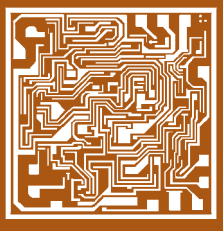
ISSN 0544-1269

Том 52, Номер 4 Июль - Август 2023

ЖУРНАЛ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА



www.sciencejournals.ru

300 лет Российская Академия Наук

СОДЕРЖАНИЕ

Том 52, номер 4, 2023

КВАНТОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Томографии детекторов с учетом мертвого времени

Ю. И. Богданов, К. Г. Катамадзе, Н. А. Борщевская, Г. В. Авосопянц, Н. А. Богданова, С. П. Кулик, В. Ф. Лукичев 249

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделирование кремниевых полевых с полностью охватывающим затвором нанотранзисторов с высоким *k* подзатворного диэлектрика

Н. В. Масальский 256

Влияние граничных условий на квантовый магнетотранспорт в тонкой пленке

И. А. Кузнецова, О. В. Савенко, Д. Н. Романов 262

НАДЕЖНОСТЬ

Исследование чувствительной области МОП-транзистора к воздействию вторичных частиц, возникающих вследствие ионизирующего излучения

А. А. Глушко, С. А. Морозов, М. Г. Чистяков 282

Одиночные структурные повреждения в СБИС

А. И. Чумаков 290

ПЛАЗМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Концентрация атомов фтора и кинетика реактивно-ионного травления кремния в смесях $CF_4 + O_2$, $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$

А. М. Ефремов, А. В. Бобылев, К.-Н. Kwon 298

ПРИБОРЫ

Влияние структурных дефектов на электрофизические параметры *p*-*i*-*n*-фотодиодов

Н. С. Ковальчук, С. Б. Ластовский, В. Б. Оджаев, А. Н. Петлицкий, В. С. Просолович, Д. В. Шестовский, В. Ю. Явид, Ю. Н. Янковский 307

Многоуровневые мемристивные структуры на основе эпитаксиальных пленок $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

Н. А. Тулина, А. Н. Россоленко, И. Ю. Борисенко, А. А. Иванов 315

СЕНСОРЫ

Исследование сенсорных свойств упорядоченных массивов наностержней ZnO для детектирования УФ-излучения

М. В. Евстафьева, М. А. Князев, В. И. Корепанов, А. Н. Редькин, Д. В. Рощупкин, Е. Е. Якимов 322

ТЕХНОЛОГИИ

Влияние мощности магнетронного распыления на осаждение пленок ITO при комнатной температуре

А. В. Саенко, З. Е. Вакулов, В. С. Климин, Г. Е. Билык, С. П. Малюков 329

Механизмы перераспределения углеродных загрязнений в пленках, сформированных методом атомно-слоевого осаждения

А. В. Фадеев, А. В. Мяконьких, Е. А. Смирнова, С. Г. Симакин, К. В. Руденко 336

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 249–255

КВАНТОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ТОМОГРАФИИ ДЕТЕКТОРОВ С УЧЕТОМ МЕРТВОГО ВРЕМЕНИ

© 2023 г. Ю. И. Богданов[a, *], К. Г. Катамадзе[a], Н. А. Борщевская[a, b], Г. В. Авосопянц[a, b], Н. А. Богданова[a], С. П. Кулик[b], В. Ф. Лукичев[a]

[a] *Физико-технологический институт им. К.А. Валиева Российской академии наук, Нахимовский просп., 36, корп. 1, Москва, 117218 Россия*

[b] *Центр квантовых технологий МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 35, Москва, 119991 Россия*

**E-mail: bogdanov_yurii@inbox.ru*

Поступила в редакцию 06.12.2022 г.
После доработки 20.12.2022 г.
Принята к публикации 22.12.2022 г.

Методами численного моделирования с учетом эффекта мертвого времени разработаны алгоритмы расчета отклика детектора для потоков фотонов, имеющих различные распределения по числу фотонов, в том числе пуассоновское, фоковское и тепловое. На основе полученных результатов разработан метод томографии детекторов, а также алгоритм идентификации соответствующих элементов положительной операторно-значной меры (POVM). Экспериментальные исследования с использованием когерентных состояний показали близкое соответствие между результатами расчетов и экспериментальными данными.

Ключевые слова: детекторы фотонов; мертвое время детектора; когерентные состояния, фоковские состояния, тепловые состояния

DOI: 10.31857/S0544126923700369, **EDN:** FEIKNA

1. ВВЕДЕНИЕ

Детекторы фотонов, которые могут различать число фотонов, широко используются во многих областях, где требуется обнаружение сверхслабого пучка света, включая квантовую оптику [1], метрологию [2] и формирование изображений [3]. Обычно используются фотоумножители (ФЭУ) [4], лавинные фотодиоды (ЛФД) [5], сверхпроводящие нанополосковые фотонные детекторы (СНПФД) [6] и др.

Существует два принципиально различных подхода к характеризации детектора: первый подход заключается в тщательном изучении влияния всех существенных эффектов на процесс детектирования, возникающих из-за технологических особенностей различных компонентов детектора и их взаимодействия. Такой подход сводится к разработке подробной модели процесса детектирования. Однако рассматриваемый подход может легко стать непрактичным для сложных детекторных систем. Второй подход – это квантовая томография детектора, целью которой является реконструкция операторов измерений на основе данных, полученных от самого детектора [7, 8].

Квантовая томография детектора как стандартный метод описания неизвестного процесса измерения имеет основополагающее значение для таких задач, как томография квантового состояния [9–12], идентификация квантового гамильтониана, томография квантовых процессов [13, 14] и квантовый контроль [15]. Квантовая томография описывает детектор положительной операторнозначной мерой (Positive Operator-Valued Measure-POVM), полностью характеризующей устройство. POVM можно реконструировать, анализируя результаты процесса детектирования, полученные для томографически полного набора входных состояний.

Когда операторы, описывающие детектор, оказываются диагональными в фоковском базисе, они являются фазово-нечувствительными (в противном случае фазово-чувствительными) детекторами и могут быть прямо определены с помощью статистического восстановления соответствующих аналитических функций [16] или выпуклой оптимизации [8, 17, 18]. POVM-элементы для фазово-чувствительных детекторов, как правило, нельзя привести к диагональному виду, поэтому их реконструкция является более сложной. Существующие методы включают оценку максимального правдоподобия [19], линейную регрессию [20], выпукло-квадратичную оптимизацию [21] и аналитическое двухэтапное решение [22]. Если полная характеризация детектора не является основным интересом, существуют другие альтернативы квантовой

томографии детектора, такие как самотестирование [23] и самокалибровка [24].

Целью квантовой томографии детекторов является реконструкция функции $P_0(n, j)$, задающей вероятность зарегистрировать в многоканальной системе детекторов j щелчков (кликов) при условии попадания в нее n фотонов. Такая функция могла бы быть измерена непосредственно, если бы были легко доступны источники фоковских n-фотонных состояний для различных n в широком диапазоне значений. Такие источники, однако, все еще трудно доступны, поэтому для томографии детекторов приходится использовать лазерные когерентные состояния, характеризующиеся пуассоновской статистикой.

Пусть $P_{Poiss}(\lambda, n)$ – вероятность иметь состояние с n фотонами для когерентного состояния с амплитудой α, характеризующегося средним числом фотонов, равным $\lambda = |\alpha|^2$. Именно такие состояния подаются в эксперименте на вход многоканального детектора. На выходе же детектора приближенно измеряется функция $P_{\exp}(\lambda, j)$, характеризующая вероятность регистрации в системе j щелчков (кликов) при условии облучения когерентным состоянием с параметром $\lambda = |\alpha|^2$.

Введенные функции связаны между собой следующим соотношением:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{Poiss}(\lambda, n) P_0(n, j) = P_{\exp}(\lambda, j), \qquad (1)$$

где $P_{Poiss}(\lambda, n) = \frac{\lambda^n}{n!}\exp(-\lambda)$ – распределение Пуассона.

