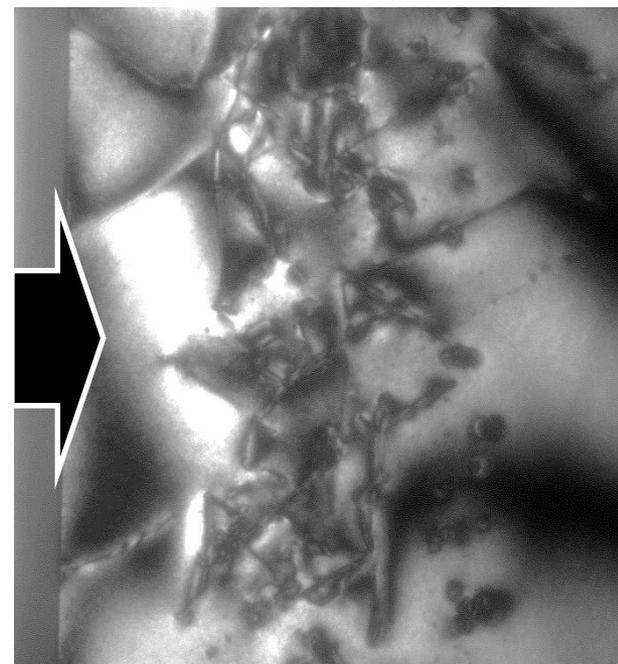
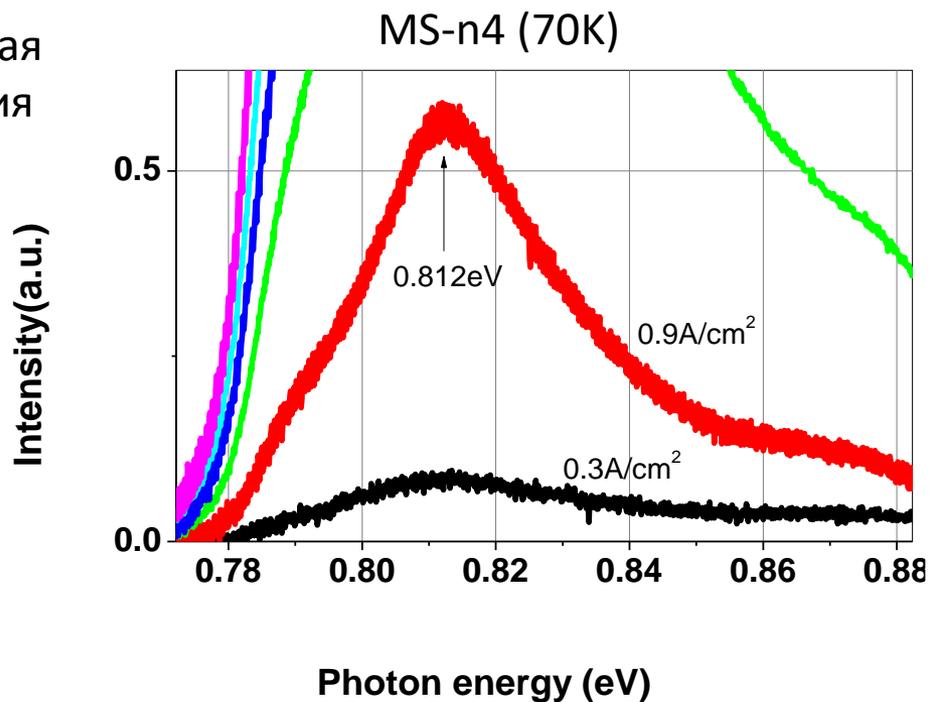
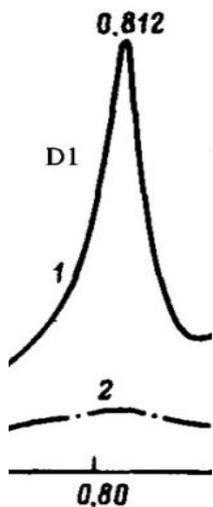
Максимум генерации КЛ-
глубже, чем дефектная область



Leamy H. J. Charge collection scanning electron-microscopy // Journal of Applied Physics. – 1982. – Т. 53, № 6. – С. R51-R80.

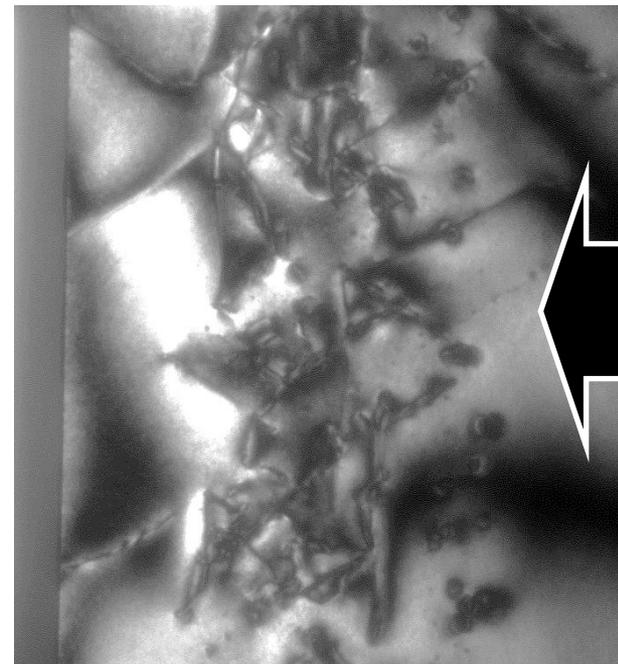
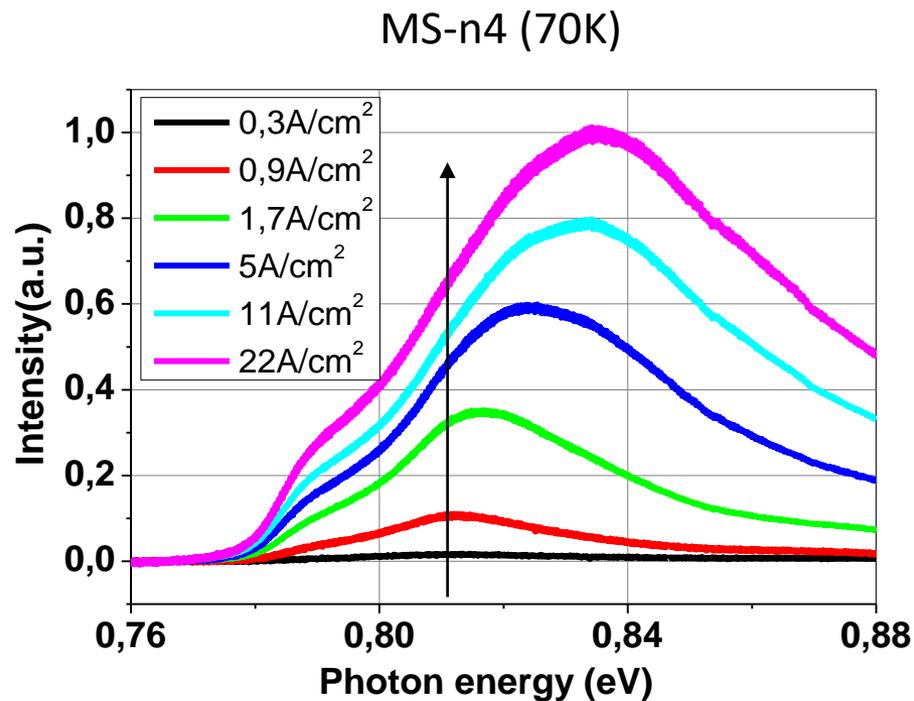
Электролюминесценция

