

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЖИГА РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ  
В ЛИТИЙ СОДЕРЖАЩЕМ КРЕМНИИ

Богатов Н.М., Коваленко М.С.

*Кубанский государственный университет*

*Краснодар, Россия*

bogatov@phys.kubsu.ru

Радиационные дефекты являются одной из причин деградации кремниевых полупроводниковых приборов. Возрастающие требования к радиационной стойкости стимулируют создание математических моделей с целью анализа возможностей восстановления параметров этого материала.

Атомы лития взаимодействуют с радиационными дефектами в кремнии. В работе рассчитано изменение концентрации вторичных радиационных дефектов (ВРД) в течение изотемпературного отжига литий содержащего кремния. Модель кинетики дефектообразования включает 2 этапа. На первом этапе ВРД образуются под действием ионизирующих частиц с энергией  $E$ , интенсивностью потока  $I_0$  за время облучения  $t_\phi$  при температуре  $T_{об}$ . На втором этапе ионизирующее излучение отсутствует, проводится отжиг при температуре  $T_{от} > T_{об}$ , малоподвижные комплексы  $LiO$  распадаются, а свободные атомы  $Li$  пассивируют вторичные радиационные дефекты, концентрации которых уменьшаются и выходят на стационарные значения.

Временная зависимость концентраций ВРД описывается системой уравнений квазихимических реакций. В кремнии, выращенном методом Чохральского, эта система приводится к виду

$$\frac{dN_A}{dt} = G_V I_1 N_{O(I)} - (G_{Si} I_2 + 2K_{Li,A} N_{Li}) N_A, \quad (1)$$

$$\frac{dN_E}{dt} = G_V \gamma_{V,P/V,O} I_1 N_{P(S)} - (G_{Si} \gamma_{Si,E/Si,A} I_2 + K_{Li,E} N_{Li}) N_E, \quad (2)$$

$$\frac{dN_K}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,C/Si,A} I_2 N_{C(S)}, \quad (3)$$

$$\frac{dN_{SiB}}{dt} = G_{Si} \gamma_{Si,B/Si,A} I_2 N_{B(S)} - G_V \gamma_{V,SiB/V,O} I_1 N_{SiB}, \quad (4)$$

$$\frac{dN_W}{dt} = G_W - 2K_{Li,W} N_{Li} N_W, \quad (5)$$

$$\frac{dN_{LiW}}{dt} = 2K_{Li,W} N_{Li} N_W - K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW}, \quad (6)$$

$$\frac{dN_{Li_2W}}{dt} = K_{Li,LiW} N_{Li} N_{LiW}, \quad (7)$$

$$\frac{dN_{LiA}}{dt} = G_V \gamma_{V,LiO/V,O} I_1 N_{LiO} + 2K_{Li,A} N_{Li} N_A - (G_{Si} \gamma_{Si,LiA/Si,A} I_2 + K_{Li,LiA} N_{Li}) N_{LiA}, \quad (8)$$

$$\frac{dN_{Li_2A}}{dt} = K_{Li,LiA} N_{Li} N_{LiA}, \quad (9)$$

$$\frac{dN_{LiE}}{dt} = K_{Li,E} N_{Li} N_E, \quad (10)$$

$$\frac{dv_{ev} N_{do}}{dt} = v_{vdo} G_{do}(v_{vdo}) - K_{Li,do(v_{ev})} N_{Li} v_{ev} N_{do}, \quad (11)$$

$$N_{do} = \begin{cases} G_{do}(v_{vdo})t & \text{при } t \leq t_\phi, \\ G_{do}(v_{vdo})t_\phi & \text{при } t > t_\phi, \end{cases} \quad (12)$$

$$N_{Li} = \gamma_{LiO/Li,O} I_3 [\gamma_{LiO/Li,O} + N_{O(O)} + 2\gamma_{Li,A/Li,O} N_A + \gamma_{Li,LiA/Li,O} N_{LiA} + 2\gamma_{Li,W/Li,O} N_W + \gamma_{Li,LiW/Li,O} N_{LiW} + \gamma_{Li,E/Li,O} N_E + \gamma_{Li,do(v_{ev})/Li,O} v_{ev} N_{do}]^{-1}, \quad (13)$$

$$N_{LiO} = I_3 - N_{Li}, \quad (14)$$

$$N_{O(O)} = N_{O(O)}^0 - (N_A + N_K + N_{LiO} + N_{LiA} + N_{Li_2A}), \quad (15)$$

$$N_{P(S)} = N_{P(S)}^0 - (N_E + N_{LiE}), \quad (16)$$

$$N_{C(S)} = N_{C(S)}^0 - N_K, \quad (17)$$

$$N_{B(S)} = N_{B(S)}^0 - N_{SiB}, \quad (18)$$

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

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

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

Уравнения (1–18) содержат следующие переменные концентрации:  $N_A$  – А-центров,  $N_E$  – Е-центров,  $N_K$  – К-центров,  $N_{SiB}$  – комплексов SiB,  $N_W$  – дивакансий,  $N_{LiW}$  – комплексов LiW,  $N_{Li_2W}$  – комплексов Li<sub>2</sub>W,  $N_{LiA}$  – комплексов LiA,  $N_{Li_2A}$  – комплексов Li<sub>2</sub>A,  $N_{LiE}$  – комплексов LiE,  $N_{do}$  – областей разупорядочения с средним числом вакансий  $v_{ev}$ ,  $N_{Li}$  – атомов Li,  $N_{LiO}$  – комплексов LiO,  $N_{O(O)}$  – атомов внедрения кислорода,  $N_{P(S)}$  – атомов замещения фосфора,  $N_{C(S)}$  – атомов замещения углерода,  $N_{B(S)}$  – атомов замещения бора.

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) определялись из экспериментальных или теоретических данных;  $G_X$  – скорость генерации дефекта X рассчитывалась для каждого типа ионизирующих частиц. Модель применима в области температур, в которой комплексы, являющиеся продуктами квазихимических реакций, стабильны, поэтому константы обратных реакций не входят в уравнения (1–14), кроме того, зависимостью коэффициентов вида  $\gamma_{U,X/Y,Z}$  от температуры можно пренебречь.

Свойства материала зависят от начальных концентраций основных примесей: донорных атомов фосфора  $N_{P(S)}^0$ , лития  $N_{Li}^0$  и акцепторных атомов бора  $N_{B(S)}^0$ , – а также сопутствующих примесей кислорода  $N_{O(O)}^0$  и углерода  $N_{C(S)}^0$ .

Уравнения (1–18) решались численно. Для уравнений (1–11) задавались следующие начальные условия: на первом этапе

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

на втором этапе

$$N_A(0) = N_A(t_\phi), N_E(0) = N_E(t_\phi), N_K(0) = N_K(t_\phi), N_{SiB}(0) = N_{SiB}(t_\phi), N_W(0) = N_W(t_\phi), N_{LiW}(0) = N_{LiW}(t_\phi), N_{Li_2W}(0) = N_{Li_2W}(t_\phi), N_{LiA}(0) = N_{LiA}(t_\phi), N_{Li_2A}(0) = N_{Li_2A}(t_\phi), N_{LiE}(0) = N_{LiE}(t_\phi), v_{ev}(0) = v_{ev}(t_\phi).$$

В результате моделирования определены зависимости концентрации ВРД от начальной концентрации Li, температуры и времени отжига в кремнии n- и p-типа, облученном потоком электронов или протонов. Оптимальные значения концентрации лития, температуры и времени отжига, соответствующие условиям интенсивного облучения, позволяют существенно повысить время жизни носители заряда в облученном кремнии.