

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЗАХВАТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ КЛАСТЕРАМИ ДЕФЕКТОВ

Е.А. Левчук, Л.Ф. Макаренко
Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь,
liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by

В работе проведено численное моделирование кинетики носителей заряда в сферическом кластере с гауссовым распределением концентрации дефектов. Дифференциальные уравнения для захвата носителей заряда решались с помощью метода конечных разностей с использованием метода Ньютона для нелинейного уравнения Пуассона. Рассчитана кинетика заполнения дефектов для различных параметров кластера и полупроводника. Показано, что неравномерность распределения дефектов существенно влияет на кинетику заполнения даже при отсутствии какого-либо влияния наличия кластеров на характеристики стационарного состояния. Для численных экспериментов задавались параметры дефектов, соответствующие дивакансии в кремнии, которая обычно проявляется в измерениях емкостной спектроскопии глубоких уровней. Результаты расчетов могут быть использованы для планирования доз облучения при постановке задачи определения характеристик кластеров радиационных дефектов и интерпретации данных емкостной спектроскопии, полученных для полупроводников, облученных ядерными частицами.

Ключевые слова: кластер дефектов; захват носителей заряда; численное моделирование.

NUMERICAL MODELING OF CHARGE CARRIER CAPTURE KINETICS BY DEFECT CLUSTERS

E.A. Levchuk, L.F. Makarenko
Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus,
liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by

Effects of defect cluster are likely to be quite important to describe damage of silicon devices irradiated with heavy particles. However, at present, the understanding of electrical characteristics of semiconductors containing such clusters is insufficient as compared to the knowledge on the role of isolated point defects. So, it is desirable to develop experimental methods which could more clearly reveal cluster characteristics. For this purpose, we suggest to use detailed studies of kinetics of charge carrier trapping by defect clusters. To develop this method, numerical simulation of charge carrier kinetics in spherical cluster with gaussian distribution of defects has been carried out. Differential equations describing trap filling have been solved using finite difference method with applying Newton method for nonlinear Poisson equation. The kinetics of defects filling for different cluster and defect parameters in materials with different doping level has been numerically calculated. It is assumed that results of these numerical experiments can be used to interpret experimental data on deep level transient spectroscopy (DLTS) of neutron irradiated silicon crystals. It has been found that the stationary mode of cluster studies is applicable for dense cluster with high defect concentration in the core of cluster. Nonstationary mode (kinetics of charge carrier trapping) is more efficient for studies of "sparse" clusters. The described model can be used for planning the choice of materials and irradiation conditions and to interpret characteristics for DLTS method.

Keywords: defect cluster; charge carrier trapping; numerical simulation.

Введение

При облучении полупроводников ядерными частицами образующиеся дефекты распределены не равномерно, а образуют скопления или кластеры дефектов. Образование стабильных кластеров происходит в результате сложных процессов: образования каскада смещений, диффузии

первичных радиационных дефектов, их взаимодействия друг с другом и примесями [1]. Для практики важным является определение взаимосвязи между параметрами кластера и характеристиками процесса деградации полупроводниковых приборов под действием ядерных излучений [2].

Интерес представляет разработка экспериментальных методов определения характеристик кластеров электрически активных дефектов (характерного размера кластера, числа дефектов в кластере, распределения дефектов внутри кластера). Например, предлагалось использовать метод термостимулированного тока [3]. Другим методом такого исследования может быть широко используемые в настоящее время исследования емкостной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) [2,4]. Одним из проявлений наличия кластеров в этом методе является изменение амплитуды пика кластеризованных дефектов с температурой. Однако использование лишь одной характеристики (амплитуды пика) не позволяет дать однозначную интерпретацию экспериментальных результатов, и требуются дополнительные данные, на основе которых можно было бы оценить правильность анализа температурных зависимостей амплитуд.

Дополнительную информацию можно получить, например, из анализа кинетики захвата носителей кластерами дефектов. Целью данной работы является рассмотрение этого метода на основе результатов численного моделирования кинетики захвата носителей заряда кластеризованными дефектами. Такие исследования могут быть достаточно просто проведены методом DLTS [2, 4].

