

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРНИХ ЗМІН В ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ КРЕМНІЮ, ІМПЛАНТОВАНОГО ІОНАМИ ФОСФОРУ

Проведено моделювання структурних змін в приповерхневих шарах монокристалічного Si в процесі формування так званої δ -BSF структури. Відтворено профіль розподілу деформацій і порушень атомної структури приповерхневих шарів при імплантації іонів фосфору з енергією 180 KeV і дозою $\sim 10^{15}$ іон/см².

В даній роботі представлені експериментальні і теоретичні рентгеноструктурні дослідження розподілу напруг, що виникають в перехідних шарах границь розділу при формуванні так званої δ -BSF структури (δ - тонкий імплантований шар) імплантацією іонів фосфору в монокристалічний кремній [1].

Для неруйнуючого селективного пошарового аналізу структурних змін в приповерхневих шарах і на границях розділу використано косонесиметричну схему дифракції на відбивання. Дана схема дозволяє по серії топограм і кривих відбивання дослідити і визначити розподіл деформацій в тонких (~ 0.01 мкм і менше) приповерхневих шарах кристалів [2].

Поверхневий шар імплантованих кристалів має відмінний від об'єму період ґратки в напрямку перпендикулярному поверхні. Це проявляється на експериментальній кривій дифракційного відбивання у вигляді додаткових максимумів поза областю кутів, що відповідають максимуму відбивання від підкладки (рис.1). Оскільки безпосередня побудова профілю деформацій по експериментальним кривим дифракції в цілому не можлива, то розглянемо одне із можливих рішень так званої оберненої задачі. По заданому розподілу деформацій розраховується крива гойдання рентгенівських променів і порівнюється з експериментальною кривою

гойдання. Шляхом функціонального задання профілю деформацій і порушень та оптимізації параметрів моделювання проводиться на ЕОМ до отримання задовільного співпадання експериментальної і теоретичної кривих відбивання.

Розподіл по товщині z пружних деформацій $(\Delta d(z)/d)$ і порушень $W(z)$ задається у вигляді

$$\frac{\Delta d(z)}{d} = \begin{cases} x_2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_3}\right)^2\right] & \text{при } \frac{\Delta d}{d} > x_5, \text{ і } z \leq x_1 \\ x_5 & \text{при } \frac{\Delta d}{d} \leq x_5 \text{ і } z \leq x_1 \\ x_2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_4}\right)^2\right] & \text{при } z > x_1 \end{cases}$$

$$W(z) = \begin{cases} x_7 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_4}\right)^2\right] & \text{при } z > x_{10} \\ x_{10} & \text{при } W \leq x_{10} \text{ і } z \leq x_6 \\ x_7 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_6}{2x_3}\right)^2\right] & \text{при } z > x_6 \end{cases} \quad (1)$$

Всі параметри, за виключенням x_2, x_5, x_7, x_{10} виражені через екстинкційну довжину - L_{ex} . Відзначимо, що у косонесиметричному випадку дифракції на відміну від звичайного екстинкційна довжина може змінюватись плавно більш чим на два порядки [2].

Оптимізація параметрів профілів виду (1) здійснюється методом найменших квадратів з мінімізацією функції

$$F(x_1, x_2, \dots, x_{10}, \Delta\theta) = \sum_{k=1}^k \rho_k \left[\frac{I_{\text{exp}}(\Delta\theta_k) - I(x_1, \dots, x_{10}, \Delta\theta_k)}{I_{\text{exp}}(\Delta\theta_k)} \right]^2, \quad (2)$$

яка є критерієм співпадання в точках k розрахованих $I(x_1, \dots, x_{10}, \Delta\theta)$ і експериментальних $I_{\text{екс}}(\Delta\theta)$ кривих гойдання; ρ_k - вагова функція; $\Delta\theta_k = \theta_R - \theta_B$.

На першому етапі оптимізації в кожному тонкому шарі, на які розбивається весь профіль деформацій (порушень), визначаються значення $(\Delta d/d)_j$ і W_j . Далі отримані значення змінюються в околі вихідних величин до отримання найкращого співпадання експериментальних і теоретичних кривих гойдання. Це приводить до зменшення можливої невідповідності істинного профілю деформацій (порушень) профілю, який описується виразом (1).

