

## Х И М И Я

УДК 548.571; 548.4

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЖИГА РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ, ЛЕГИРОВАННОМ ЛИТИЕМ

*Богатов Н. М.<sup>1</sup>, Коваленко М. С.<sup>2</sup>*

MODELING OF RADIATION DEFECTS ANNEALING IN LITHIUM-DOPED SILICON

Bogatov N. M., Kovalenko M. S.

Based on the solution of equations of semi-chemical reactions, the calculation of radiation defects kinetics in silicon with the dopants P, B, Li, O, C has been carried out. Basic regularities of the change of secondary radiation defects concentration at a stage of isothermal annealing have been determined.

**Введение**

Угроза техногенных катастроф с радиационным загрязнением окружающей среды требует повышения надежности электронной техники. Кремний является основным материалом полупроводниковой электроники. Кремниевые микросхемы используются в контрольно-измерительных автоматизированных системах и цифровых устройствах управления. Радиационные дефекты являются одной из причин их деградации в условиях облучения потоком ионизирующих частиц [1–3]. Повышение радиационной стойкости и восстановление параметров кремниевых приборов является актуальной проблемой современной физики и техники.

Атомы лития в кремнии обладают пассивирующими свойствами. Имея высокую подвижность в решетке кремния, они образуют комплексы с радиационными дефектами и снижают их электрическую и рекомбинационную активность. Эта закономерность проявляется в процессе низкотемпературного отжига, что позволяет частично восстановить исходные характеристики приборов. Прямые эксперименты по радиационному облучению с целью определения эффективности пассивации литием радиационных дефектов не всегда оправданы. Поэтому возрастает роль численного моделирования кинетики радиационного дефектообразования с участием атомов Li.

Радиационная стойкость кремния зависит от его кристаллической структуры и примесного состава [2]. Монокристаллический кремний, выращенный методом Чохральского, широко используется в полупроводниковой электронике. Для него характерны высокие концентрации сопутствующих примесей кислорода и углерода. Тип проводимости материала определяется концентрацией основных примесей фосфора или бора. Основные и сопутствующие примеси участвуют в образовании вторичных радиационных дефектов (ВРД). Модель образования ВРД в Si должна содержать реальные значения концентраций примесей.

Кинетика дефектообразования моделируется двумя этапами. На первом этапе ВРД образуются за время облучения  $t_{об}$  ионизирующими частицами с энергией  $E$ , потоком  $I_0$  при температуре  $T_{об}$ . На втором этапе ионизирующее излучение отсутствует, проводится отжиг в течение времени  $t_{от}$  при температуре  $T_{от} > T_{об}$ .

Цель работы — определение влияния концентрации основных примесей и атомов лития в кремнии, выращенном методом Чохральского, на изменение концентрации ВРД в процессе низкотемпературного отжига, следующего за облучением потоком ионизирующих частиц.

<sup>1</sup>Богатов Николай Маркович, д-р физ.-мат. наук, профессор, академик АИН РФ, зав. кафедрой общей физики и информационных систем Кубанского государственного университета.

<sup>2</sup>Коваленко Михаил Сергеевич, инженер кафедры общей физики и информационных систем Кубанского государственного университета.

## 1. Методика расчетов

Образование комплексов атомов в кремнии описывается системой уравнений квази-химических реакций [1, 2]. При выводе этой системы уравнений учтем совокупность экспериментальных и теоретических данных о свойствах примесей и комплексов дефектов в кремнии. Это позволяет сформулировать следующие положения, пренебречь некоторыми реакциями и упростить систему уравнений. Далее индексами «I» и «S» обозначены атомы внедрения и замещения, соответственно.

1. Концентрации атомов кислорода  $N_{O(I)}$  и углерода  $N_{C(S)}$  много больше концентрации подвижных дефектов.

2. Атомы  $Si_I$  и  $C_I$ , а также вакансии  $V$ , являются подвижными дефектами при температуре  $T \geq 300$  К и эффективно захватываются стоками дефектов [1, 3], поэтому их концентрации выходят на квазистационарные значения за время много меньше, чем время облучения, и оказываются много меньше концентраций основных вторичных дефектов, а также малоподвижных стоков [1, 4]. На основании этого можно исключить из числа основных реакции  $V+Si_I \rightarrow 0$ ,  $V+V \rightarrow W$ ,  $V+C_I \rightarrow C_S$ .