Постановка задачи моделирования

Будем рассматривать кинетику захвата носителей заряда в сферическом кластере с гауссовым распределением одновалентных дефектов. Выпишем основную систему уравнений нашей модели, описывающей перенос заряда в полупроводнике. Для упрощения вычислений мы будем рассматривать уравнения только для концентрации одного вида носителей заряда. Тогда получим систему уравнений, включающую в себя макроскопическое уравнение Максвелла для электростатического потенциала и уравнение для скорости изменения концентрации электронов, захва-

ченных дефектом:

$$\Delta\varphi = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}(n + n_T - N_D), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_T}{\partial t} = -e_n n_T + C_n n (N_T - n_T). \quad (2)$$

где $n = n(\vec{r}, t)$ – концентрация электронов, $\varphi = \varphi(\vec{r}, t)$ – электрический потенциал, $n_T = n_T(\vec{r}, t)$ – концентрация электронов, захваченных ловушкой, N_D – концентрация примеси доноров, $\varepsilon, \varepsilon_0$ – диэлектрическая и абсолютная диэлектрическая проницаемости, e – заряд электрона, C_n – коэффициент захвата электронов на пустой уровень дефекта, e_n – скорость эмиссии электронов.

Будем считать, что концентрация электронов подчиняется распределению Больцмана:

$$n = N_D \exp\left(\frac{e\varphi}{kT}\right). \quad (3)$$

Зададим функцию распределения концентрации дефекта $N_T(r)$ в виде:

$$N_T(r) = \frac{M_T}{R^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{r^2}{R^2}\right). \quad (4)$$

где M_T – число дефектов в кластере, R – характеристический радиус кластера.

В начальный момент времени все ловушки не заполнены:

$$n_T|_{t=0} = 0. \quad (5)$$

Это соответствует условиям DLTS измерений. Также задаются граничные условия для электрического потенциала:

$$\left.\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right|_{r=0} = 0, \quad \varphi|_{r\rightarrow\infty} = 0. \quad (6)$$

В стационарном режиме задача, соответственно, пример вид:

$$\Delta\varphi = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(n + \frac{C_n n N_T}{e_n + C_n n} - N_D \right). \quad (7)$$

с граничными условиями (6).

Результаты численных экспериментов и обсуждение

Задачи (1)-(6), (6)-(7) решались с помощью метода конечных разностей с ис-

пользованием метода Ньютона для нелинейных уравнений (2) и (7).

В качестве параметров дефектов мы использовали сечение захвата и энтальпию ионизации, экспериментально определенные для дивакансии в кремнии [5]. Это обусловлено тем, что, как следует из исследований различных атомов, именно дивакансии входят в состав кластеров, образующихся в материале при облучении нейтронами.

Моделирование кинетики захвата проводилось для кластеров с характеристиками, близкими полученным в результате атомистического моделирования [2], включающего в свой состав 20-100 дефектов, и имеющий характеристический радиус $R = 10-100$ нм. Процессы заполнения кластеров моделировались для дефектов с различными соотношениями скорости эмиссии и сечения захвата носителей заряда в материалах с различным уровнем легирования. Типичные результаты расчетов представлены на рисунках 1-3.

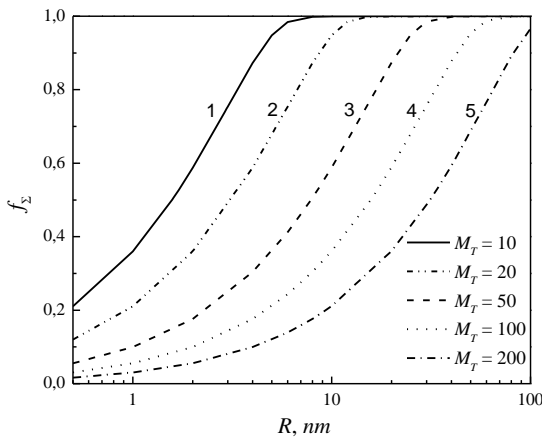


Рис. 1. Зависимость суммарного числа заполнения от характеристического радиуса кластера при различном числе дефектов в кластере: 1 – $M_T = 10$, 2 – $M_T = 20$, 3 – $M_T = 50$, 4 – $M_T = 100$, 5 – $M_T = 200$ ($T = 200\text{K}$, $N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $e_n = 5.67\text{c}^{-1}$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}^3/\text{c}$)