Дислокационная
люминесценция



- Дислокационная линия D1 доминирует
- Линия 0,79 эВ + полоса E>0.82eV

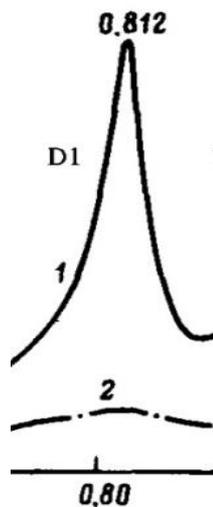
Катодолюминесценция



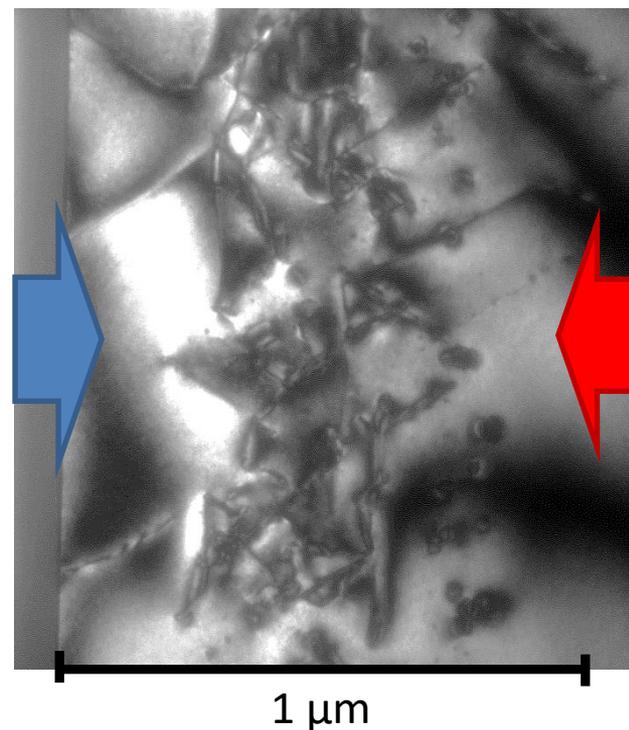
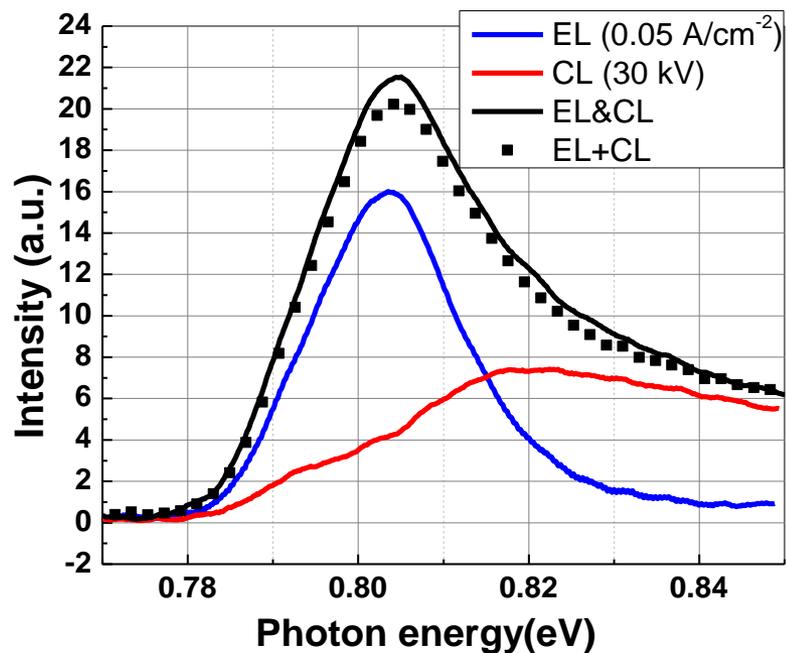
- D1 и 0,79 эВ – при малых накачках
- Сдвиг полосы $E > 0.82 \text{ eV}$ в высокоэнергетичную сторону с увеличением накачки – свойство рекомбинации через КП?

Электро- + катодолюминесценция

Дислокационная люминесценция

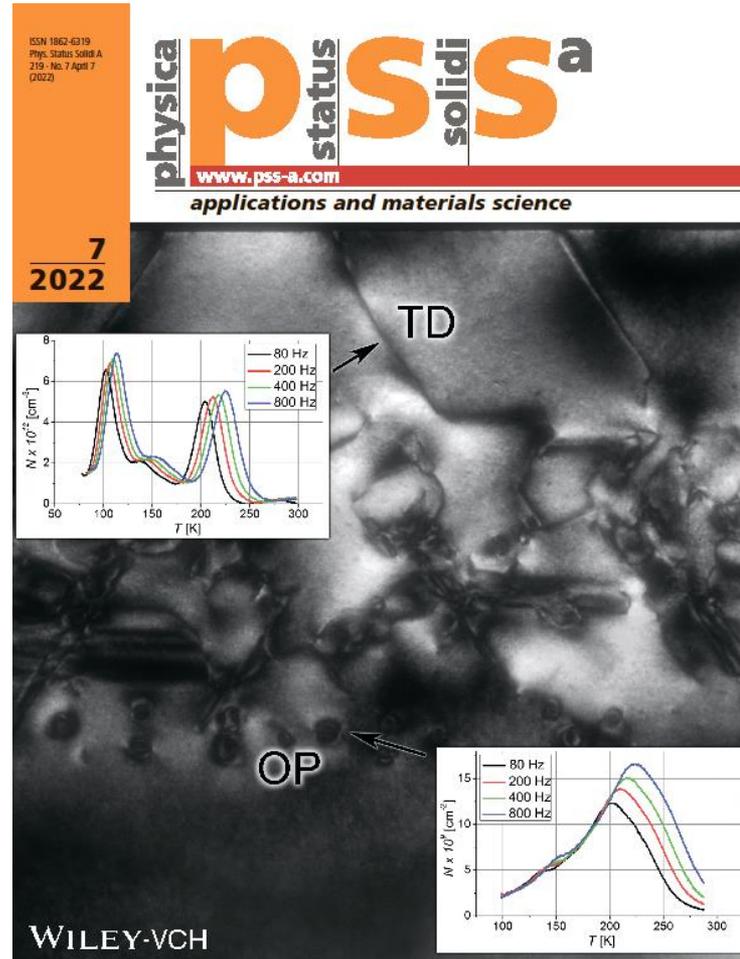


MS-n4 (70K)

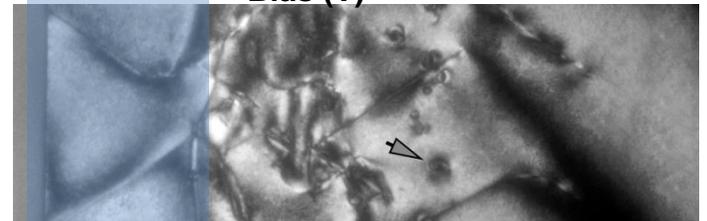
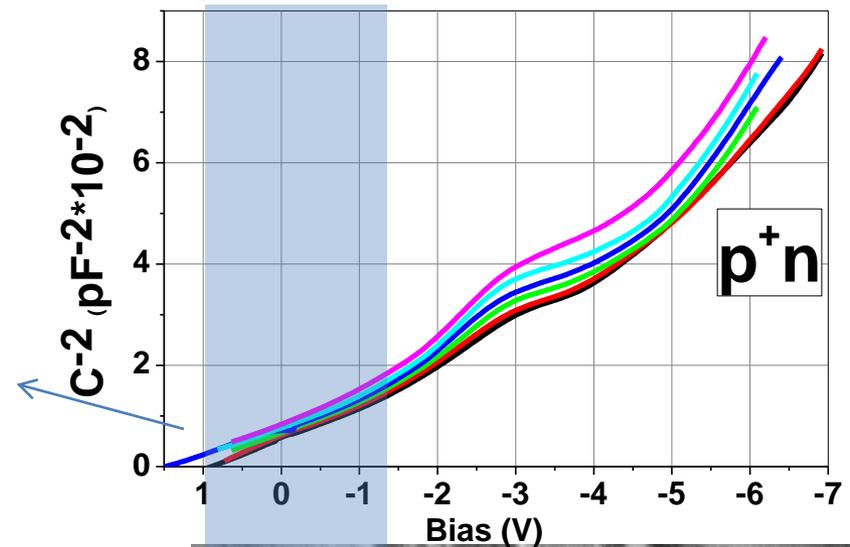
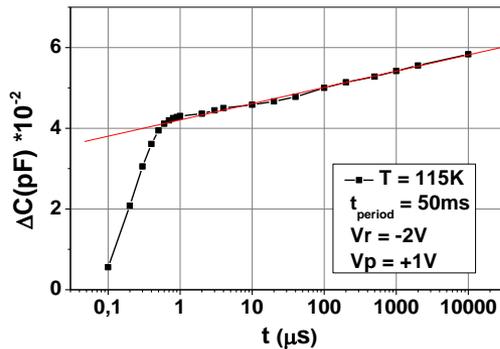
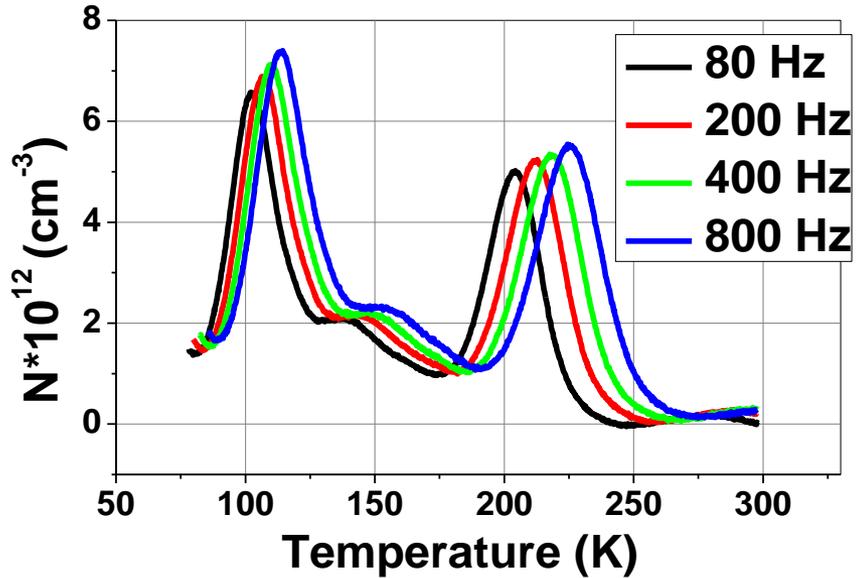