3. В высокоомном кремнии n- типа, облученном потоком электронов с энергией 1 МэВ, уменьшение концентраций  $O_I$  и  $C_S$  связано соотношением  $\Delta O_I = 2\Delta C_S$  [4]. Следовательно, реакции  $V+A \rightarrow WO_I$ ,  $V+C_I O_I \rightarrow C_I O_I V$ ,  $V+C_I O_I V \rightarrow C_I O_I W$ ,  $C_I+WO_I \rightarrow C_I O_I W$ ,  $Si_I+O_I \rightarrow Si_I O_I$ ,  $V+C_S \rightarrow C_S V$ ,  $V+C_I \rightarrow C_S$ ,  $Si_I+W \rightarrow V$ , нарушающие это соотношение, дают пренебрежимо малый вклад (A центр образуется из V и  $O_I$ ).

4. Энергии миграции A- центра и  $O_I$ , а также барьер образования комплекса  $VO_2$  достаточно велики [3], поэтому можно пренебречь реакцией  $A+O_I \rightarrow VO_2$ .

5. Комплекс V- $B_S$  нестабилен при комнатной температуре и выше [1], поэтому можно не учитывать реакции  $V+B_S \rightarrow VB_S$ ,  $Si_I+VB_S \rightarrow B_S$ .

6. Плотность дислокаций  $N_D \leq 10^6$  см<sup>-2</sup>, поэтому плотность оборванных связей  $N_b \approx N_D a^{-1} \ll N_{C(S)}$ , где  $a$  — период решетки. Следовательно, дислокации не являются основными стоками для  $Si_I$ .

7. Структура K- центра точно не установлена. Предполагается, что он состоит из  $O_I+C_I+W$  [2] или вместо W включает пару полувакансий [1], или только из  $O_I+C_I$  [3]. Дивакансии отжигаются при температуре 600–

700 К [1]. Температура отжига приборов ниже, поэтому выберем структуру K- центра в виде  $O_I+C_I$  и исключим реакцию  $C_I O_I+W \rightarrow C_I O_I W$ .

8. Литий является подвижным дефектом при  $T \geq 300$  К и эффективно захватывается стоками [5], поэтому концентрация Li выходит на квазистационарные значения за время много меньше, чем время облучения или отжига. Считаем, что концентрация свободного Li много меньше начальной концентрации кислорода. Отсюда следует, что можно пренебречь реакциями  $Li+V \rightarrow LiV$ ,  $Si_I+LiV \rightarrow Li$ .

9. Атомы Li и комплексы LiO создают мелкие, положительно заряженные донорные уровни [6], поэтому вероятность образования комплексов  $Li_2O$  мала. Следовательно, можно пренебречь реакциями  $Li+LiO \rightarrow Li_2O$ ,  $V+Li_2O \rightarrow Li_2OV$ ,  $Si_I+Li_2OV \rightarrow Li_2O$ .

10. Комплекс LiOV имеет одну ненасыщенную химическую связь [7], тогда связи комплекса  $Li_2OV$  химически насыщены, и комплексы  $Li_nOV$  с  $n > 2$  не образуются.

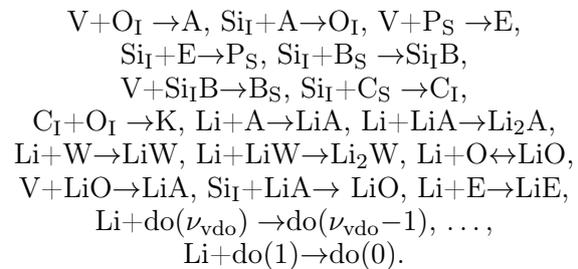
11. Дивакансия имеет две ненасыщенные связи [1], поэтому присоединяет не более двух атомов лития, следовательно, комплексы  $Li_nW$  с  $n > 2$  не образуются.

12. Количество атомов Li, пассивирующих область разупорядочения  $do(\nu_{vdo})$ , не превышает числа вакансий, формирующих эту область,  $\nu_{vdo}$ .

13. Вероятность взаимодействия Li с  $O_I$  при  $T > 300$  К много больше, чем с  $B_S$  [8], поэтому образованием комплекса LiB пренебрегаем.

14. Информация об образовании комплексов  $LiSi_I B$ ,  $LiC_I O_I$  отсутствует, поэтому их образование не учитывается.