Fig. 1. The dependence of total occupation number on characteristic cluster radius for different number of defects in the cluster: 1 – $M_T = 10$, 2 – $M_T = 20$, 3 – $M_T = 50$, 4 – $M_T = 100$, 5 – $M_T = 200$ ($T = 200\text{K}$, $N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}^3/\text{s}$, $e_n = 5.67\text{s}^{-1}$)

Из рисунка 1 можно определить параметры кластера, для которых происходит

существенное уменьшение доли заполненных дефектов по сравнению с объемным значением. Если для равномерно распределенных дефектов все дефекты заполнены носителями заряда, то для кластера, включающего в свой состав 10 дефектов и имеющего характеристический радиус 16 нм, стационарная доля заполненных дефектов составляет приблизительно 0.5.

В то же время влияние кластеров на кинетику захвата носителей заряда проявляется для значительно более «разреженных» кластеров, для которых стационарное заполнение практически не отличается от единицы. Это хорошо видно из кривых 3-5 на рисунке 2.

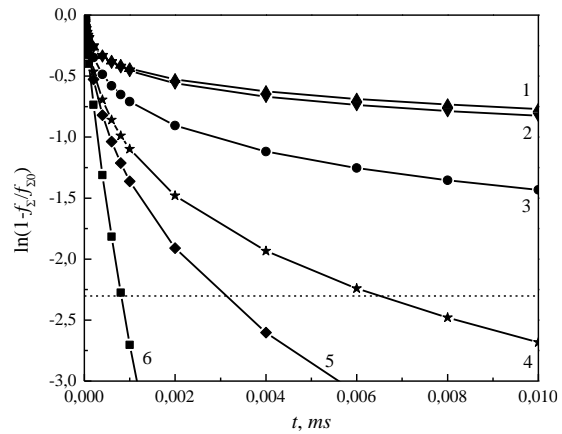


Рис. 2. Зависимость величины $\ln(1 - f_\Sigma/f_{\Sigma 0})$ от времени, где f_Σ – доля заполненных ловушек в различные моменты времени, $f_{\Sigma 0}$ – доля заполненных ловушек в стационарном состоянии: 1 – $R = 15.7$ нм ($f_{\Sigma 0} = 0.5$), 2 – $R = 29.5$ нм ($f_{\Sigma 0} = 0.75$), 3 – $R = 75$ нм ($f_{\Sigma 0} = 0.9983$), 4 – $R = 120$ нм ($f_{\Sigma 0} \approx 1$), 5 – $R = 150$ нм ($f_{\Sigma 0} \approx 1$), 6 – $R = 314$ нм ($f_{\Sigma 0} \approx 1$) ($M_T = 100$, $T = 200\text{K}$, $N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}^3/\text{c}$, $e_n = 5.67\text{c}^{-1}$)

Fig. 2. The dependence of value $\ln(1 - f_\Sigma/f_{\Sigma 0})$ on time, where f_Σ is fraction of filled traps at different times, $f_{\Sigma 0}$ is fraction of filled traps in stationary state: 1 – $R = 15.7$ nm ($f_{\Sigma 0} = 0.5$), 2 – $R = 29.5$ nm ($f_{\Sigma 0} = 0.75$), 3 – $R = 75$ nm ($f_{\Sigma 0} = 0.9983$), 4 – $R = 120$ nm ($f_{\Sigma 0} \approx 1$), 5 – $R = 150$ nm ($f_{\Sigma 0} \approx 1$), 6 – $R = 314$ nm ($f_{\Sigma 0} \approx 1$) ($M_T = 100$, $T = 200\text{K}$, $N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}^3/\text{s}$, $e_n = 5.67\text{s}^{-1}$)

При этом кинетика захвата становится неэкспоненциальной. Это связано с более медленным заполнением ловушек в ядре кластера (рис. 3). Соответственно, влияние кластера проявляется при при-