- Люминесцентная полоса 0,82 эВ – 0,84 эВ - рекомбинация с участием состояний больших КП
- Линия 0,79 эВ – кислородсодержащие дефекты у дислокаций

Особенности электронной эмиссия с +заряженных КП

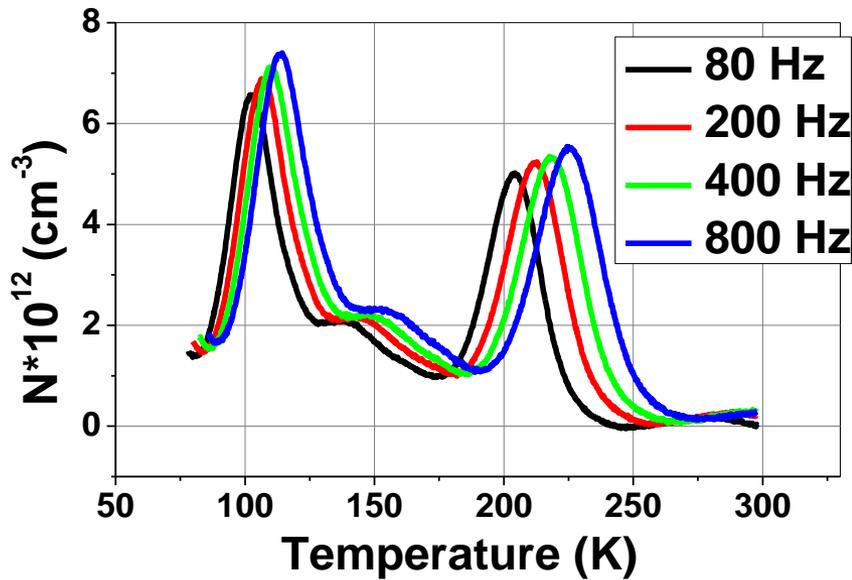


DLTS прорастающих дислокаций



- Классическое поведение при вариации окна скоростей
- Логарифмическая зависимость кинетика захвата

DLTS прорастающих дислокаций

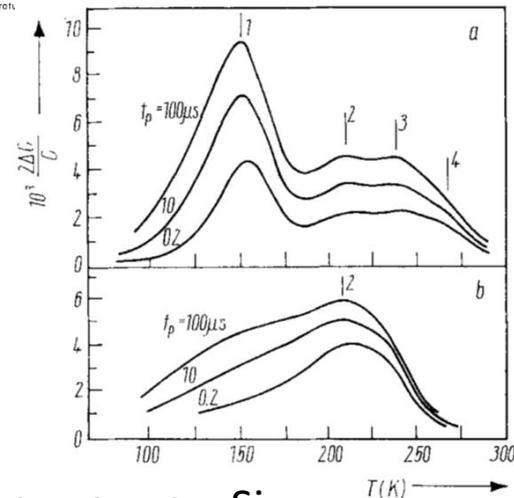
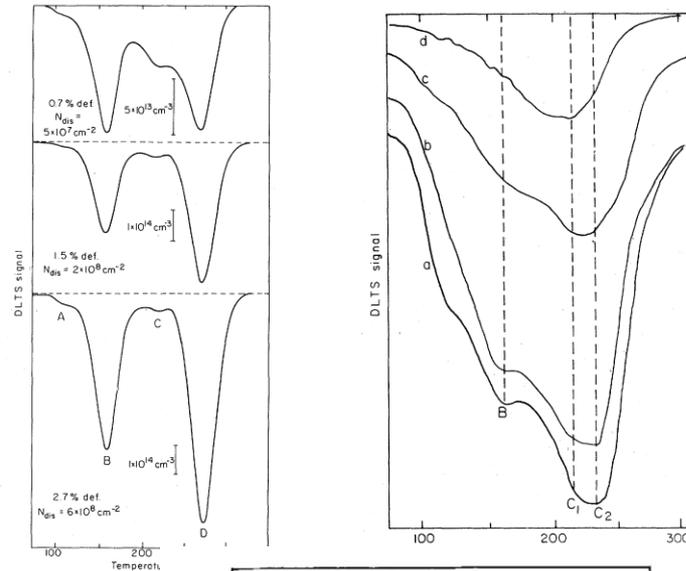


$$E_c - 0.18 \text{ эВ}, \sigma = 3 \times 10^{-15} \text{ см}^2$$

$$E_c - 0.39 \text{ эВ}, \sigma = 1.2 \times 10^{-15} \text{ см}^2$$

P. Omling, E.R. Weber, L. Montelius, H. Alexander, J. Michel, *Phys Rev B*. **1985**, 32, 6571-6581.

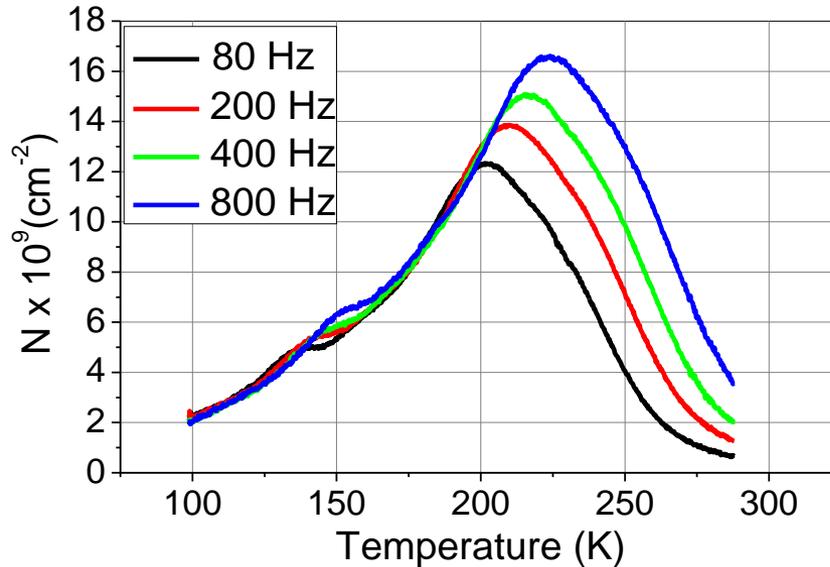
V.V. Kveder, Y.A. Osipyan, W. Schroter, G. Zoth, *Physica Status Solidi a - Applied Research*. **1982**, 72, 701-713