В результате остаются следующие реакции:



Чтобы сократить цепочку уравнений, содержащих переменное число вакансий в области разупорядочения, введем среднее количество вакансий в области разупорядочения  $\nu_{ev}$  и сведем эту цепочку уравнений к одному

уравнению для  $\nu_{ev}$ . В результате получим систему уравнений для определения следующих переменных: концентраций А центров  $N_A$ , Е-центров  $N_E$ , К- центров  $N_K$ , комплексов  $Si_I B$   $N_{SiB}$ , дивакансий  $N_W$ , комплексов  $LiW$   $N_{LiW}$ , комплексов  $Li_2W$   $N_{Li_2W}$ , комплексов  $LiA$   $N_{LiA}$ , комплексов  $Li_2A$   $N_{Li_2A}$ , комплексов  $LiE$   $N_{LiE}$ , атомов  $Li$   $N_{Li}$ , комплексов  $LiO$   $N_{LiO}$ , атомов внедрения кислорода  $N_{O(I)}$ , атомов замещения фосфора  $N_{P(S)}$ , атомов замещения углерода  $N_{C(S)}$ , атомов замещения бора  $N_{B(S)}$ , а также среднего числа вакансий  $\nu_{ev}$  в областях разупорядочения с концентрацией  $N_{do}$

$$\frac{dN_A}{dt} = G_V I_1 N_{O(I)} - (G_{Si} I_2 + 2K_{Li,A} N_{Li}) N_A,$$

$$\frac{dN_E}{dt} = G_V \gamma_{V,P/V,O} I_1 N_{P(S)} - (G_{Si} \gamma_{Si,E/Si,A} I_2 + K_{Li,E} N_{Li}) N_E,$$

$$\frac{dN_K}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,C/Si,A} I_2 N_{C(S)},$$

$$\frac{dN_{SiB}}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,B/Si,A} I_2 N_{B(S)} - G_V \gamma_{V,SiB/V,O} I_1 N_{SiB},$$

$$\frac{dN_W}{dt} = G_W - 2K_{Li,W} N_{Li} N_W,$$

$$\frac{dN_{LiW}}{dt} = 2K_{Li,W} N_{Li} N_W - K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW},$$

$$\frac{dN_{Li_2W}}{dt} = K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW},$$

$$\frac{dN_{LiA}}{dt} = G_V \gamma_{V,LiO/V,O} I_1 N_{LiO} + 2K_{Li,A} N_{Li} N_A - (G_{Si} \gamma_{Si,LiA/Si,A} I_2 + K_{Li,LiA} N_{Li}) N_{LiA},$$

$$\frac{dN_{Li_2A}}{dt} = K_{Li,LiA} N_{Li} N_{LiA}, \quad (1.1)$$

$$\frac{dN_{LiE}}{dt} = K_{Li,E} N_{Li} N_E,$$

$$\frac{d\nu_{ev} N_{do}}{dt} = \nu_{vdo} G_{do} - K_{Li,do(\nu_{ev})} N_{Li} \nu_{ev} N_{do},$$

$$N_{Li} = \gamma_{LiO/Li,O} I_3 [\gamma_{LiO/Li,O} + N_{O(I)} + 2\gamma_{Li,A/Li,O} N_A + \gamma_{Li,LiA/Li,O} N_{LiA} + 2\gamma_{Li,W/Li,O} N_W + \gamma_{Li,LiW/Li,O} N_{LiW} + \gamma_{Li,E/Li,O} N_E + \gamma_{Li,do(\nu_{ev})/Li,O} \nu_{ev} N_{do}]^{-1},$$

$$N_{LiO} = I_3 - N_{Li},$$

$$N_{O(I)} = N_{O(I)}^0 - (N_A + N_K + N_{LiO} + N_{LiA} + N_{Li_2A}),$$

$$N_{P(S)} = N_{P(S)}^0 - (N_E + N_{LiE}),$$

$$N_{C(S)} = N_{C(S)}^0 - N_K,$$

$$N_{B(S)} = N_{B(S)}^0 - N_{SiB}.$$

Здесь

$$N_{do} = \begin{cases} G_{do} t & \text{на этапе облучения,} \\ G_{do} t_{об} & \text{на этапе отжига,} \end{cases}$$

$$I_1 = [N_{O(I)} + \gamma_{V,P/V,O} N_{P(S)} + \gamma_{V,SiB/V,O} N_{SiB} + \gamma_{V,LiO/V,O} N_{LiO}]^{-1},$$

$$I_2 = [N_A + \gamma_{Si,C/Si,A} N_{C(S)} + \gamma_{Si,B/Si,A} N_{B(S)} + \gamma_{Si,E/Si,A} N_E + \gamma_{Si,LiA/Si,A} N_{LiA}]^{-1},$$

$$I_3 = N_{Li}^0 - (N_{LiW} + 2N_{Li_2W} + N_{LiA} + 2N_{Li_2A} + N_{LiE} + (\nu_{vdo} - \nu_{ev}) N_{do}).$$