Выражение (1) задает обратную задачу, связанную с нахождением неизвестной функции $P_0(n, j)$ по приближенно измеренной в эксперименте функции $P_{\exp}(\lambda, j)$. Хорошо известно, что в общем случае такие задачи являются некорректно поставленными и требуют регуляризации [25]. В простейшем идеальном случае $P_0(n, j)$ представляет собой биномиальное распределение, определяющее вероятность получить j успехов в серии из n независимых испытаний при условии, что вероятность успеха определяется эффективностью детектора η. В реальных задачах, однако, биномиальное распределение малопригодно по двум основным причинам. Во-первых, временное окно ограниченно некоторой конечной длительностью T и, таким образом, может быть зарегистрировано конечное (обычно небольшое) число фотонов. Во-вторых, обычно используемый лавинный детектор в силу своих конструктивных особенностей обладает некоторым конечным ненулевым "мертвым временем" τ. При регистрации фотона возникает электронная лавина, которая "ослепляет" детектор на время τ в течение которого детектор не способен регистрировать другие возможные фотоны.

2. СТАТИСТИКА ФОТООТСЧЕТОВ С УЧЕТОМ МЕРТВОГО ВРЕМЕНИ. ЗАДАННОЕ ЧИСЛО N ФОТОНОВ НА ВХОДЕ

Чтобы явно выделить эффекты "мертвого" времени, предположим вначале, что квантовая эффективность детектора η равна 100%, т.е. $\eta = 1$. Полное время экспозиции примем за единицу: $T = 1$. В дальнейшем результаты будут обобщены на случай произвольных η и T.

Пусть k – число зарегистрированных фотонов, а τ – "мертвое" время детектора.

Для простоты в аналитических расчетах мы рассматриваем асимптотическое приближение, когда число фотонов велико (формально $N \to \infty$), мертвое время мало (формально $\tau \to 0$), а их произведение стремится к конечному числу ($N\tau \to n_0 = \text{const}$). В численном моделировании указанные величины могут быть произвольными.

В рассматриваемой задаче $k\tau$ – суммарное "мертвое" время, а $1 - k\tau$ – суммарное "живое" время. Понятно, что $1 - k\tau$ характеризует долю зарегистрированных фотонов, а $k\tau$ – долю потерянных фотонов.

Если N – заданное (фиксированное) число фотонов на входе, то $N(1 - k\tau)$ есть ожидаемое число зарегистрированных фотонов. Наблюдаемое число отсчетов k отличается от ожидаемого числа отсчетов $N(1 - k\tau)$ на величину флуктуации, которая определяется дисперсией $N(1 - k\tau)k\tau$. В асимптотическом гауссовом приближении соответствующая флуктуация есть $\xi\sqrt{N(1 - k\tau)k\tau}$, где $\xi \sim N(0,1)$ – гауссова случайная величина с нулевым средним и единичной дисперсией. Таким образом:

$$k = N(1 - k\tau) + \xi\sqrt{N(1 - k\tau)k\tau}. \qquad (2)$$

Пусть $M(k) = k_0$ – ожидаемое число отсчетов. Тогда, усредняя представленное равенство и учитывая, что $M(\xi) = 0$, получим: $k_0 = N(1 - k_0\tau)$, откуда получим:

$$k_0 = \frac{N}{1 + N\tau}. \qquad (3)$$

Формула (2) определяет деградацию числа отсчетов из-за мертвого времени. Из (3) имеем непосредственно

$$N = \frac{k_0}{1 - k_0\tau}. \qquad (4)$$

Формула (4) может служить для оценки неизвестного числа N фотонов на входе по измеренному среднему числу k_0 зарегистрированных фотонов.

Учтем теперь влияние флуктуации в формуле (2). Перенося первое слагаемое из правой части в левую, получим: $k(1+N\tau)-N = \xi\sqrt{N(1-k\tau)k\tau}$. Пусть $k = k_0 + \xi\sigma$, где σ – искомое стандартное отклонение (корень из дисперсии). Тогда $\xi\sigma(1+N\tau) = \xi\sqrt{N(1-k\tau)k\tau}$. Будем использовать в правой части приближение $k \approx k_0$. Тогда получим:

$$\sigma^2 = \frac{N^2\tau}{(1+N\tau)^4}. \quad (5)$$

Пусть $n_0 = N\tau$ – среднее число фотонов, попадающих во временной интервал, равный мертвому времени τ. Перепишем полученную формулу для дисперсии зарегистрированного числа отсчетов в виде:

$$\sigma^2 = \frac{Nn_0}{(1+n_0)^4}. \quad (6)$$

Мы видим, что дисперсия асимптотически неограниченно растет линейно, если $N \to \infty$, а $n_0 = \text{const}$.

Таким образом, в случае фоковских состояний с заданным числом фотонов N, формула (3) задает искомое выражение для среднего числа отсчетов, (5) и (6) – искомые формулы для дисперсии числа отсчетов.

3. СТАТИСТИКА ФОТООТСЧЕТОВ С УЧЕТОМ МЕРТВОГО ВРЕМЕНИ. ПУАССОНОВСКИЙ ПОТОК ФОТОНОВ НА ВХОДЕ

Пусть имеется пуассоновский поток на входе и λ – среднее число фотонов, поступающих за время $T = 1$. Из-за мертвого времени вероятность выживания фотона есть $p = (1-k\tau)$. При этом выживает только поток, равный $\lambda(1-k\tau)$, но само распределение остается пуассоновским. Пуассоновская флуктуация есть $\xi\sqrt{\lambda(1-k\tau)}$ и вместо (2) получаем:

$$k = \lambda(1-k\tau) + \xi\sqrt{\lambda(1-k\tau)}. \quad (7)$$

Вместо (3) для среднего числа регистрируемых фотонов k_0 получим:

$$k_0 = \frac{\lambda}{1+\lambda\tau}. \quad (8)$$

Учет флуктуации приводит к равенству $\xi\sigma(1+\lambda\tau) = \xi\sqrt{\lambda(1-k\tau)}$, откуда имеем выражение для дисперсии:

$$\sigma^2 = \frac{\lambda}{(1+\lambda\tau)^3}. \quad (9)$$

Таким образом, в случае пуассоновского потока фотонов на входе, формула (8) – искомое выражение для среднего числа отсчетов, (9) – искомая формула для дисперсии числа отсчетов.

Рассматривая конечную эффективность детектора η и вводя размерное временное окно T, перепишем формулу (8) в виде:

$$k_0 = \frac{\eta\lambda}{\left(1+\eta\lambda\frac{\tau}{T}\right)}. \quad (10)$$

Здесь λ – пуассоновский параметр, задающий среднее число фотонов на входе, поступивших за время T; $\eta\lambda$ – среднее число входящих за время T фотонов, скорректированное с учетом конечной эффективности детектора η; k_0 – среднее число зарегистрированных за время T фотонов.

Из формулы (10) находим:

$$\eta\lambda = \frac{k_0}{\left(1-k_0\frac{\tau}{T}\right)}. \quad (11)$$

Полученная формула может служить для оценки входного потока фотонов λ по среднему числу зарегистрированных фотонов k_0.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В эксперименте измерялось число отсчетов детектора за фиксированное время накопления $T = 128$ нс при засветке сильно ослабленным лазерным излучением (рис. 1). В качестве источника использовался непрерывный одномодовый волоконный лазер с брэгговской решеткой на длине волны 810 нм. Детектирование осуществлялось однофотонным модулем счета фотонов на основе кремниевого лавинного фотодиода Laser Components Count-50C. По данным производителя, частота темновых отсчетов равна 36 Гц, квантовая эффективность на рабочей длине волны 66%, мертвое время 42 нс.

Было проведено 6 серий измерений статистики фотоотсчетов, в каждой из которых интенсивность источника излучения была фиксирована. От серии к серии параметр $R\tau$ менялась в диапазоне от 0.2 до 2.31, где R – среднее число регистрируемых фотоотсчетов за 1 с, τ – мертвое время детектора. В терминах формул (10) и (11) указанный параметр есть $R\tau = \frac{k_0\tau}{T}$.