Совпадение с некоторыми линиями в дислокационном Si

DLTS сигнал кислородных преципитатов

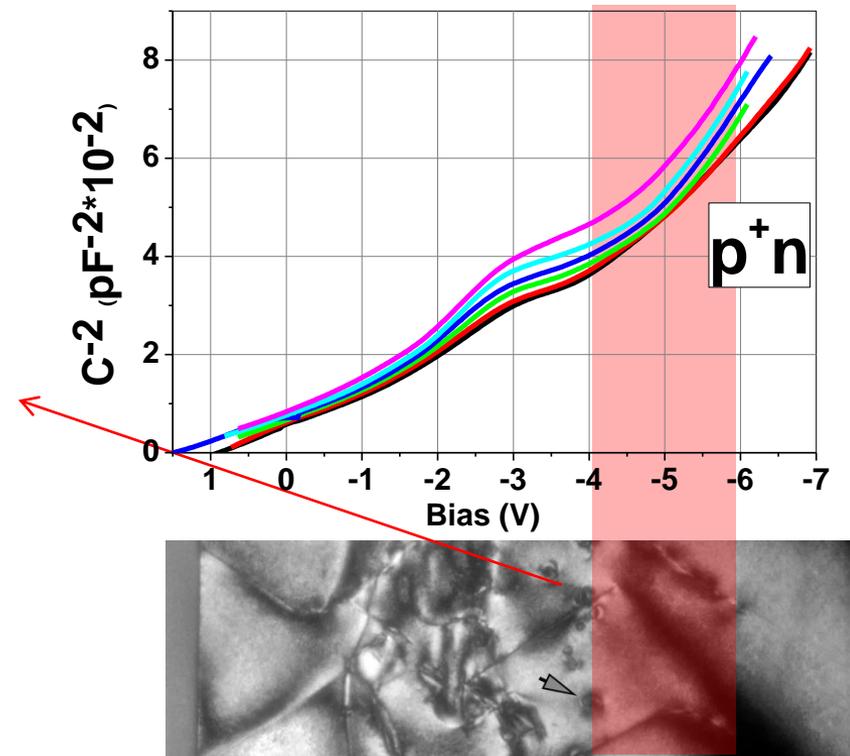
MS-n4



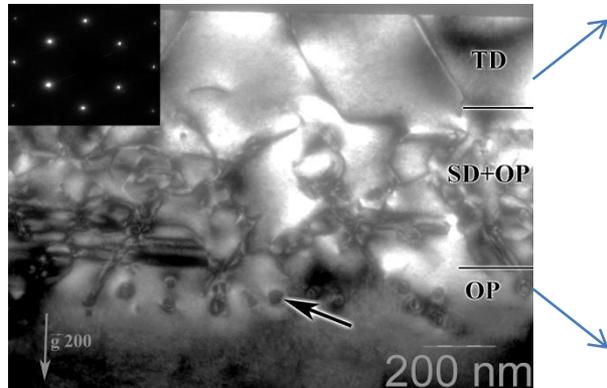
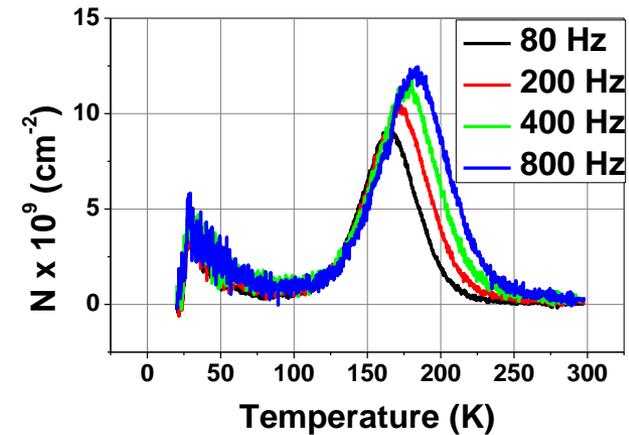
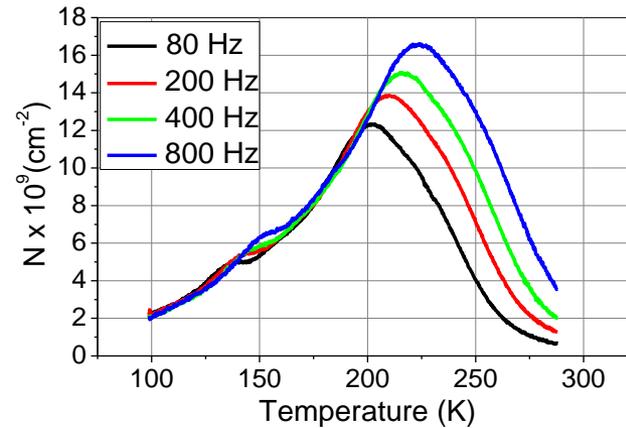
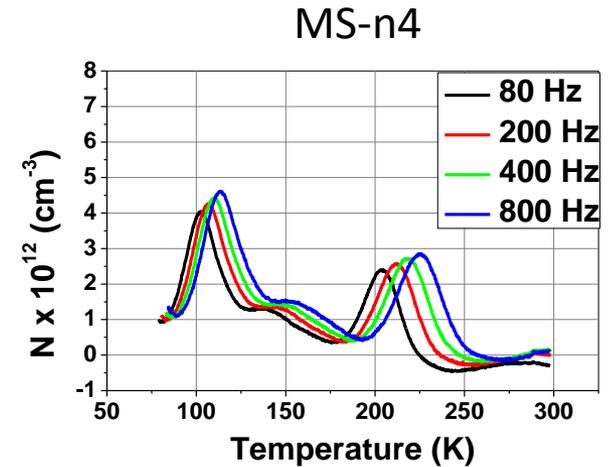
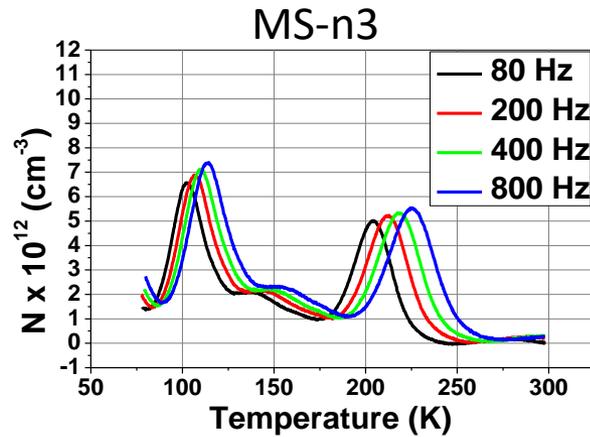
$$N = N_d \frac{(S \epsilon \epsilon_0)^2 \Delta C}{x_0 C^3}$$

$E_c - 0.38$ эВ, $\sigma = 1,7 \times 10^{-15}$ см²

- Независимость низкотемпературного (НТ) фронта пика от окна скоростей



DLTS спектры двух различных образцов



- Т-положение и форма пика КП различна в двух образцах
- Независимость НТ фронта пика от окна скоростей= свойство КП

Кинетика термоэлектронной эмиссии с ГУ

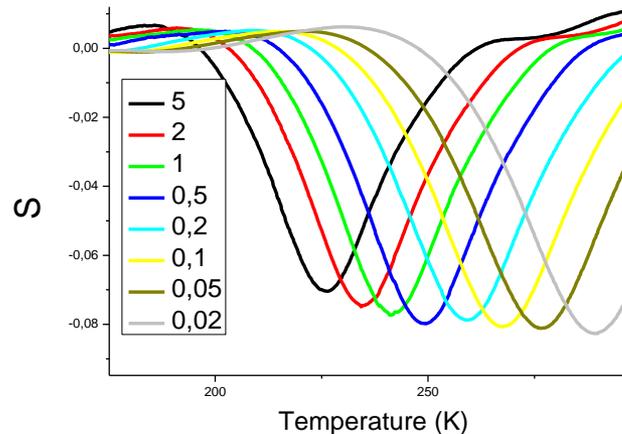
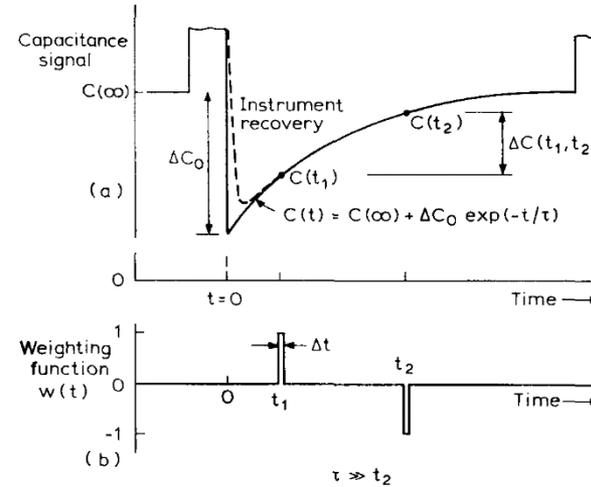
Классический вариант

$$n_1(t) = N_1 \exp(-e_n t)$$

$$\frac{1}{\tau} = e_n(T) = \gamma T^2 \sigma e^{-\frac{E_a}{kT}}$$

$$S = C(t_1) - C(t_2) = \Delta C_0 \left(e^{-\frac{t_1}{\tau}} - e^{-\frac{t_2}{\tau}} \right)$$

$$\frac{t_2}{t_1} = a = \text{const}$$



Кинетика термоэлектронной эмиссии с ГУ

Независимость сигнала DLTS от $\frac{t_2}{t_1} = a = \text{const}$

$$S = C(t_1) - C(t_2) = C(t_1) - C(at_1)$$

S не зависит от t_1

только для логарифмической кинетики

$$C \approx \ln(t)$$

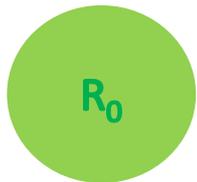
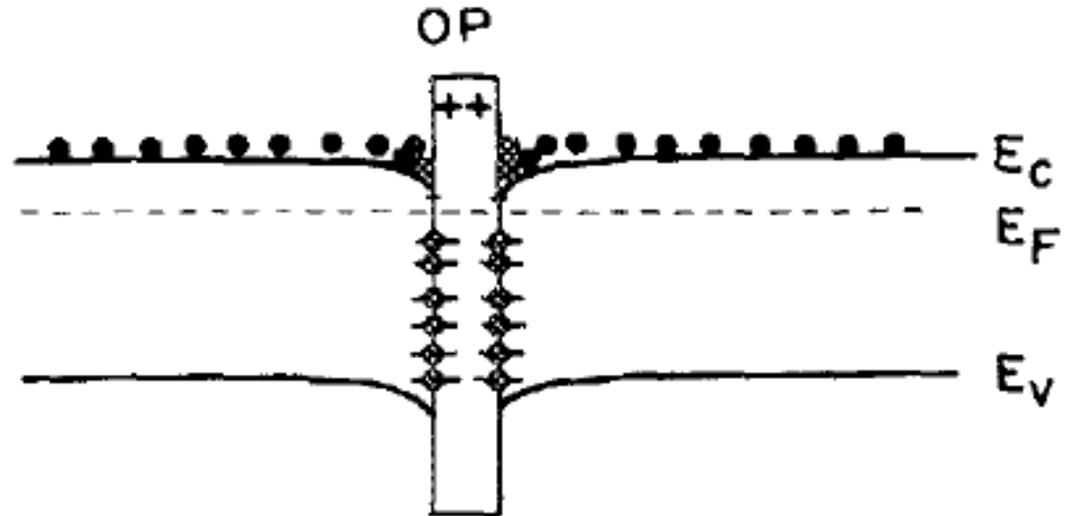
$$S \approx -\ln(a)$$