В рамках кінематичної теорії [3] амплітуда відбивання рентгенівських променів від N шарів є сумою амплітуд відбивання від кожного шару j з врахуванням різниці фаз, яка обумовлена $(\Delta d/d)_j$ і W_j , представляється так:

$$A_N = |q| \cdot \sum_{j=1}^N e^{-M_j} \cdot \exp \left\{ i \left[(n-1) \frac{\delta_j}{2} + \Phi_j \right] \right\} \cdot \sin \left(\frac{n\delta}{2} \right) / \sin \left(\frac{\delta}{2} \right) \quad (3)$$

де $q = i \frac{d\lambda}{V \sin \theta_B} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot |F_{hkl}^0|$ - амплітуда хвилі від однієї кристалографічної площини досконалого кристалу, у випадку, якщо амплітуда падаючої хвилі рівна 1; V - об'єм елементарної комірки; $\delta_j = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot d \cos \theta_B \cdot \Delta\theta + 2\pi \cdot (\Delta d/d)_j$ - фазовий зсув між сусідніми кристалографічними площинами в шарі j .

$$\Phi_j = \sum_{i=1}^{j-1} n_i \delta_i, \quad \Phi_1 = 0 \quad (4)$$

Φ_j - сумарний фазовий зсув після проходження $j-1$ шарів.

$$M_j = \frac{8\pi^2}{\lambda^2} \cdot \sin^2 \theta_B \cdot \bar{U}_j^2, \quad (5)$$

λ - довжина хвилі випромінювання, \bar{U}_j^2 - середньоквадратичне зміщення вузлів ґратки в шарі j , обумовлене дефектами структури. Порушення $W_j = 1 - e^{-M_j}$ змінюються від нуля для досконалого кристалу до одиниці у випадку повністю неупорядкованого стану.

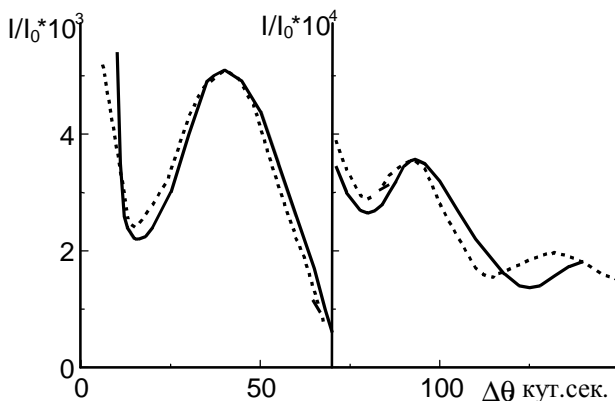


Рис.1. Крива гойдання кристалу кремнію, імплантованого іонами фосфору. Відбивання (400) CuK_α -випромінювання. Пунктирна лінія - розрахункова, суцільна - експериментальна.

Значення амплітуди дифрагованої хвилі “на хвості” головного максимуму ($p \gg 1$) для $\theta < \pi/4$, згідно динамічної теорії [3] можуть бути представлені у вигляді

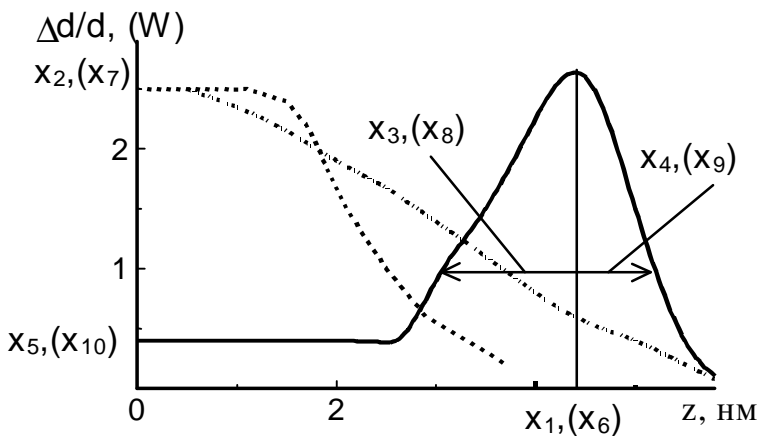
$$X = \frac{1}{2p} \left(1 + \frac{1}{4p^2}\right), \quad p = -\sin 2\theta_B \cdot \frac{\pi \cdot mc^2}{e^2} \cdot \frac{V}{\lambda^2 \cdot |F_{hkl}^0|} \cdot \Delta\theta. \quad (6)$$