В каждой серии измерений фиксировалась интенсивность источника и измерялась статистика числа фотоотсчетов во временных бинах длины T

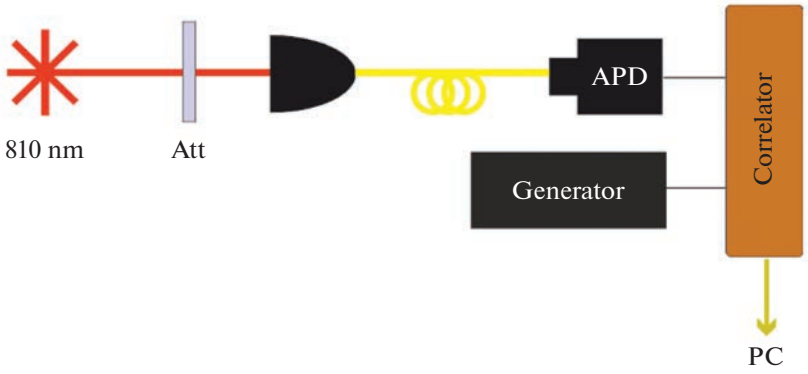


Рис. 1. Схема установки по измерению статистики фотоотсчетов. Att – поглощающий фильтр, APD – исследуемый детектор, Correlator – аналого-цифровой преобразователь (АЦП), PC – персональный компьютер.

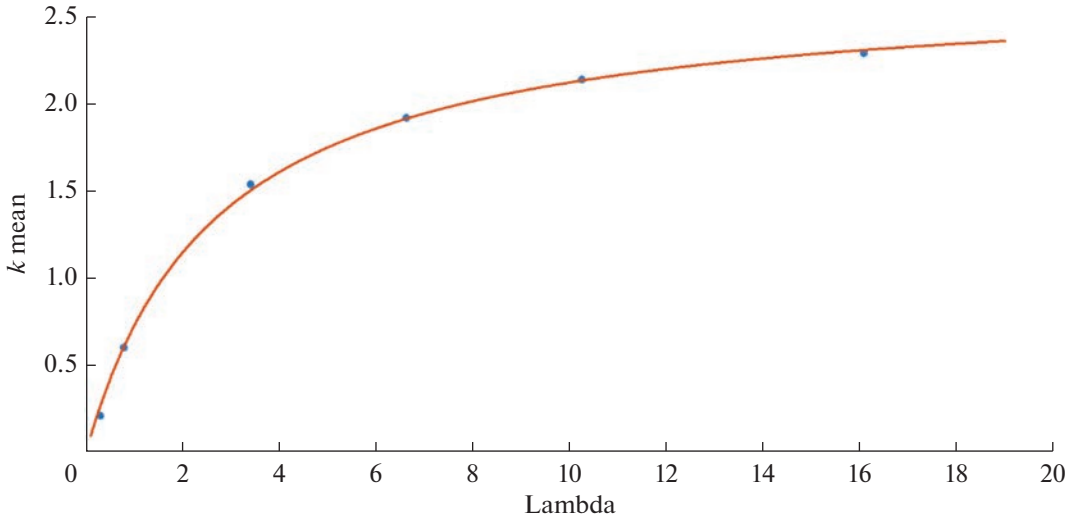


Рис. 2. Зависимость среднего числа регистрируемых фотонов от среднего числа фотонов в когерентной моде на входе.

в зависимости от задержки после прихода триггерного импульса с генератора. Длительность задержки изменялась от ноля до $T_{max} = 240T$, частота следования импульсов генератора составляла $1/(4T_{max})$. Поскольку $2\tau < T < 3\tau$, измеренные числа фотоотсчетов за каждый временной бин T могли принимать только значения от 0 до 3 с разной вероятностью в зависимости от интенсивности входного излучения.

Интенсивность входного излучения регулировалась поглощающими нейтральными фильтрами Att фирмы Thorlabs серии NENIR, оптимизированными под инфракрасный диапазон длин волн 1000–2600 нм. В связи с тем, что длина волны используемого лазера не входит в указанный диапазон, ослабление не соответствовало заявленному производителем. Коэффициент пропускания фильтров был измерен дополнительно.

На рис. 2 представлено сравнение теоретической кривой (10) с результатами выполненных нами измерений. Метод наименьших квадратов дал для теоретической кривой значение $\tau = 47.447$ нс. Модельная кривая и экспериментальные результаты хорошо согласуются между собой. Коэффициент детерминации R^2 составил 0.9986. Заметим, что полученное значение мертвого времени оказалось несколько выше величины, указанной в спецификации производителя (42 нс).

Теоретическое рассмотрение процесса детектирования фотонов осуществлялось методами численного моделирования. Рассматривались потоки фотонов, имеющие различные распределения по числу фотонов, в том числе пуассоновское, фоковское и тепловое. Случайное число фотонов в рассматриваемых распределениях разыгрывалось методом Монте-Карло. Моменты прилета фотонов представлялись случайными величинами, равномерно распределенными во времени. При регистрации в момент времени t некоторого фотона, счетчик фотонов выключался на время τ

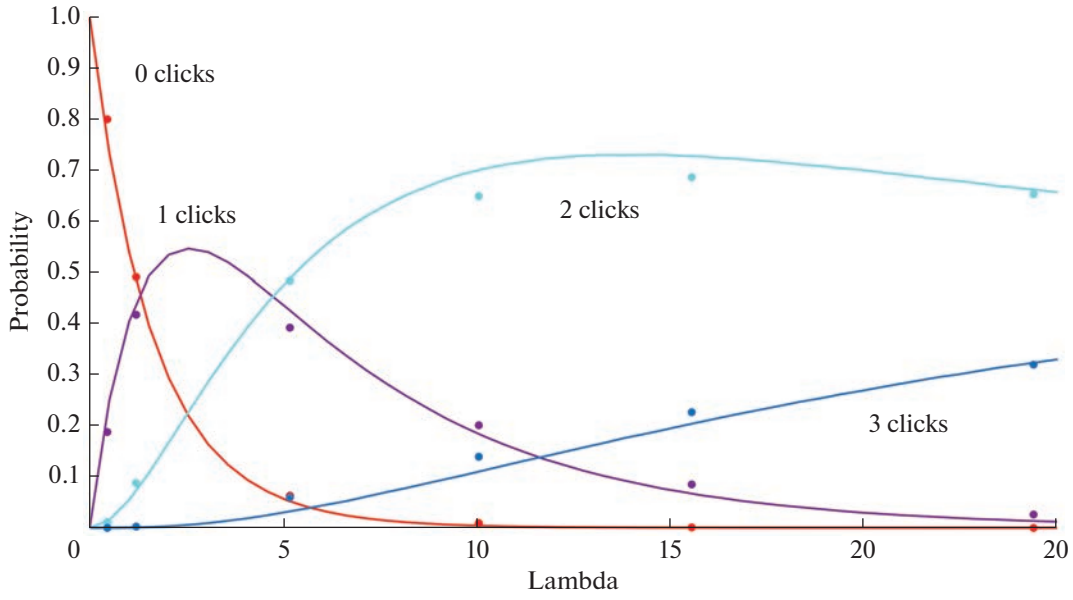


Рис. 3. Распределение числа отсчетов в приложении к томографии детекторов. На входе когерентные состояния с различным средним числом фотонов. Сплошные кривые – теория, точки – эксперимент.