Модель. Экранированный кулоновский потенциал

$$Z = 20$$

$$U = \frac{qZ}{4\pi\epsilon r} e^{-r/L_D}$$

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon kT}{q^2 n}}$$



$$U = \frac{qZe^{-(r-R_0)/L_D}}{4\pi\epsilon r (R_0 / L_D + 1)}$$

R = 25 nm

n = 10¹⁵ cm⁻³



Юкава

U(R₀) = 160 to 180 meV

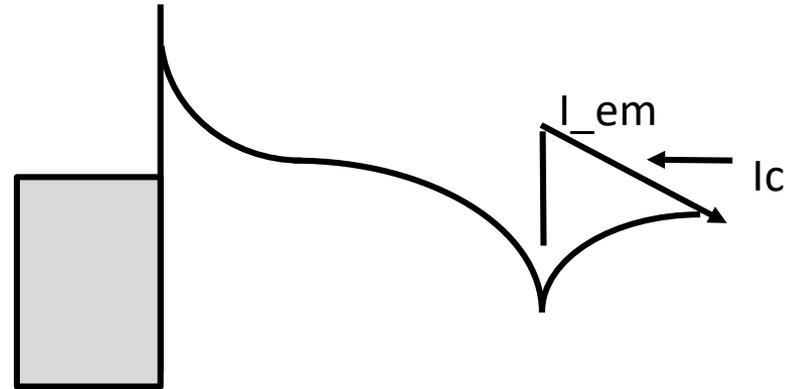
Кулон

U(R₀) = 200 meV

Экранированный кулоновский потенциал

$$U = \frac{qZe^{-(r-R_0)/L_D}}{4\pi\epsilon r(R_0/L_D + 1)}$$

$$E(R_0) = 1.3 \times 10^{-8} \frac{Z}{R_0^2} (V/cm)$$



($R_0 = 25 \text{ nm}$) $E(R_0) = 8 \cdot 10^3 Z (V/cm)$

($Z = 20$)

$E \sim 10^5 \text{ V/cm} \Rightarrow$ Яма в любой точке ОПЗ

Для сферического преципитата $R_0 = 25 \text{ nm}$ поверхность $7 \times 10^{-11} \text{ cm}^2$

($Z \sim 20$) соответствует $N_s = 0,4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

$$N_s (\text{Si/SiO}_2) \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$$

Упрощенная модель. Кулоновский потенциал

Электроны на интерфейсе -> неэкранированный Кулон

Плотность состояний растёт к зоне проводимости (Si-SiO₂)

Энергия активации термоэмиссии с интерфейсных состояний пренебрежимо мала

$$\Delta U(t) = \alpha(Z - N(t))$$

$$\frac{dN}{dt} = -\nu N \exp\left\{-\frac{\Delta U}{kT}\right\}$$

$$\alpha = \frac{q}{4\pi\epsilon R_0}$$

$$\nu = \sigma_n v_{th} N_c \exp(-E_{em} / kT)$$

Большие заполнения- низкие T

$$t = 0, N = N_0$$

$$t = t, N(t) \longrightarrow$$

$$N(t) = N_0 - \frac{kT}{\alpha} \ln\left(1 + \frac{\alpha\nu N}{kT} \exp\left\{-\frac{\alpha(Z - N_0)}{kT}\right\} t\right)$$

Логарифмическая кинетика

Малые заполнения- высокие T

$$\alpha N \ll kT \longrightarrow$$

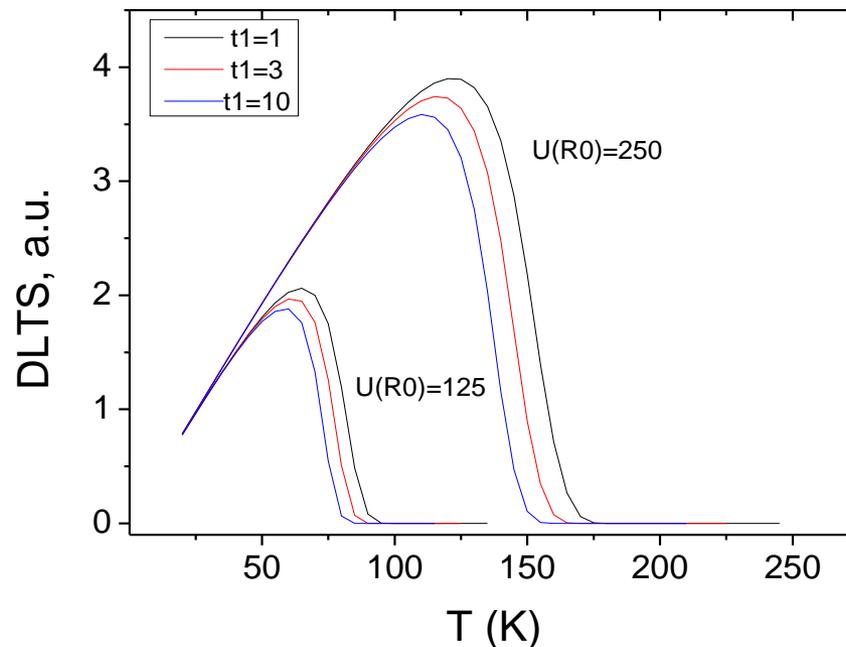
$$N = \frac{N_0 \exp\left(-\nu \exp\left\{-\frac{\alpha Z}{kT}\right\} t\right)}{1 + \frac{\alpha N_0}{kT} \left[1 - \exp\left(-\nu \exp\left\{-\frac{\alpha Z}{kT}\right\} t\right)\right]}$$

экспоненциальная кинетика

Упрощенная модель. Кулоновский потенциал. Численное решение кинетического уравнения

$$\frac{dN}{dt} = -vN \exp \left\{ -\frac{\alpha(Z - N(t))}{kT} \right\}$$

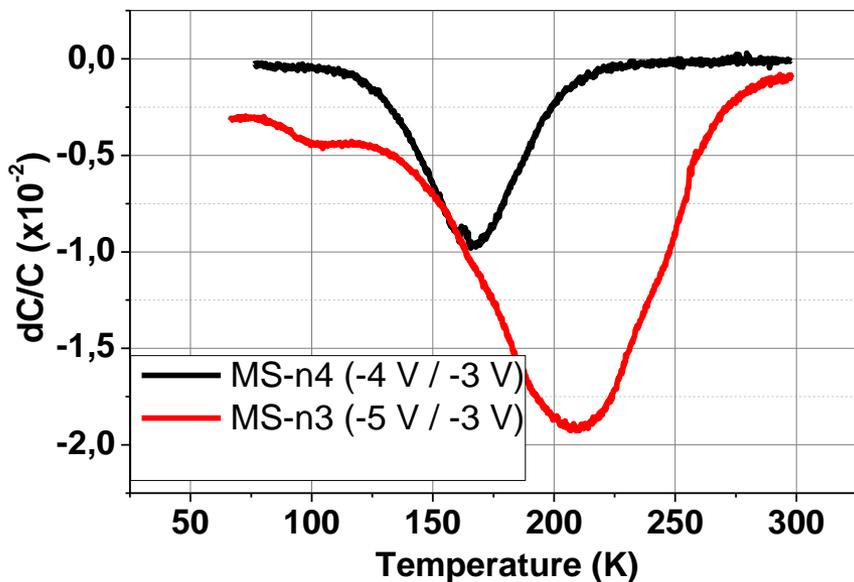
$t_2/t_1=10$



$$U(R_0) = \frac{qZ}{4\pi\epsilon R_0}$$

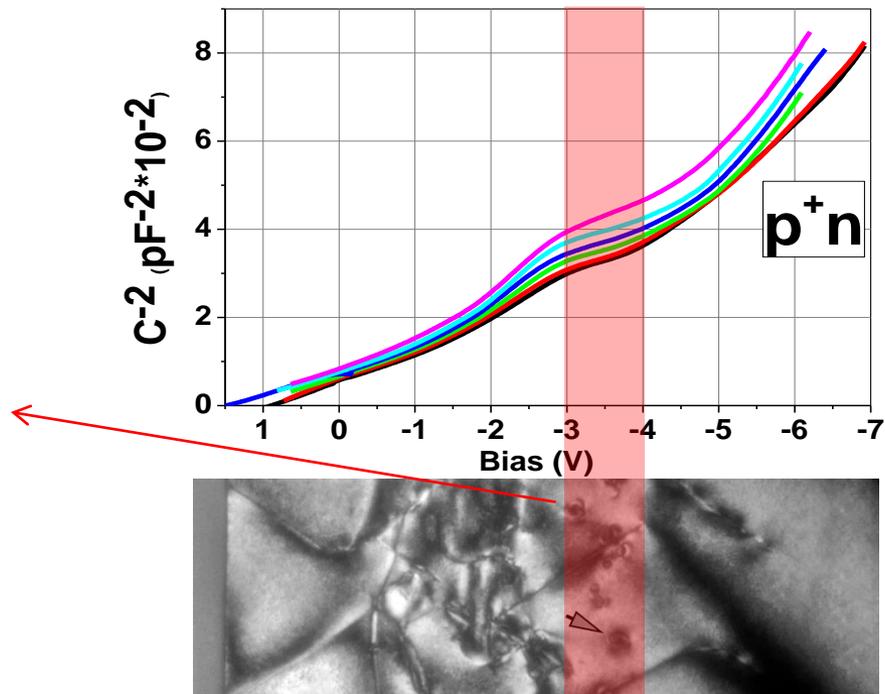
- Независимость HT фронта пика от окна скоростей
- Классическое поведение при $T > T_{DLTS_max}$
- E_t из плота Аррениуса совпадает с $U(R_0)$
- Положение пика и E_t зависит от полного встроенного +заряда КП