Повна амплітуда розсіювання і відповідно інтенсивність матимуть вигляд

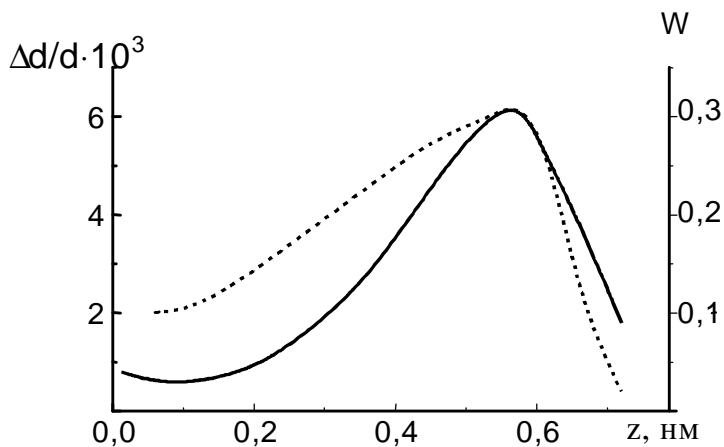
$$R(\Delta\theta) = A_N(\Delta\theta) + X(\Delta\theta) \cdot \exp(-i\delta_1), \quad (7)$$

$$I(\Delta\theta) = R(\Delta\theta) \cdot R^*(\Delta\theta) = |A_N(\Delta\theta)|^2 + |X(\Delta\theta)|^2 + 2X(\Delta\theta) \cdot \text{Re}[A_N(\Delta\theta) \cdot \exp(-i\delta_1)] \quad (8)$$

Відзначимо задовільне (максимальна розбіжність до 10%) співпадання теоретичних і експериментальних кривих гойдання. Експериментальні криві гойдання зняті на двокристальному спектрометрі на випромінюванні CuK_α від симетричних (400) площин, а також в косонесиметричній схемі дифракції з використанням (311)



а)



б)

Рис.2. а) Можливі профілі розподілу деформацій, які описуються співвідношенням (1). x_1-x_{10} - параметри оптимізації. б) Профілі деформацій - пунктирна лінія, і порушень - суцільна крива.

СоК α -випромінювання. В цілому, відтворений профіль деформацій і порушень в Si, імплантованому Р⁺, не є симетричним [4].

Отримані результати свідчать про те, що іонна імплантація фосфору вносить значні напруги в приповерхневі шари кристалу. Ефективна глибина локалізації значних пошкоджень приповерхневого шару, як слідує із побудованих розподілів деформацій, знаходиться в границях від 0.6 до 0.7 мкм. Товщина аморфізованого шару ~0.2-0.3 мкм. Значення середньої і середньоквадратичної деформації знаходяться в границях $6.1 \cdot 10^{-3}$ і $8 \cdot 10^{-4}$ відповідно.

Таким чином, запропонований метод моделювання дозволяє з кривих гойдання побудувати профілі деформацій і порушень тонких шарів кристалу. Функціональне задання профілів на першому етапі значно підвищує точність відтворення реальних профілів деформацій і відхилень атомних площин в приповерхневих шарах

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Kuzniki Z.T. L-H Interface Improvement for Ultra High Efficiency Si Solar Cells// J.Appl. Phys.- 1993.- **74**.- P. 2058-2063.
2. Косонесимметричная рентгеновская топография приповерхностных слоев монокристаллов / Кшевецкий С.А., Стецко Ю.П., Фодчук И.М., Мельничук И.В., Полянко В.С. // УФЖ.-1990.-**30**, №3.- С.344-348.
3. Kyutt R.N., Petrachen P.V., Sorokin L.M. Strain Profiles in Ion-Doped Silicon Obtained from X-Ray Rocking Curves //Phys. status solidi A.- 1980.- **50**.- P.381-389.
4. Servidori M., Characterization of Lattice Damace in Ion Implanted Silicion by Multiple Crystal X-Ray Diffraction // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.-1987.-**B19/20**.-P.443-449.

SUMMARY

FODCHUK I.M., EVDOKIMENKO A.V., GOOLTYAY L.L. THE INVESTIGATION OF STRUCTURAL CHANGES AT SUBSURFACE LAYERS IN Si IMPLANTED BY PHOSPHORUS IONS

Simulation algorithm of structural changes at subsurface layers in Si single crystal during formation of so called a-structure is offered. Profiles of deformation distribution and of atom structure distortion in subsurface layers at implantation of phosphorus ions with energy 180 keV and doze of the order 10^{15} cm^{-2} is reproduced.