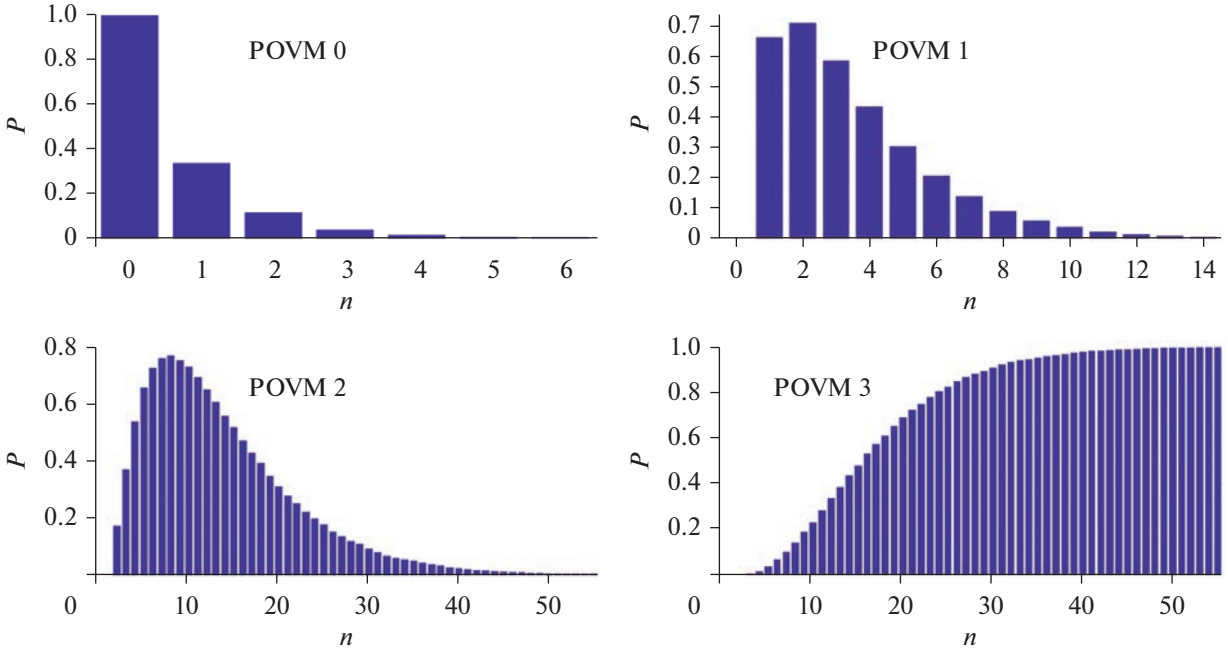


Рис. 4. POVM-элементы детектора.

вплоть до момента $t + \tau$. Таким образом, все фотоны, попадающие в "мертвый" интервал времени (если таковые были), игнорировались счетчиком регистрации фотонов. Близкое соответствие результатов численного моделирования и реальных данных говорит об адекватности разработанных алгоритмов.

На рис. 3 представлено распределение числа отсчетов детектора в зависимости от среднего числа фотонов λ в пуассоновском распределении на входе.

Мы видим хорошее согласие между теоретическими кривыми, полученными в численных расчетах, и результатами выполненных нами экспериментов (точки). Степень согласия (Fidelity) между экспериментальными и модельными распределениями составила 0.995–0.998.

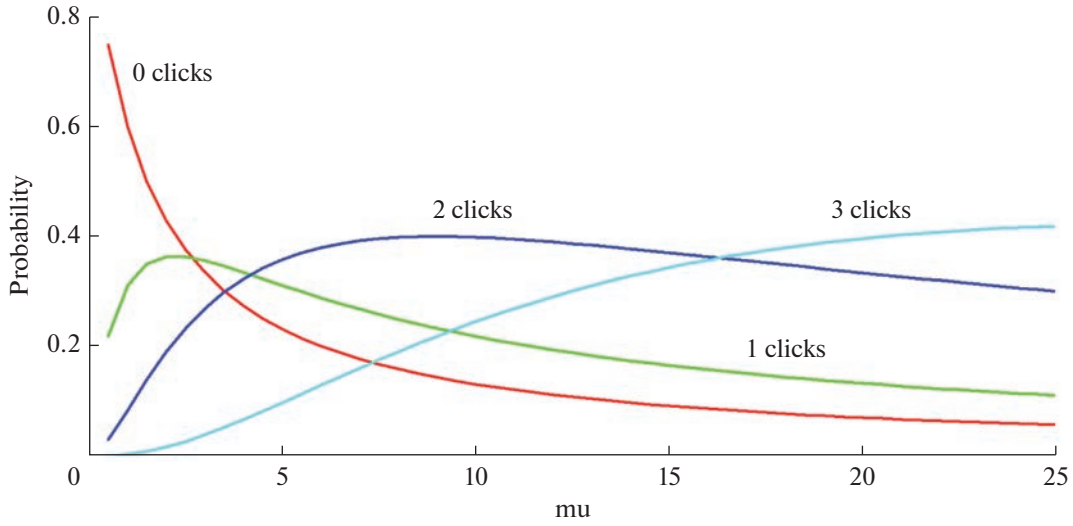


Рис. 5. Распределение числа отсчетов для тепловых состояний с различным средним числом фотонов на входе.

Для расчета POVM-элементов необходимо перейти от пуассоновских распределений по числу фотонов на входе к фоковским распределениям с заданным числом фотонов. Результаты численных расчетов представлены на рис. 4.

В рассматриваемой системе определены 4 POVM-элемента, отвечающих регистрации соответственно j фотонов, где $j = 0,1,2,3$. При этом j-ый POVM-элемент определяется соответственно вероятностями $P(j|n)$ зарегистрировать j фотонов при условии, что на входе имеется ровно n фотонов.

Полученные POVM-элементы задают функцию $P_0(n, j)$ и позволяют рассчитать отклик рассматриваемого детектора по отношению к любому распределению по числу фотонов на входе. Это можно сделать, если в формуле (1) заменить пуассоновское распределение $P_{Poiss}(\lambda, n)$ другим интересующим нас распределением. Пример такого расчета в приложении к тепловому распределению представлен на рис. 5. Здесь на горизонтальной оси представлено среднее число фотонов μ в тепловом состоянии.

Заметим, что тепловые состояния могут быть использованы вместо когерентных состояний для томографии детекторов. Сама функция $P_0(n, j)$, определяющая POVM-элементы, не зависит от распределения фотонов на входе и является характеристикой только самого детектора.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем кратко основные результаты выполненного исследования.

Методами численного моделирования с учетом эффекта мертвого времени разработаны алгоритмы расчета отклика детектора фотонов. Рассмотрены потоки фотонов, имеющие различные распределения по числу фотонов, в том числе пуассоновское, фоковское и тепловое.

С использованием набора различных когерентных состояний выполнены экспериментальные исследования модуля счета фотонов на основе кремниевого лавинного фотодиода. Сравнение полученных экспериментальных данных с результатами теоретических расчетов показали их хорошее согласие.

Разработан алгоритм расчета элементов положительной операторно-значной меры (POVM). Реконструированы элементы POVM для исследуемого модуля счета фотонов. Полученные POVM-элементы позволяют рассчитать отклик рассматриваемого модуля счета фотонов по отношению к любому распределению по числу фотонов на входе. Продемонстрировано применение полученных POVM-элементов для расчета отклика детектора при подаче на вход тепловых состояний.