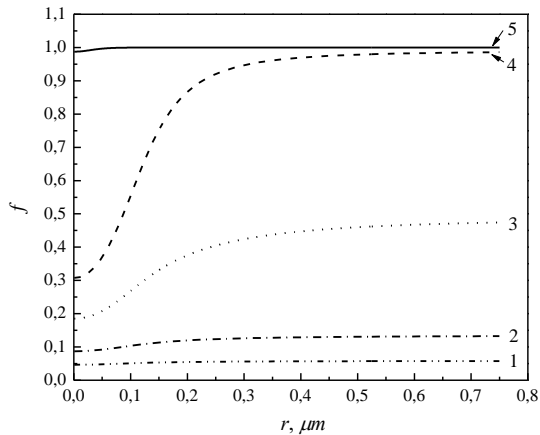


Рис. 3. Распределение доли заполненных ловушек в различные моменты времени: 1 – $t = 1.32 \cdot 10^{-5}$ мс ($f_{\Sigma} = 0.05$), 2 – $t = 3.16 \cdot 10^{-5}$ мс ($f_{\Sigma} = 0.1$), 3 – $t = 1.43 \cdot 10^{-4}$ мс ($f_{\Sigma} = 0.25$), 4 – $t = 9.5 \cdot 10^{-4}$ мс ($f_{\Sigma} = 0.5$), 5 – стационарное распределение ($f_{\Sigma} = 0.9983$) ($M_T = 100$, $R = 75$ нм, $T = 200$ К, $N_D = 10^{14}$ см $^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $e_n = 5.67$ с $^{-1}$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}$ см 3 /с)

Fig. 3. Distribution of filled traps fraction at different times: 1 – $t = 1.32 \cdot 10^{-5}$ ms ($f_{\Sigma} = 0.05$), 2 – $t = 3.16 \cdot 10^{-5}$ ms ($f_{\Sigma} = 0.1$), 3 – $t = 1.43 \cdot 10^{-4}$ ms ($f_{\Sigma} = 0.25$), 4 – $t = 9.5 \cdot 10^{-4}$ ms ($f_{\Sigma} = 0.5$), 5 – stationary distribution ($f_{\Sigma} = 0.9983$) ($M_T = 100$, $R = 75$ nm, $T = 200$ K, $N_D = 10^{14}$ cm $^{-3}$, $\varepsilon = 11.8$, $e_n = 5.67$ s $^{-1}$, $C_n = 4.5 \cdot 10^{-8}$ cm 3 /s)

ближении к стационарному заполнению ловушек (на рисунке 2 пунктиром показана линия, соответствующая 90 % заполнению ловушек).

Для плотных кластеров время заполнения увеличивается на несколько порядков, и задача достижения стационарной концентрации становится проблематичной. Этот факт следует учитывать при исполь-

зовании в качестве метрики кластера его стационарную степень заполнения.

Таким образом, можно сделать вывод, что исследования кинетики заполнения наиболее эффективны для «разреженных» кластеров.

Заключение

Проведено численное моделирование кинетики заполнения ловушек, образующих сферический кластер. Результаты моделирования можно использовать для планирования и интерпретации экспериментальных данных емкостной спектроскопии.

Библиографические ссылки/References

1. Myers S. M., Cooper P. J., Wampler W. R. Model of defect reactions and the influence of clustering in pulse-neutron-irradiated Si. *Journal of Applied Physics* 2008; 104(4): 044507.
2. Fleming R.M., Seager C.H., Lang D.V., Cooper P.J., Bielejec E., Campbell J.M. Effects of clustering on the properties of defects in neutron irradiated silicon. *Journal of Applied Physics* 2007; 102(4): 043711.
3. Bruzzi M., Borch E., Baldini A. Using thermally stimulated currents to visualize defect clusters in neutron-irradiated silicon. *Journal of applied physics* 1992; 72(9): 4007-4013.
4. Monakhov E.V., Wong-Leung J., Kuznetsov A.Y., Jagadish C., Svensson B.G. Ion mass effect on vacancy-related deep levels in Si induced by ion implantation. *Physical Review B* 2002; 65(24): 245201.
5. Hallen A., Keskitalo N., Masszi F., Nagl V. Lifetime in proton irradiated silicon. *Journal of Applied Physics* 1996; 79(8): 3906-3914.