Коэффициенты вида  $\gamma_{U,X/Y,Z} = K_{U,X}/K_{Y,Z}$  ( $K_{X,Y}$  — константы прямых реакций дефектов типа X с дефектами типа Y [1, 2]);  $G_X$  — скорость генерации дефекта типа X ионизирующими частицами в течение времени  $t_{об}$ . Рассмотрим область температур 330–413 К, в которой комплексы, кроме  $LiO$ , являющиеся продуктами рассматриваемых реакций, стабильны [1, 2, 9]. Поэтому константы обратных реакций не входят в систему уравнений. Коэффициенты вида  $\gamma_{U,X/Y,Z}$  могут зависеть от температуры, но, так как интервал температур 330–413 К достаточно узок, этой зависимостью пренебрегаем. Значение  $\gamma_{V,P/V,O} \approx 60$  приведено в работе [1], а  $\gamma_{Si,C/Si,A} \approx 0, 1$  в работе [4].

Чтобы достичь согласия с экспериментальными данными по изменению концентрации основных носителей заряда (ОНЗ) в кремнии n- и p- типов проводимости под действием потока электронов, приведенными в [2], следует пренебречь непрямой рекомбинацией V и  $Si_I$  на атомах  $B_S$  и  $P_S$ , что дает  $K_{V,SiB} \approx 0$  и  $K_{Si,E} \approx 0$ , а также определить  $\gamma_{Si,B/Si,C} \approx 800$ . Непрямая рекомбинация V и  $Si_I$  на атомах  $O_I$  и комплексах  $LiO$  считалась равноправной, это дает  $\gamma_{V,LiO/V,O} = 1$ ,  $\gamma_{Si,LiA/Si,A} = 1$ . Для

Таблица 1. Начальная концентрация основных примесей

№ образца	тип проводимости	$N_P^0, \text{см}^{-3}$	$N_B^0, \text{см}^{-3}$	$N_{Li}^0, \text{см}^3$
1	n	$5,2 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{14}$	$10^{15}$
2	n	$5,2 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{14}$	$10^{16}$
3	n	$5,2 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{14}$	$10^{17}$
4	n	$1,52 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{14}$	0
5	n	$1,052 \cdot 10^{16}$	$3 \cdot 10^{14}$	0
6	n	$1,0052 \cdot 10^{17}$	$3 \cdot 10^{14}$	0
7	p	0	$2,22 \cdot 10^{15}$	$10^{15}$
8	p	0	$2,022 \cdot 10^{16}$	$10^{16}$
9	p	0	$2,0022 \cdot 10^{17}$	$10^{17}$
10	p	0	$1,22 \cdot 10^{15}$	0
11	p	0	$1,022 \cdot 10^{16}$	0
12	p	0	$1,0022 \cdot 10^{17}$	0

диффузионно контролируемых реакций с участием атомов Li константа прямой реакции  $K_{Li,X} = 4\pi a D_{Li}$  [9], где  $D_{Li}$  — коэффициент диффузии Li [5]. Поэтому коэффициенты вида  $\gamma_{Li,Y/Li,Z} = 1$ .

Атомы Li связаны в малоподвижные комплексы LiO. Отношение констант обратной и прямой реакций, зависящее от температуры,  $\gamma_{LiO/Li,O} = K_{LiO}/K_{Li,O}$  приведено в [5]. При повышении температуры часть комплексов LiO распадается. Освободившиеся атомы Li образуют комплексы с А-, Е-, К-центрами, дивакансиями.

Начальные концентрации кислорода и углерода в кремнии, выращенном методом Чохральского, выбирались в соответствии с паспортными данными:  $N_{O(I)}^0 = 7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{C(S)}^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Начальные концентрации основных примесей  $N_{P(S)}^0$ ,  $N_{B(S)}^0$ ,  $N_{Li}^0$  являются заданными величинами и определяют состав материала.

Система уравнений (1.1) решалась численно. Для дифференциальных уравнений первого порядка на каждом этапе решалась задача Коши со следующими начальными условиями: на первом этапе ( $t \in [0, t_{O6}]$ ):

$$N_A(0) = N_E(0) = N_K(0) = N_{SiB}(0) = N_W(0) = N_{LiW}(0) = N_{Li_2W}(0) = N_{LiA}(0) = N_{Li_2A}(0) = N_{LiE}(0) = 0, \nu_{ev}(0) = \nu_{vdo};$$