Полученные результаты имеют существенное значение для развития квантовых оптических информационных технологий с использованием детекторов, разрешающих число фотонов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках проекта № 22-12-00263 Российского научного фонда. Раздел 2 “ Статистика фотоотсчетов с учетом мёртвого времени” выполнен при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант № 20-1-1-34-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hadfield R.H.* Single-photon detectors for optical quantum information applications // Nat. Photonics. 2009. V. 3. № 12. P. 696–705.
2. *Shangguan M. et al.* Dual-frequency Doppler lidar for wind detection with a superconducting nanowire single-photon detector // Opt. Lett. 2017. V. 42. № 18. P. 3541.
3. *Morimoto K. et al.* Megapixel time-gated SPAD image sensor for 2D and 3D imaging applications // Optica. 2020. V. 7. № 4. P. 346.
4. *Yamazaki I. et al.* Microchannel-plate photomultiplier applicability to the time-correlated photon-counting method // Rev. Sci. Instrum. 1985. V. 56. № 6. P. 1187–1194.
5. *Cova S., Longoni A., Andreoni A.* Towards picosecond resolution with single-photon avalanche diodes // Rev. Sci. Instrum. 1981. V. 52. № 3. P. 408–412.
6. *Goltsman G.N. et al.* Picosecond superconducting single-photon optical detector // Appl. Phys. Lett. 2001. V. 79. № 6. P. 705–707.
7. *Luis A., Sánchez-Soto L.L.* Complete Characterization of Arbitrary Quantum Measurement Processes // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. № 18. P. 3573–3576.
8. *Lundeen J.S. et al.* Tomography of quantum detectors // Nat. Phys. Nature Publishing Group. 2009. V. 5. № 1. P. 27–30.
9. *Богданов Ю.И.И., Кривицкий Л.А., Кулик С.П.* Статистическое восстановление квантовых состояний оптических трехуровневых систем // Письма в ЖЭТФ. 2003. V. 78. № 6. P. 804–809.
10. *Bogdanov Y.I. et al.* Polarization states of four-dimensional systems based on biphotons // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. № 6. P. 063810.
11. *Богданов Ю.И. и др.* Статистическое восстановление оптических квантовых состояний на основе взаимно дополнительных квадратурных квантовых измерений // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. № 2. С. 246–253.
12. *Bogdanov Y.I. et al.* Multiphoton subtracted thermal states: Description, preparation, and reconstruction // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. № 6. P. 063803.
13. *Bogdanov Y.I. et al.* Optical polarization echo: Manifestation and study by methods of quantum tomography of states and processes // J. Exp. Theor. Phys. 2014. V. 118. № 6. P. 845–855.
14. *Bogdanov Y.I. et al.* Quantum polarization transformations in anisotropic dispersive media // New J. Phys. 2013. V. 15. № 3. P. 035012.
15. *Dong D., Petersen I.R.* Quantum estimation, control and learning: Opportunities and challenges // Annu. Rev. Control. 2022. V. 54. P. 243–251.
16. *Renema J.J. et al.* Modified detector tomography technique applied to a superconducting multiphoton nanodetector // Opt. Express. 2012. V. 20. № 3. P. 2806.
17. *Feito A. et al.* Measuring measurement: theory and practice // New J. Phys. 2009. V. 11. № 9. P. 093038.
18. *Natarajan C.M. et al.* Quantum detector tomography of a time-multiplexed superconducting nanowire single-photon detector at telecom wavelengths // Opt. Express. 2013. V. 21. № 1. P. 893.
19. *Fiurášek J.* Maximum-likelihood estimation of quantum measurement // Phys. Rev. A. 2001. V. 64. № 2. P. 024102.
20. *Grandi S. et al.* Experimental quantum tomography of a homodyne detector // New J. Phys. 2017. V. 19. № 5. P. 053015.
21. *Zhang L. et al.* Recursive quantum detector tomography // New J. Phys. 2012. V. 14. № 11. P. 115005.
22. *Wang Y. et al.* Two-Stage Estimation for Quantum Detector Tomography: Error Analysis, Numerical and Experimental Results // IEEE Trans. Inf. Theory. 2021. V. 67. № 4. P. 2293–2307.
23. *Yang T.H. et al.* Robust and Versatile Black-Box Certification of Quantum Devices // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 113. № 4. P. 040401.
24. *Mogilevtsev D., Řeháček J., Hradil Z.* Relative tomography of an unknown quantum state // Phys. Rev. A. 2009. V. 79. № 2. P. 020101.
25. *Migdall A. et al.* Single-photon generation and detection. 1st ed. Elsevier, 2013. 593 p.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 256–261

МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 621.382.323

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРЕМНИЕВЫХ ПОЛЕВЫХ С ПОЛНОСТЬЮ ОХВАТЫВАЮЩИМ ЗАТВОРОМ НАНОТРАНЗИСТОРОВ С ВЫСОКИМ *k* ПОДЗАТВОРНОГО ДИЭЛЕКТРИКА

© 2023 г. Н. В. Масальский*

Федеральное государственное учреждение Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва, Россия

**E-mail: volkov@niisi.ras.ru*

Поступила в редакцию 06.02.2023 г.
После доработки 01.03.2023 г.
Принята к публикации 02.03.2023 г.

Обсуждаются электрофизические характеристики кремниевого цилиндрического с полностью охватывающим затвором полевого нанотранзистора с диэлектриками подзатворного окисла Al_2O_3 и HfO_2. Результаты численного моделирования показывают, что использование диэлектриков с высоким *k* оказывает заметное влияние на все основные характеристики транзистора по сравнению с оксидом кремния. Из полученных данных следует, что при масштабировании степень деградации электро-физических характеристик транзистора коррелирует с уровнем *k* – она снижается с ростом *k*. Это связываем с тем, что уменьшение влияния затвора на характеристики транзисторной структуры, особенно в подпороговой области, частично компенсируется использованием диэлектриков с высоким *k*.

Ключевые слова: кремневая цилиндрическая нанотранзисторная архитектура, полностью охватывающий затвор, диэлектрик с высоким *k*, моделирование

DOI: 10.31857/S0544126923700278, **EDN:** UBVMOR

1. ВВЕДЕНИЕ

Диэлектрические материалы затвора кремниевого полевого транзистора сыграли значительную роль в разработке современных наноразмерных электронных устройств с высокими эксплуатационными характеристиками [1, 2]. Материалы с высокой диэлектрической проницаемостью (с высоким *k*) являются более подходящими, чем традиционный оксид кремния SiO_2, из-за меньшей требуемой толщины пленки подзатворного диэлектрика (t_{ox}), что приводит к снижению пороговое напряжения и улучшению подпороговой характеристики полевого транзистора [1, 3, 4]. Хотя неуклонное масштабирование транзисторов может увеличить степень интеграции и производительность СБИС [1, 2, 5, 6], но проявление коротко-канальных эффектов (ККЭ) и деградация транзисторных электро-физических характеристик являются нежелательными последствиями масштабирования. Поскольку, в результате масштабирования, толщина t_{ox} достигает менее одного нанометра для повышения электрических характеристик устройства, то проблема роста тока утечки затвора из-за квантового туннелирования усиливается [4, 5]. Поэтому необходимо заменить обычный изолятор SiO_2 материалом с высоким *k*, чтобы увеличить эффективную толщину подзатворного оксида для сохранения превосходных электрических характеристик [5, 7–9].

В кремниевом полевом транзисторе с полностью охватывающим затвором из-за того, что затвор окружает весь объем рабочей области, электростатический контроль затвора над ней выше по сравнению с другими структурами, что предоставляет возможность дополнительно улучшить электро-физические характеристики транзистора [5, 6, 10]. Таким образом, данная транзисторная концепция является основным кандидатом с максимальной способностью расширить закон Мура в область ультра нанометровых топологических норм. Однако основная проблема обсуждаемого класса транзисторов – высокий ток утечки (I_{off}) и высокий подпороговый наклон (*SS*), вызванная масштабированием, что ограничивает производительность устройств для приложений с низким энергопотреблением и высокой тактовой частотой [8, 9].

Цель данной работы является оценка электрофизических характеристик тонких кремниевых с полностью охватывающим затвором полевых транзисторов, длины каналов которых находятся в деканонометровом диапазоне, с материалами подзатворного оксида с высоким значением диэлектрической проницаемости: диоксид гафния (HfO_2,