DLTS сигнал КП в двух образцах, различающихся по режиму термообработки



$$E_c - 0.29 \text{ эВ}, \quad \sigma = 5 \times 10^{-16} \text{ см}^2$$

$$E_c - 0.37 \text{ эВ}, \quad \sigma = 2 \times 10^{-16} \text{ см}^2$$



- В образце с более крупными КП энергии активации DLTS пика больше

$$U(R_0) = \frac{q4\pi N_s R_0^2}{4\pi\epsilon R_0} = \frac{qN_s R_0}{\epsilon}$$

Уточнение модели. Кулоновский потенциал. Численное решение кинетического уравнения

- Температурная зависимость сечения захвата интерфейсных состояний

$$\sigma_n = \sigma_t + \sigma_\infty \exp(-E_b / kT)$$

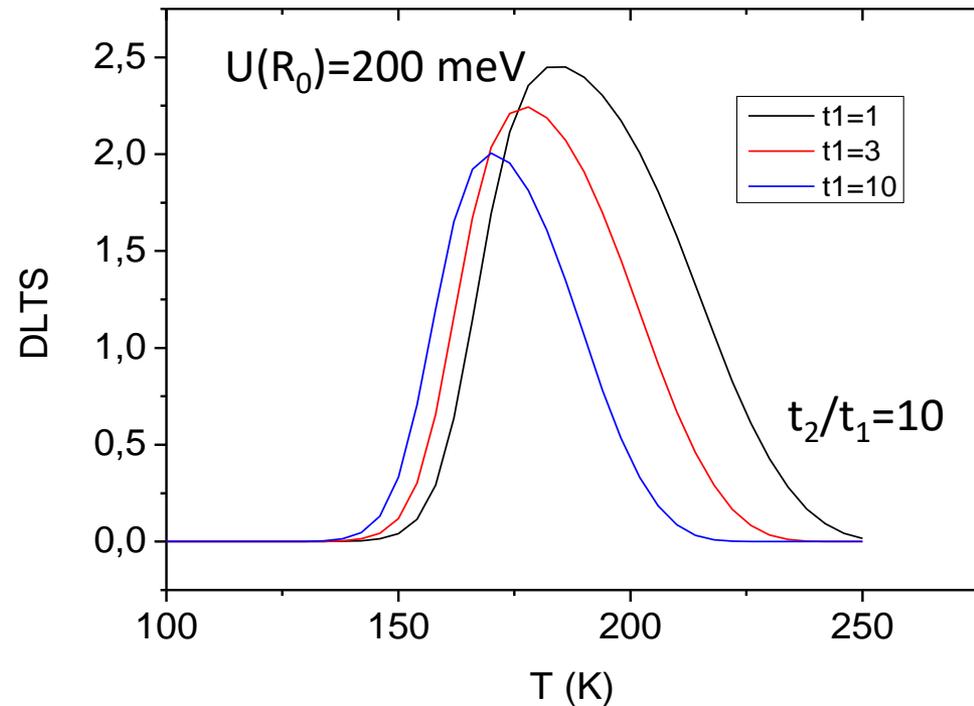
$$E_b = 80 \text{ meV}, \sigma_\infty = 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$$

- Глубина залегания уровня

$$E_c - E_t = 30 \text{ meV}$$

- Ограничение заполнения положением уровня Ферми

$$n_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$



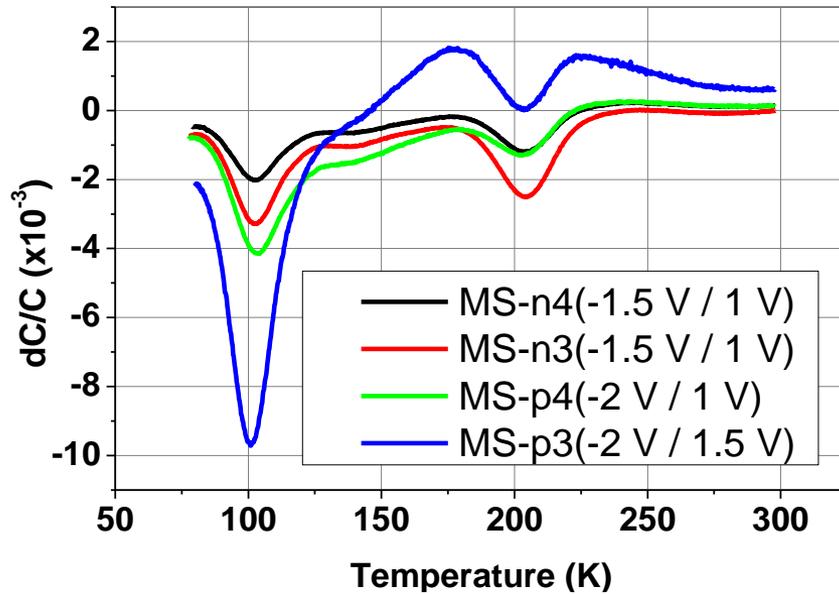
Расчетные данные удовлетворительно описывают эксперимент

Заключение

- КП обладают встроенным положительным зарядом, величина которого уменьшается обратно пропорционально увеличению их размеров, что объясняется локализацией этого заряда в их нестехиометрических оболочках.
- КП, размерами несколько десятков нанометров, характеризуются широкой люминесцентной полосой в энергетическом диапазоне 0,82 эВ – 0,87 эВ, в то время как люминесцентная линия 0,79 относится к кислородным агломератам, декорирующим дислокации.
- Многоэлектронный по величине встроенный положительный заряд КП приводит к возрастанию барьера для эмиссии электронов по мере опустошения его состояний, что проявляется в логарифмической кинетике релаксации емкости.
- Результаты численного моделирования кинетики эмиссии электронов с состояний КП удовлетворительно описывают полученные экспериментальные результаты.
-

Спасибо за внимание!

Глубокие уровни



$$E_c - 0.18 \text{ эВ}, \sigma = 3 \times 10^{-15} \text{ см}^2$$

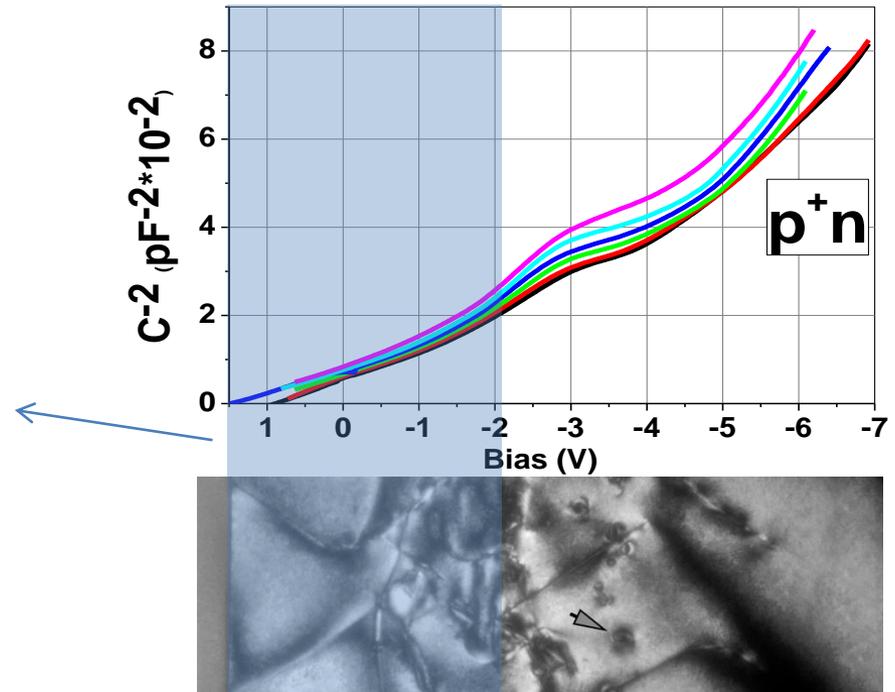
P. Omling, E.R. Weber, L. Montelius, H. Alexander, J. Michel, *Phys Rev B*. **1985**, 32, 6571-6581.