на втором этапе ( $t \in [0, t_{OT}]$ ) генерации дефектов нет:

$$\begin{aligned} (G_V = G_{Si} = G_W = G_{do} = 0), \\ N_A(0) = N_A(t_{O6}), N_E(0) = N_E(t_{O6}), \\ N_K(0) = N_K(t_{O6}), \\ N_{SiB}(0) = N_{SiB}(t_{O6}), N_W(0) = N_W(t_{O6}), \\ N_{LiW}(0) = N_{LiW}(t_{O6}), N_{Li_2W}(0) = N_{Li_2W}(t_{O6}), \\ N_{LiA}(0) = N_{LiA}(t_{O6}), N_{Li_2A}(0) = N_{Li_2A}(t_{O6}), \end{aligned}$$

$$N_{LiE}(0) = N_{LiE}(t_{O6}), \nu_{ev}(0) = \nu_{ev}(t_{O6}).$$

## 2. Результаты расчетов и их обсуждение

С помощью построенной модели рассчитаны зависимости концентраций ВРД, основных носителей заряда, а также коэффициентов повреждения от энергии ионизирующих протонов и электронов [10, 11]. Для определения закономерностей, влияющих на увеличение длительности работы электронных приборов в условиях радиационного облучения, моделируем временную зависимость концентрации ВРД в процессе низкотемпературного изохронного отжига.

Расчеты проводились для образцов с различной начальной концентрацией легирующей примеси (табл. 1). До облучения образцы №№ 1–6 имели n-тип проводимости, а №№ 7–12 — p-тип проводимости. Концентрация примесей выбрана так, чтобы можно было сравнивать образцы с близкой начальной концентрацией основных носителей заряда. Малая концентрация бора присутствует в образцах №№ 1–6, так как бор зачастую является сопутствующей примесью в кремнии n-типа.

Отжигу предшествует кратковременное облучение электронами с энергией 3 МэВ, интенсивностью  $I_0 t_{O6} = 10^{16} \text{ см}^{-2}$  (рис. 1), либо протонами с энергией 20 МэВ, интенсивностью  $I_0 t_{O6} = 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  (рис. 2, рис. 3). Значения скорости генерации первичных радиационных дефектов для этих условий приведены в табл. 2 [10]. Время облучения  $t_{O6} = 100$  сек., температура  $T_{O6} = 330$  К. За это время атомы Li не успевают пассивировать

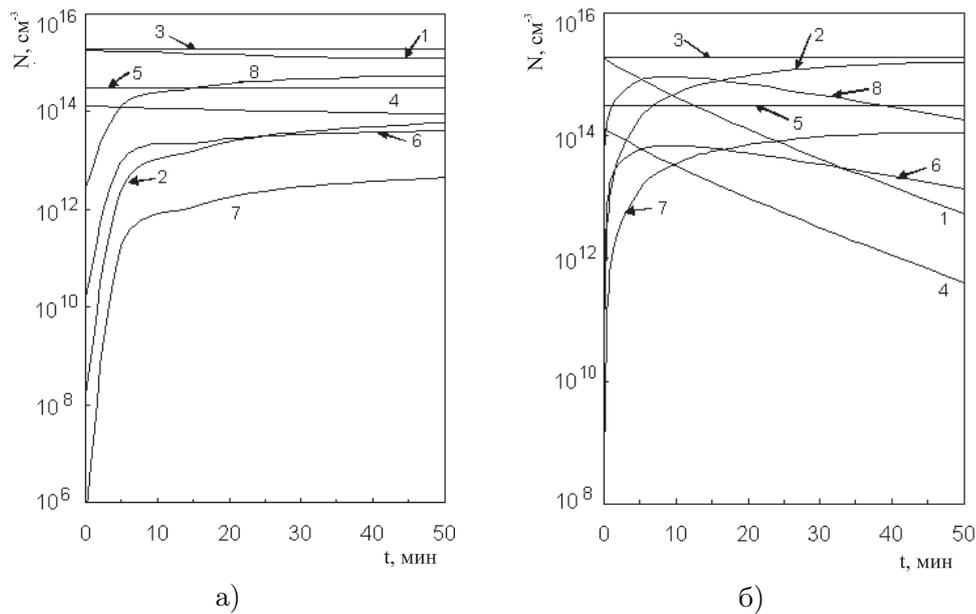


Рис. 1. Зависимость концентрации вторичных радиационных дефектов от времени отжига: *a* — образец № 1; *б* — образец № 2; 1 — А- центры; 2 — комплексы  $\text{Li}_2\text{A}$ ; 3 — К центры; 4 — дивакансии W; 5 — комплексы  $\text{Si}_1\text{B}$ ; 6 — комплексы  $\text{LiW}$ ; 7 — комплексы  $\text{Li}_2\text{W}$ ; 8 — комплексы  $\text{LiA}$