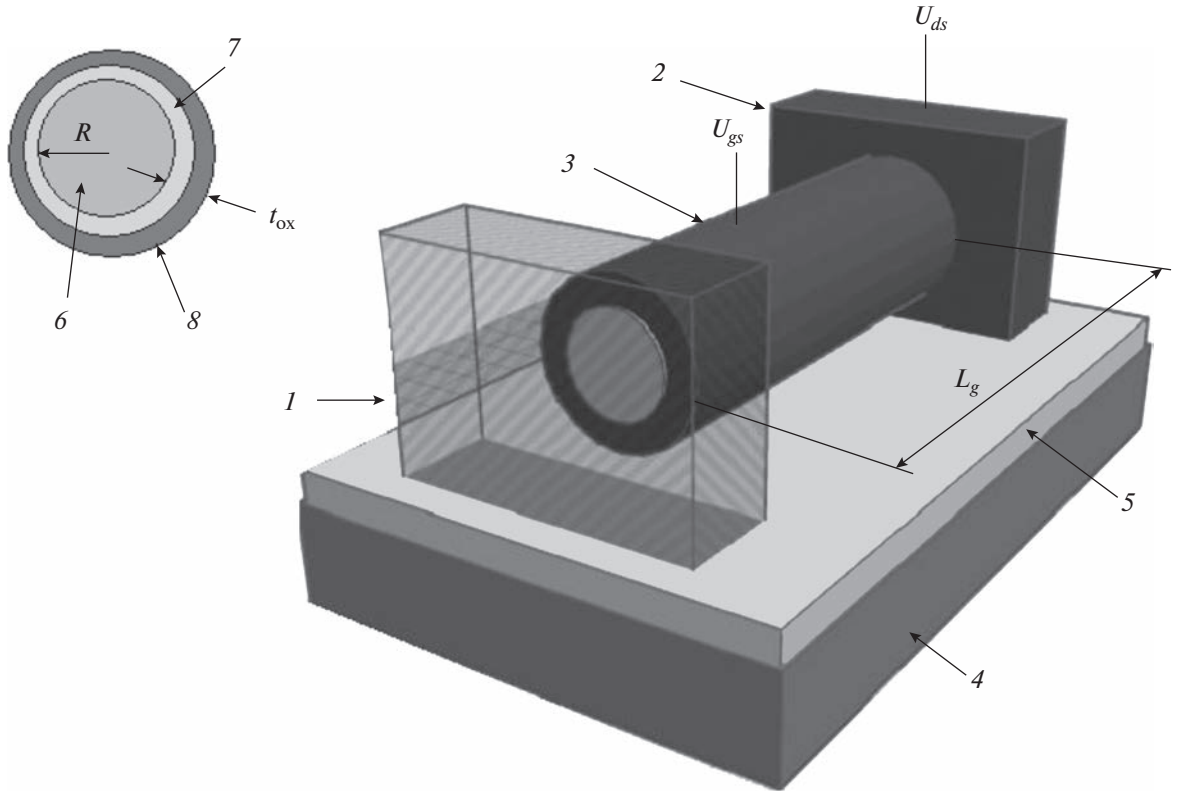


Рис. 1. Структурная схема транзистора, где *1* – исток, *2* – сток, *3* – рабочая область, *4* – кремниевая подложка, *5* – пленка оксида кремния, *6* – кремниевая сердцевина рабочей области, *7* – пленка оксила кремния, *8* – пленка диэлектрика с высоким k, L_g – длина рабочей области, R – радиус кремниевой сердцевины рабочей области.

к = 25) и оксид алюминия (Al_2O_3, к = 9.3) [11]. Для этого мы используем симулятор, основанный на подходе моделирования, который подробно изложен в [12]. Он основан на упрощении модели рассеяния, используя приближение времени релаксации [13]. Линеаризация по времени релаксации позволяет получить прямое решение 1D транспортного уравнения Больцмана (ТУБ) эффективным способом. Применяемый подход включает все существенные особенности квазибаллистического переноса в деканонометровом масштабе [4]. Затем мы численно исследуем электро-физические характеристики масштабируемых нанотранзисторов вплоть до длины канала 11 нм. Реализация такой процедуры весьма эффективна для формирования элементной базы для перспективных интегральных микросхем. Следует отметить, что поскольку поверхность $Si–SiO_2$ имеет лучшее качество в процессе изготовления [14, 15], диэлектрик затвора для всех исследуемых прототипов состоит из двух слоев: тонкий SiO_2 на рабочей области и диэлектрика с высоким k поверх пленки SiO_2. Мы откалибровали симулятор при помощи 3D моделирования, выполняемого посредством лицензионной системы приборно-технологического моделирования TCAD Sentaurus [16], модели, которого были настроены с учетом экспериментальных данных для оксида кремния (SiO_2, к = 3.9) [14].

2. ПАРАМЕТРЫ ТРАНЗИСТОРА И НАСТРОЙКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рис. 1 иллюстрирует трехмерное представление анализируемой приборной структуры. Она включает исток (поз. *1*), сток (поз. *2*) и рабочую область (поз. *3*), где L_g – длина рабочей области и длина затвора транзистора. Границы примыкания рабочей области к истоку/стоку являются резкими. Нет перекрытия между затвором и областями истока и стока. На вставке показало поперечное сечение рабочей области. Ее кремниевая сердцевина (поз. *6*) полностью охвачена пленкой оксида кремния толщиной 0.5 нм (поз. *7*), и поверх ее окружает пленка диэлектрика с высоким k толщиной 1 нм (поз. *8*). Это связано с лучшим соответствием и качеством интерфейса $Si–SiO_2$, который образуется в процессе изготовления. Транзисторная структура помещена подложку КНИ (кремний на изоляторе).

Для расчета электрических характеристик рассматриваемого устройства используется квази трехмерное моделирование. Оно базируется на допуще-

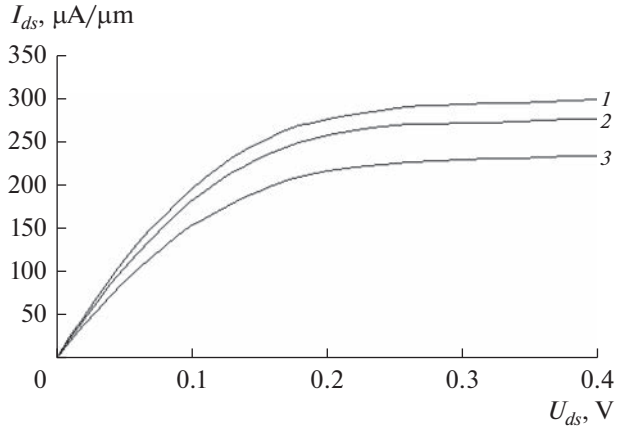


Рис. 2. ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ при $U_{gs} = 0.4$ В для разных k, где $1 - k = 25$, $2 - k = 9$, $3 - k = 3.9$.

нии, что транспорт носителей в наноразмерном транзисторе совершается через одномерные поддиапазоны общей энергетической зоны проводимости. Это следует из того, что волновые функции каждого поддиапазона ограничены поперечным сечением прибора [17, 18]. Для не совсем ультра тонких структур можно моделировать транспорт носителей при нормальных условиях, используя квазиклассическое мульти зонное уравнение переноса Больцмана [19]. В этом случае квазиклассические модели, основанные на 1D мульти зонном ТУБ, позволяют получить достоверные электро-физические характеристики, когда уравнение Больцмана решается самосогласованно с 3D уравнением Пуассона и 2D уравнением Шредингера для получения самосогласованных потенциалов и энергий поддиапазонов и волновых функций. Квазианалитическое решение 3D уравнения Пуассона на основе метода разделения переменных подробно рассмотрено [20]. Там же показано, что такой подход практические не снижает точность решения относительно прямых численных методов вычисления потенциала. Метод разделения переменных положен в основу решения 2D уравнения Шредингера, которое детально представлено в [21], и там же сделаны оценки погрешности вычисления волновых функций. Следует отметить, что в отличии от ультра коротких транзисторных структур где рассеяние фононов и тунелирование от истока к стоку довольно значительны, по мере увеличения длины рабочей области их влияние становится менее значимым, а длинах рабочей области более 10 нм не существенными [22]. Поэтому, и квантовые явления переноса представляются незначительными, а использование ТУБ является вполне обоснованным.

Компьютерное моделирование выполнено для транзисторных структур с различными технологическими параметрами. В расчетах длина рабочей области L_g изменяется в диапазоне 11–25 нм, радиус R фиксирован и равен 3 нм. Фиксированы размеры стока/истока, длина которых составляла 25 нм, ширина и высота составляют 50 нм. Они равномерно легированы с концентрацией $0.5 \times \times 10^{21}$ см$^{-3}$. Кремниевая рабочая область полагается нелегированной с собственной концентрацией носителей 1×10^{13} см$^{-3}$. В расчетах учитывается для зоны проводимости три пары вырожденных долин с анизотропной эффективной массой и проникновение волновой функции в подзатворный диэлектрик, который обеспечивает высоту потенциального барьера более 3 эВ. Температура решетки постоянна и равна 300 K.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 приведены результаты численного моделирования ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ при $U_{gs} = 0.4$ В реперной транзисторной структуры ($L_g = 25$ нм) с тремя различными материалами верхней пленки подзатворного диэлектрика. Отметим, заметный рост тока стока связанный с использованием в подзатворном окисле материала с высокой диэлектрической проницаемостью совпадает с общей тенденцией характерной для всех типов кремниевых полевых транзисторов [5, 6, 22].

На рис. 3 показаны извлеченные из результатов моделирования зависимости $I_{ds_\max(k)}$, $I_{\mathrm{off}(k)}$ и отношения $I_{\mathrm{on}}/I_{\mathrm{off}(k)}$. Из приведенных данных прослеживается общая тенденция улучшения характеристик с увеличением диэлектрической проницаемости. Очевидно, что наилучшие результаты получаются, когда оксид гафния используется в качестве подзатворного диэлектрика.