D. Kot, T. McHedlidze, G. Kissinger, W. von Ammon, *Ecs Journal of Solid State Science and Technology*, 2 (2013) P9-P12

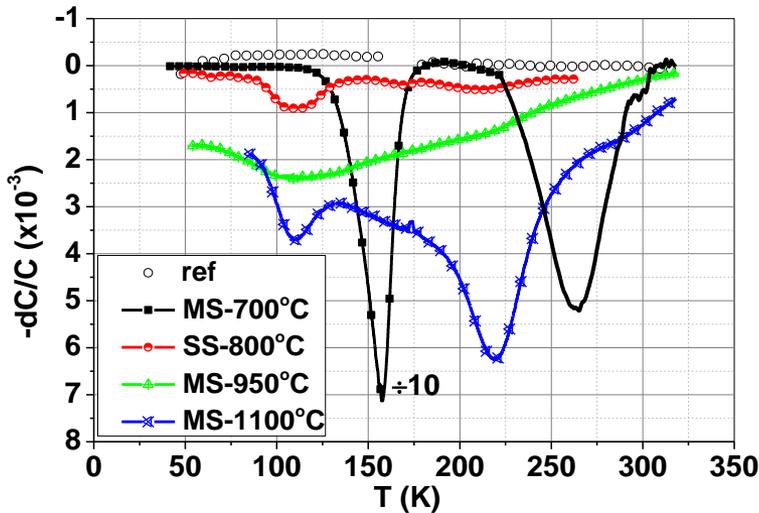
$$E_c - 0.39 \text{ эВ}, \sigma = 1.2 \times 10^{-15} \text{ см}^2$$

V.V. Kveder, Y.A. Osipyan, W. Schroter, G. Zoth, *Physica Status Solidi a- Applied Research*. **1982**, 72, 701-713.

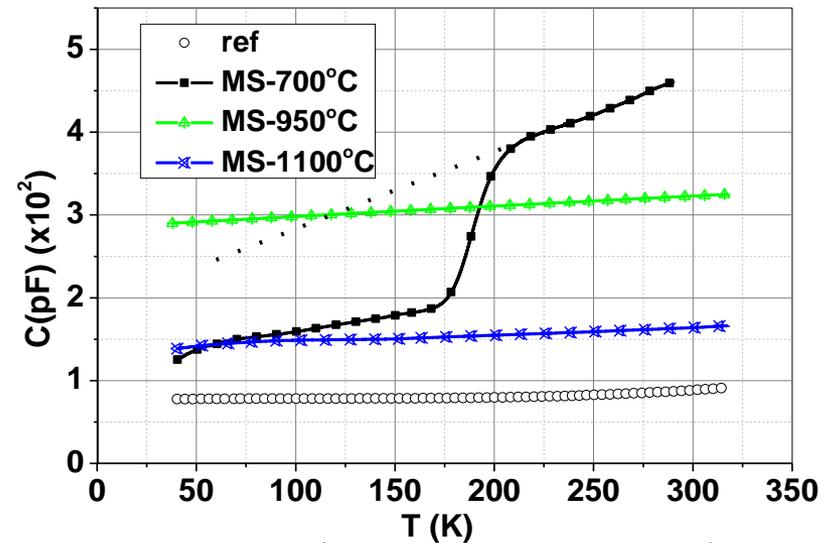
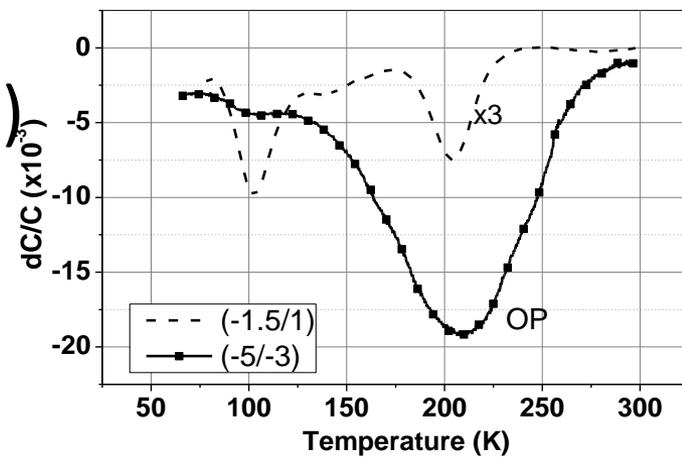
- Энергетические состояния протяженных дефектов.



Глубокие уровни (700°C - 1100°C)



- MS-1100°C: КП, дислокации и протяженные дефекты в окрестности дислокаций
- MS-950°C: полоса неразрешенных состояний (КП, дислокационные петли)
- SS-800°C, SS-900°C, SS-1000°C : частично разрешающиеся линии низкой интенсивности
- MS-700°C: 2 узких пика состояний



$$C = \left(\frac{S\epsilon\epsilon_0 e N_d}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{kT}{e} \ln \frac{N_c}{N_d} + V_a - \frac{kT}{e} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

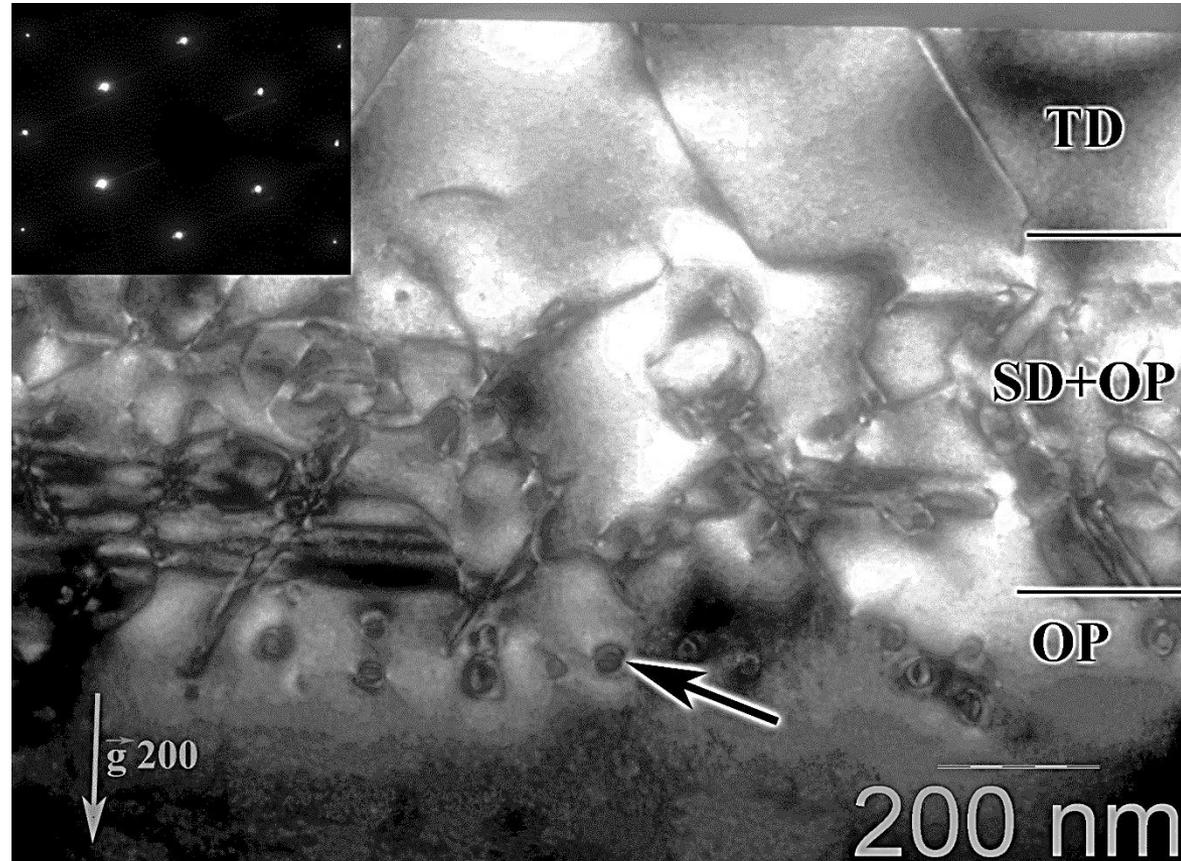
$$= C_0 \left[\left(\ln \frac{N_c}{N_d} - 1 \right) \frac{kT}{V_a e} + 1 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

- Рост величины емкости и $C(T)$ наклона => рост N_d .
- MS-700°C: $C(T)$ ступенька

ПЭМ исследования

MS-n3

Прорастающие дислокации
 $\sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$