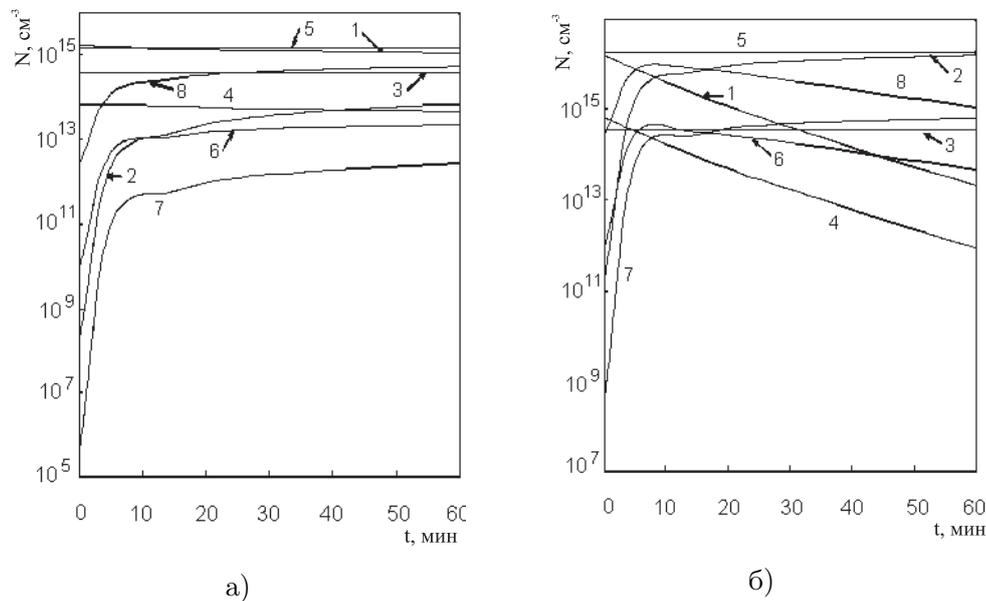


Рис. 2. Зависимость концентрации вторичных радиационных дефектов от времени отжига: *a* — образец № 7; *б* — образец № 8; 1 — А- центры; 2 — комплексы  $\text{Li}_2\text{A}$ ; 3 — К центры; 4 — дивакансии W; 5 — комплексы  $\text{Si}_1\text{B}$ ; 6 — комплексы  $\text{LiW}$ ; 7 — комплексы  $\text{Li}_2\text{W}$ ; 8 — комплексы  $\text{LiA}$

Таблица 2. Скорость генерации первичных радиационных дефектов в расчете на одну ионизирующую частицу

Частицы	$G_{\text{Si}}/I_0, \text{см}^{-1}$	$G_{\text{V}}/I_0, \text{см}^{-1}$	$G_{\text{W}}/I_0, \text{см}^{-1}$	$G_{\text{do}}/I_0, \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{vdo}}$
электроны, 3 МэВ	$2,2 \cdot 10^{-1}$	$1,9 \cdot 10^{-1}$	$0,13 \cdot 10^{-1}$	0	0
протоны, 20 МэВ	$3,7 \cdot 10^{12}$	$3,4 \cdot 10^{12}$	$0,14 \cdot 10^{12}$	$0,16 \cdot 10^{10}$	202