Экстрагированные из результатов моделирования зависимости подпорогового наклона и DIBL-эффекта приведены ниже на рис. 4. Обе эти зависимости проявляю практически одинаковую тенденцию к снижению с ростом k. Согласно этим данным, по мере увеличения диэлектрической проницаемости подзатворного оксида ток стока увеличивается, а подпороговый наклон уменьшается. Поэтому кремниевый полевой транзистор с полностью охватывающим затвором с подзатворным диэлектриком HfO_2 представляется наиболее интересным для цифровых приложений [6]. Это свойство обусловлено самой высокой электростатической управляемостью затвора рабочей областью, который сверх интенсивно управляет всеми носителями находящимися в рабочей области и обеспечивает их акцентированный перенос от истока к стоку.

Проводимость транзистора (g_m), показывает, насколько сильно напряжение затвора влияет на ток стока, и определяется следующим соотношени-

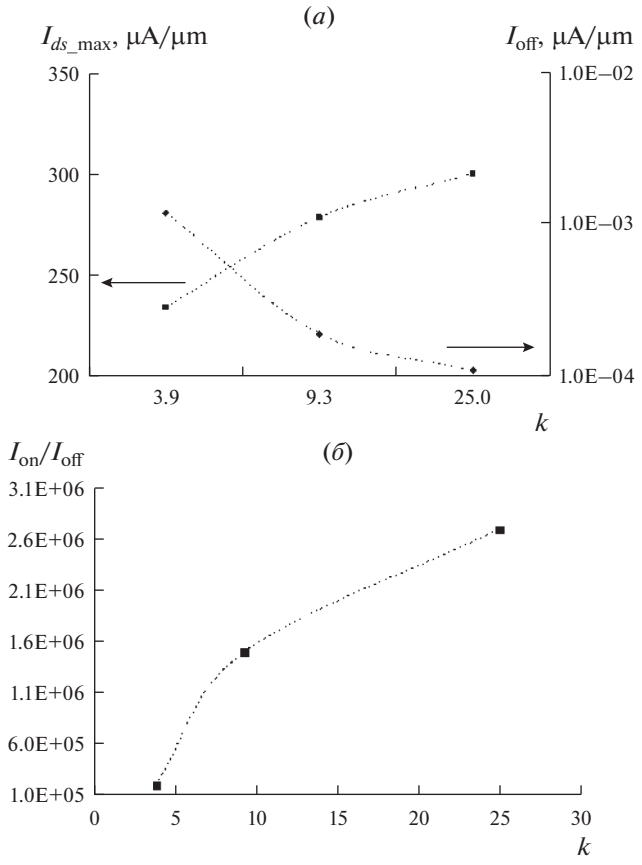


Рис. 3. Зависимости (*а*) $I_{ds_max}(k)$ при $U_{ds} = U_{gs} = 0.4$ и $I_{off}(k)$ при $U_{ds} = 0.4$ В и $U_{gs} = 0.0$ В, (*б*) $I_{on}/I_{off}(k)$. Здесь и ниже на рисунках жирными маркерами отмечены значения параметра для рассматриваемых диэлектриков. Пунктирной линией показано гипотетическое поведение параметра.

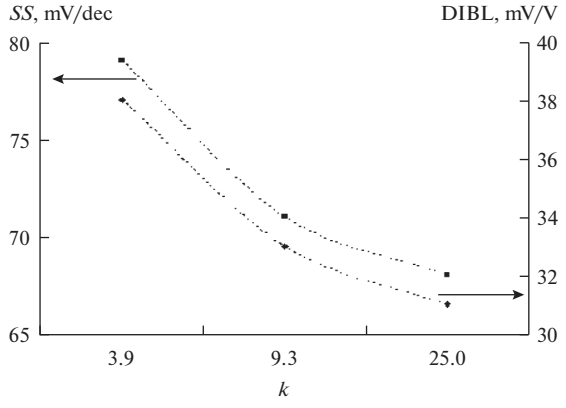


Рис. 4. Зависимости $SS(k)$ и $\mathrm{DIBL}(k)$.

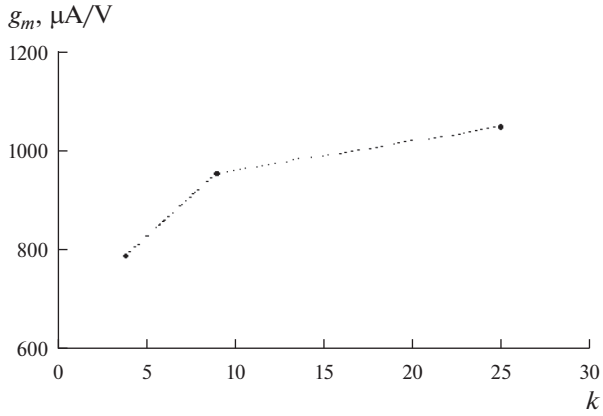


Рис. 5. Зависимость $g_m(k)$.

ем: $g_m = \left.\frac{dI_{ds}}{dU_{gs}}\right|_{U_{ds}-\mathrm{const}}$. Параметр g_m является важной характеристикой и определяет эффективность усиления сигнала. На рис. 5 показано изменение g_m реперного прототипа в открытом режиме ($U_{ds} = 0.4$ В) с различными диэлектриками подзатворного оксида. В данном случае проводимость увеличивается с увеличением значения диэлектрической проницаемости. Обобщая все полученные данные, можно сделать вывод, что подвижность носителей в рабочей области реперного прототипа выше при использовании материала с высоким k, что снижает паразитное сопротивление и сопротивление включения.

Результаты численного масштабирования длины L_g до 11 нм для прототипов с разными подзатворными оксидами приведены на рис. 6. Для них ВАХ рассчитаны только для материалов с высоким k. Из-за сильного влияния ККЭ прототип с

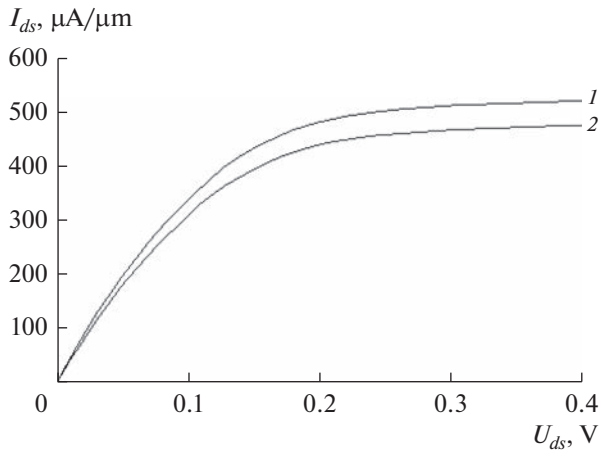


Рис. 6. ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ при $U_{gs} = 0.4$ В для разных k, где *1* – $k = 25$, *2* – $k = 9$.

Таблица 1. Основные электро-физические характеристики

k	I_{ds_max}, мкА/мкм	SS, мВ/дес	I_{off}, мкА/мкм	I_{on}/I_{off}	g_m, мкА/В	g_m/I_{ds}, 1/В
9.3	479.1	65	0.004	1.2×10^5	1772	3.6
25.0	525.4	62	0.0023	2.25×10^5	1962	3.7

подзатворным диэлектриком только из оксида кремния не рассматривался.

Анализировались те же характеристики, что и для реперной структуры. Полученные данные приведены в табл. 1. Отметим, примерно 75% увеличение тока стока, практически двукратный рост проводимости и небольшое снижение параметра SS. Существенно деградировали, практически на порядок ток I_{off} и отношение I_{on}/I_{off}.

Другой важный параметр g_m/I_{ds} – эффективность проводимости представляет собой способность устройства усиливать сигнал при определенной рассеиваемой мощности и оценивает эффективность устройства для преобразования мощности постоянного тока в частоту переменного тока [23]. Исходя из полученных данных, следует, что по мере роста k соотношение g_m/I_{ds_max} будет возрастать резче при более низких напряжениях U_{gs}, и это связано с лучшим поведением подпороговой области.