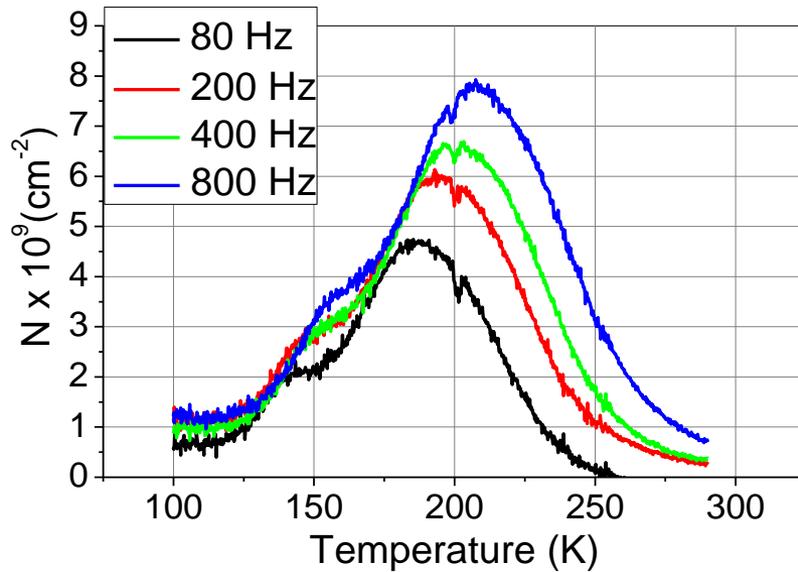
Кислородные преципитаты

MS-n3 $\sim 0.9 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

MS-n4 $\sim 1.2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

- Трехслойная дефектная структура:
прорастающие дислокации, структурные дефекты и кислородные преципитаты

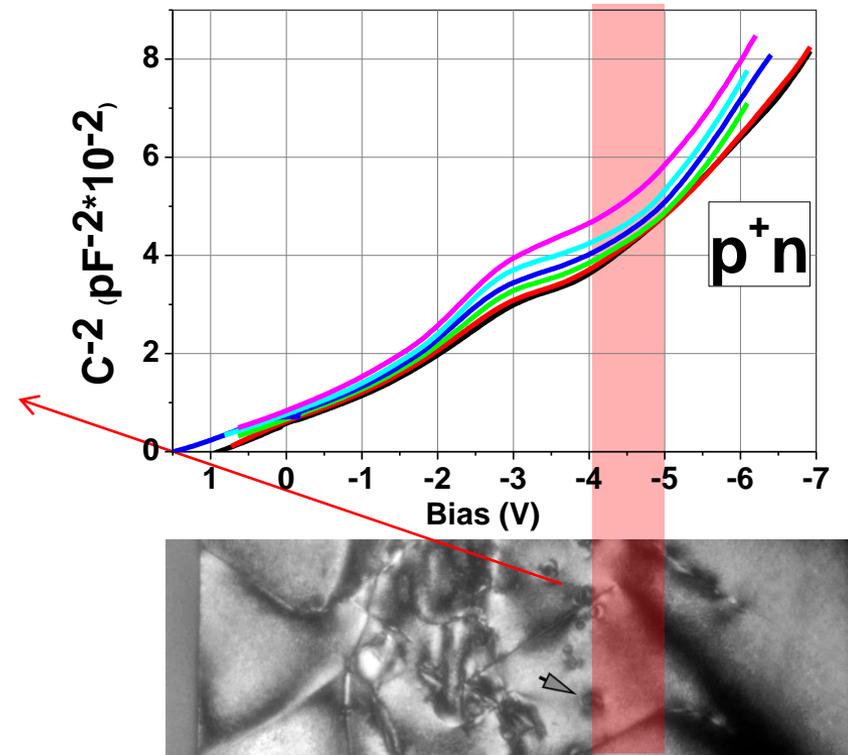
Глубокие уровни кислородных преципитатов



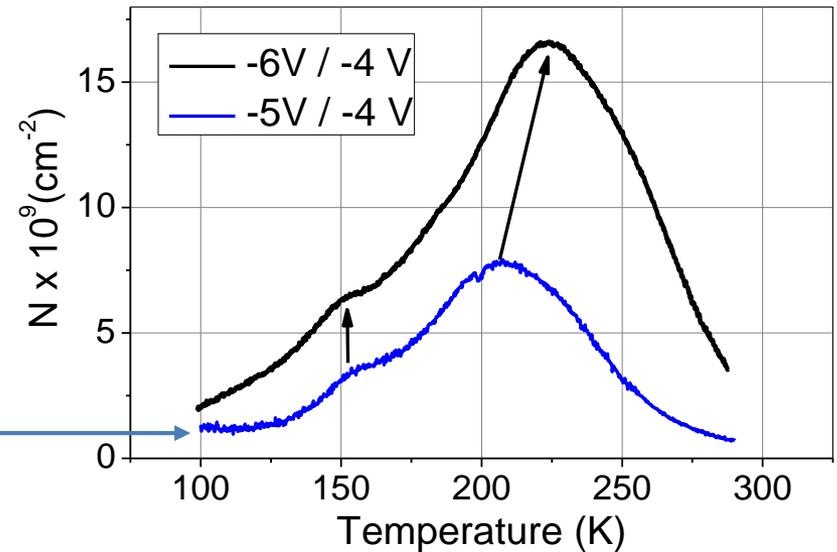
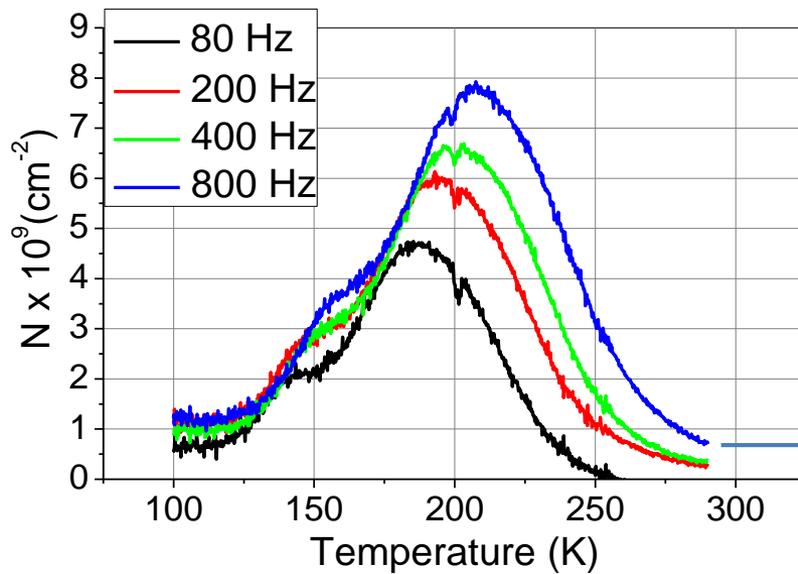
$$N = N_d \frac{(S\epsilon\epsilon_0)^2 \Delta C}{x_0 C^3}$$

$$E_c - 0.33 \text{ эВ}, \quad \sigma = 3,2 \times 10^{-16} \text{ см}^2$$

- Необычная форма пика сохраняется.



Глубокие уровни кислородных преципитатов



$$E_c - 0.38 \text{ эВ}, \quad \sigma = 1,7 \times 10^{-15} \text{ см}^2$$

$$E_c - 0.33 \text{ эВ}, \quad \sigma = 3,2 \times 10^{-16} \text{ см}^2$$

- Ограничение опустошения уровнем Ферми

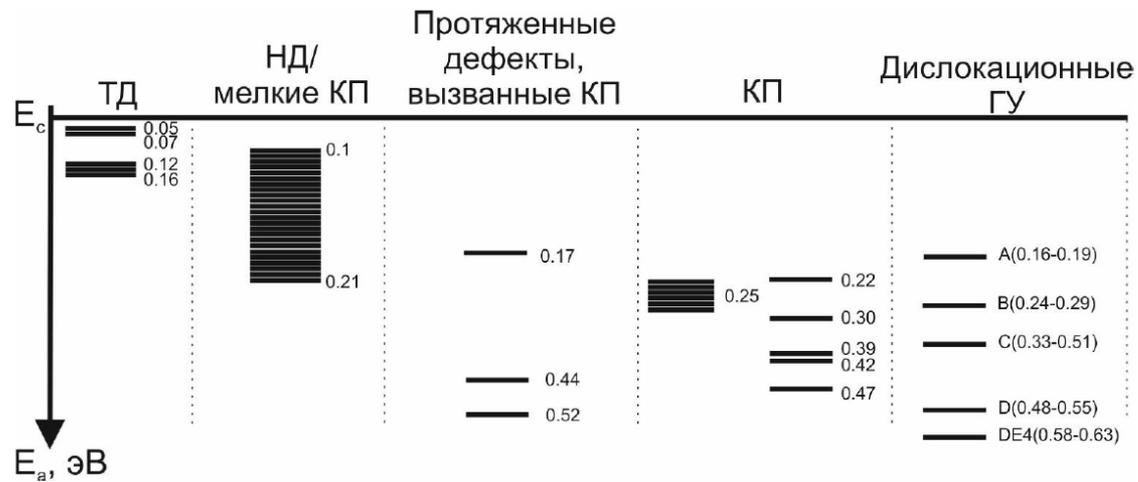


Рис. 1.7 Обобщённые данные об энергетическом положении уровней в верхней половине запрещённой зоны, вызываемыми кислородосодержащими дефектами, а также дислокациями.