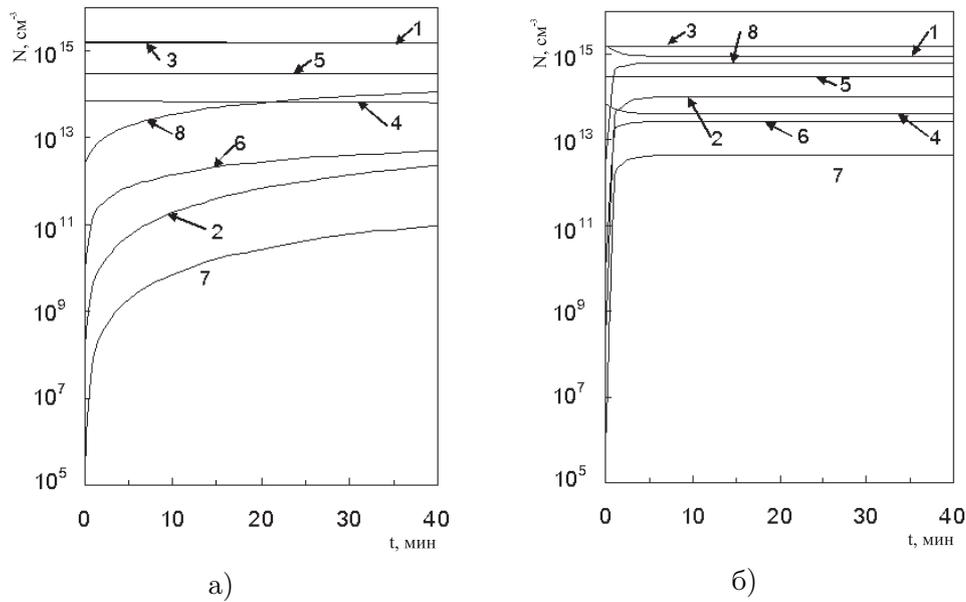


Рис. 3. Зависимость концентрации ВРД от времени отжига: *а* —  $T_{от} = 353$  К; *б* —  $T_{от} = 413$  К; 1 — А-центры; 2 — комплексы  $Li_2A$ ; 3 — К-центры; 4 — дивакансии W; 5 — комплексы SiB; 6 — комплексы LiW; 7 — комплексы  $Li_2W$ ; 8 — комплексы LiA; 9 — Е-центры

ВРД, их концентрация оказывается такой, как в безлитиевом кремнии.

В случаях, представленных на рис. 1, 2,  $T_{от} = 373$  К. Значения концентраций ВРД при  $t = 0$  получены в результате моделирования первого этапа. Концентрация ВРД, не взаимодействующих с атомами Li, не изменяется, например, К-центров и комплексов SiB (линии 3, 5 на рис. 1, 2). Концентрации А-центров (линия 1) и дивакансий (линия 4) монотонно уменьшаются, достигая постоянного значения при  $N_{Li} = 0$ . На рис. 1б и рис. 2б скорость убывания  $N_A$  и  $N_W$  больше, а конечное значение меньше, чем на рис. 1а и рис. 2а, так как эти величины зависят от начальной концентрации лития. Увеличивая  $N_{Li}^0$ , можно повысить эффективность отжига.

Комплексы LiA (линия 8) и LiW (линия 6) являются промежуточными при формировании комплексов  $Li_2A$  и  $Li_2W$ , соответственно. Концентрации устойчивых комплексов  $Li_2A$  (линия 2) и  $Li_2W$  (линия 7) монотонно возрастают, стремясь к постоянным значениям при  $N_{Li} = 0$ . Эти значения выше для образцов с большим  $N_{Li}^0$ , однако не превышают концентраций исходных ВРД, образовавшихся на первом этапе. Промежуточные комплексы образуются из ВРД, способных присоединять более одного атома Li. При достаточно высоком значении  $N_{Li}^0$  (рис. 1б, 2б) концентрации промежуточных комплексов сначала увеличиваются, достигая максимума, а затем уменьша-

ются вследствие присоединения второго атома Li. В случае, представленном на рис. 1а, 2а, зависимости 6 и 8 не достигают максимального значения, так как концентрации Li недостаточно для смещения баланса в сторону образования комплексов  $Li_2W$  и  $Li_2A$ .

На этапе облучения протонами формируются области разупорядочения с концентрацией  $N_{do} = 2,85 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , количеством вакансий  $\nu_{vdo} = 202$  и радиусом  $R_{do} = 60,1$  нм. В процессе отжига атомы Li присоединяются к ненасыщенным валентным связям, так что через 60 мин остается  $\nu_{ev} = 162$  для образца с  $N_{Li}^0 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и  $\nu_{ev} = 7$  для образца с  $N_{Li}^0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

Рассмотренные закономерности проявляются за меньший промежуток времени при увеличении температуры отжига (рис. 3). На этапе облучения образца №1 радиационные дефекты создавались протонами. При  $T_{от} = 353$  К в течение 40 мин (рис. 3а) менее 20% атомов Li успевают образовать комплексы с ВРД, поэтому концентрации А-центров (линия 1), дивакансий (линия 4) и Е-центров (линия 9) изменяются мало, а концентрации комплексов  $Li_2A$  (линия 2), LiW (линия 6),  $Li_2W$  (линия 7), LiA (линия 8) не выходят на насыщение.

При  $T_{от} = 413$  К (рис. 3б) концентрации ВРД выходят на постоянные значения после 5 мин отжига, так как концентрация свобод-

ного лития  $N_{Li}$  стремится к 0. При  $t \in [0; 5 \text{ мин}]$  концентрации А- центров, Е- центров и дивакансий монотонно уменьшаются, а комплексов  $LiA$ ,  $Li_2A$ ,  $LiW$  и  $Li_2W$  монотонно возрастают со временем отжига.

Среднее количество вакансий в областях разупорядочения изменяется в процессе отжига за 60 мин от начального значения  $\nu_{ev} = 202$  до конечного  $\nu_{ev} = 191$  при  $T_{от} = 353 \text{ К}$  и до  $\nu_{ev} = 151$  при  $T_{от} = 413 \text{ К}$ .

Система уравнений (1.1) нелинейна, поэтому её решение не описывается экспоненциальной функцией. Рассчитанные зависимости концентраций дефектов от времени можно аппроксимировать экспонентами локально на отдельных интервалах отжига. Например, в случае, представленном на рис. 2, изменение концентраций А- центров  $N_A$  и дивакансий  $N_W$  в начале этапа отжига приближенно описывается формулой

$$N_{A(W)}(t) = N(0)_{A(W)} e^{-t/t_{изм}},$$

где  $t_{изм}$  — характерное время уменьшения концентрации дефектов, зависящее от температуры отжига и концентрации Li. При  $T_{от} = 353 \text{ К}$  для образца №7  $t_{изм} = 4,08 \cdot 10^3 \text{ с}$ , для образца №8  $t_{изм} = 4,48 \cdot 10^2 \text{ с}$ .

Пассивация ВРД может происходить в процессе облучения, если  $t_{об} \geq t_{изм}$ . Облучение будем считать импульсным, если  $t_{прд} \ll t_{об} < t_{изм}$ , где  $t_{прд}$  — характерное время образования первичных радиационных дефектов. Последнее неравенство выполняется на этапе облучения с  $t_{об} = 100 \text{ с}$ ,  $T_{об} = 330 \text{ К}$ . В режиме изотемпературного отжига при  $t_{от} > t_{изм}$  существенно уменьшается концентрация электрически и рекомбинационно активных ВРД (рис. 16, 26), поэтому происходит частичное восстановление параметров материала. Степень восстановления кремния зависит от соотношения конечных и начальных значений концентраций электрически и рекомбинационно активных ВРД и примесей.

Проведенный анализ взаимодействия радиационных дефектов с примесями в кремнии, выращенном методом Чохральского, легированном литием показывает, что повышение на-

чальной концентрации Li до значений, превышающих суммарную концентрацию ВРД, увеличивает не только проводимость после отжига, но и скорость уменьшения концентрации ВРД. Моделирование кинетики радиационного дефектообразования позволяет определить оптимальные значения концентрации лития для заданных условий облучения, отжига и примесного состава. За счет этого можно существенно повысить радиационную стойкость кремния и приборов на его основе.

### Литература

1. Емцев В. В., Машовец Т. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М.: Радио и связь, 1981. 248 с.
2. Кузнецов Н. В., Соловьев Г. Г. Радиационная стойкость кремния. М.: Энергоатомиздат, 1989. 96 с.
3. Вавилов В. С., Киселев В. Ф., Мукашев Б. Н. Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука, 1990. 216 с.
4. Холодарь Г. А., Данковский Ю. И., Конопляный В. В., Винецкий В. Л. Непрямая рекомбинация вакансий и межузельных атомов в облучаемом кремнии // ФТП. 1976. Т. 10. Вып. 9. С. 1712–1718.
5. Вавилов В. С., Кив А. Е., Ниязова О. Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М.: Наука, 1981. 368 с.
6. Gilmer T. E., Franks R. K., Bell R. I. An optimal study of lithium and lithium-oxygen complexes as donor impurities in silicon // Phys. Chem. Solids. 1965. Vol. 26. N. 8. P. 1195–1204.
7. Вавилов В. С., Ухин Н. А. Радиационные эффекты в полупроводниках и полупроводниковых приборах. М.: Атомиздат, 1969. 205 с.
8. Weinberg I., Irving, Swarts C. K., Mehta S. Increased radiation solar resistance in lithium - counterdoped silicon solar cells // Appl. Phys. Lett. 1984. Vol. 44. N. 11. P. 1071–1073.
9. Асеев А. Л., Федина Л. И., Хель Д., Барч Х. Скопление межузельных атомов в кремнии и германии. Новосибирск.: Наука. Сиб. Отделение, 1991. 149 с.
10. Богатов Н. М. Радиационные дефекты в кремнии, выращенном методом Чохральского // Поверхность. 1999. №3. С. 72–78.
11. Богатов Н. М. Радиационные дефекты в кремнии, выращенном методом Чохральского, легированном литием // Поверхность. 1999. №8. С. 66–69.