Из полученных данных следует, что степень деградации электро-физических характеристик прототипа с более низкой диэлектрической проницаемостью больше. Это связано с тем фактом, что при масштабировании влияние затвора на характеристики транзисторной структуры, особенно в подпороговой области, уменьшается, что может быть частично компенсировано использованием диэлектриков с высоким k.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численно проанализированы электрофизические характеристики кремниевого цилиндрического с полностью охватывающим затвором полевого нанотранзистора с диэлектриками подзатворного окисла Al_2O_3 и HfO_2. Результаты численного моделирования показывают, что использование диэлектриков с высоким k оказывает заметное влияние на все основные характеристики транзистора по сравнению с традиционным оксидом кремния. Из полученных данных следует, что при масштабировании существенно деградировали, практически на порядок ток I_{off} и отношение I_{on}/I_{off}. Степень деградации электро-физических характеристик транзистора коррелирует с уровнем k: с ростом k снижается степень деградации. Это связываем с тем, что влияние затвора на характеристики транзисторной структуры, особенно в подпороговой области, уменьшается, что может быть частично компенсировано использованием диэлектриков с высоким k. Другие важные характеристики заметно улучшились. Использование диэлектрика с высоким k в подзатворном оксиде может существенно повысить электро-физические характеристики кремниевого цилиндрического с полностью охватывающим затвором полевого нанотранзистора так, чтобы удовлетворить требованиям закона Мура.

БЛАГОДАРНОСТИ

Публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН “Проведение фундаментальных научных исследований (47 ГП)” по теме № FNEF-2022-0022 “Математическое обеспечение и инструментальные средства для моделирования, проектирования и разработки элементов сложных технических систем, программных комплексов и телекоммуникационных сетей в различных проблемно-ориентированных областях”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ferain I., Colinge C.A., Colinge J.* Multigate transistors as the future of classical metal–oxide–semiconductor field-effect transistors // Nature. 2011. V. 479. P. 310–316.
2. *Taur Y., Ning T.H.* Fundamentals of modern VLSI devices // Cambridge university press. 2013.
3. *Karbalaei M., Dideban D.* A novel silicon on insulator MOSFET with an embedded heat pass path and source side channel doping // Superlattices and Microstructures. 2016. V. 90. P. 53–67.
4. *Anvarifard M.K., Orouji A.A.* Proper electrostatic modulation of electric field in a reliable nano-SOI with a developed channel // IEEE Transactions on Electron Devices. 2018. V. 65. P. 1653–1657.
5. *Tomar G., Barwari A.* Fundamental of electronic devices and circuits // Springer. 2019.
6. International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) Interconnect, 2020 Edition. [Online] Available: https://irds.ieee.org/editions/2020
7. *Karbalaei M., Dideban D.* A scheme for silicon on insulator field effect transistor with improved performance using graphene // ECS Journal of Solid State Science and Technology. 2019. V. 8. P. M85–M92.
8. *Shaker A., El-Sabbagh M., El-Banna M.M.* Influence of drain doping engineering on the ambipolar conduction and high-frequency performance of TFETs // IEEE Transactions on Electron Devices. 2017. V. 64. P. 3541–3547.
9. *Nagy D., Indalecio G., Garcia-Loureiro A.J., Elmessary M.A., Kalna K., Seoane N.* FinFET versus gate-all-around nanowire FET: performance, scaling, and

variability // IEEE Journal of the Electron Devices Society. 2018. V. 6. P. 332–40.

10. *Narang R., Saxena M., Gupta R.S., Gupta M.* Drain current model for a gate all around (GAA) *p–n–p–n* tunnel FET // Microelectronics Journal. 2013. V. 44(6). P. 479–488.
11. *Baklanov M., Green M., Maex K.* Dielectric Films for Advanced Microelectronics. // John Wiley and Sons, LTD. 2007.
12. *Масальский Н.В.* Моделирование ВАХ ультра тонких КНИ КМОП нанотранзисторов с полностью охватывающим затвором // Микроэлектроника. 2021. Т. 60. № 6. С. 387—393.
13. *Jin S., Park Y.J., Min H.S.* A three-dimensional simulation of quantum transport in silicon nanowire transistor in the presence of electron-phonon interactions // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. P. 123719-1–123719-10.
14. *Elmessary M.A., Nagy D., Aldegunde M., Seoane N., Indalecio G., Lindberg J.* Scaling/LER study of Si GAA nanowire FET using 3D finite element Monte Carlo simulations // Solid-State Electronics. 2017. V. 128. P. 17–24.
15. *Bousari N.B., Anvarifard M.K., Haji-Nasiri S.* Improving the electrical characteristics of nanoscale triple-gate junctionless FinFET using gate oxide engineering // AEU -International Journal of Electronics and Communications. 2019. V. 108. P. 226–34.
16. *TCAD Sentaurus*; Synopsys Inc.: Mountain View, CA, USA, 2017.
17. *Moon D., Choi S., Duarte J., Chio Y.* Investigation of silicon nanowire gate – all-around junction less transistors built on a bulk substrate // IEEE Trans Electron Devices. 2013. V. 60. P. 1355–1360.
18. *Avilla-Herrerea F., Paz B., Cerdeira A., Estrada M., Pavanello M.* Charge-based compact analytical model for junction less triple-gate nanowire transistors // Solid-State Electronics. 2016. V. 121. P. 23–27.
19. *Briggs S., Leburton J.P.* Size effects in multisubband quantum wire structures // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 8163–8170.
20. *Mani Manoj P., Pandey K.* Surface potential and threshold voltage model of fully depleted narrow channel SOI MOSFET using analytical solution of 3D Poisson's equation // J. of nano- and electronic physics. 2015. V. 7. P. 2002–2007.
21. *Orlikovsky A., Vyurkov V., Lukichev V., Semenikhin I., Khomyakov A.* All quantum simulation of ultrathin SOI MOSFET in nanoscale semiconductor-on-insulator structures and devices // Springer. 2007.
22. Nanoelectronics: Devices, Circuits and Systems // Editor by Brajesh Kumar Kaushik. Elsevier. 2018.
23. *Tayal S., Nandi A.* Analog/RF performance analysis of inner gate engineered junctionless Si nanotube // Superlattices Microstruct. 2017. V. 111. P. 862–871.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 262–281

МОДЕЛИРОВАНИЕ

ВЛИЯНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ НА КВАНТОВЫЙ МАГНЕТОТРАНСПОРТ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ

© 2023 г. И. А. Кузнецова[a], О. В. Савенко[a], Д. Н. Романов[a, *]

[a]*Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, Ярославль, 150003 Россия*

*****E-mail: romanov.yar357@mail.ru*

Поступила в редакцию 29.03.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Получены аналитические выражения для коэффициентов Холла и магнетосопротивления тонкой полупроводниковой пленки. Рассматривается случай слабого магнитного поля и эффекты, связанные с расщеплением энергетического спектра носителей заряда на уровни Ландау, не учитываются. Изоэнергетическая поверхность материала полупроводника является эллипсоид вращения (сфероид). Выполнен переход к предельным случаям вырожденного и невырожденного электронных газов, зеркальных границ. Поведение носителей заряда описывается квантовым уравнением Лиувилля. Влияние поверхностного рассеяния носителей заряда учитывается через граничные условия Соффера. Проведен анализ зависимости коэффициентов Холла и магнетосопротивления от толщины пленки, индукции внешнего магнитного поля, шероховатости поверхности пленки.

Ключевые слова: тонкая пленка, уравнение Лиувилля, модель Соффера, коэффициент Холла, коэффициент магнетосопротивления

DOI: 10.31857/S0544126923700400, **EDN:** UYUDNQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно развиваются такие области науки и техники, как микро- и наноэлектроника. Сегодня наблюдается тенденция к миниатюризации элементов интегральных схем. Современные технологии изготовления и выращивания слоистых наноструктур позволяют создавать нанослой толщиной порядка нескольких нанометров (меньше длины волны де Бройля носителей заряда). В таких нанослоях становится ярко выраженным квантовый размерный эффект, а электронный газ необходимо рассматривать как квазидвумерный газ, заключенный в потенциальную яму с бесконечно высокими стенками. При малых толщинах неровность поверхности на атомарном уровне существенно влияет на электрические и гальваномагнитные параметры нанослоя. Для теоретического описания явлений переноса носителей заряда необходимо использовать модели, которые бы учитывали квантование энергетического спектра носителей заряда и поверхностное рассеяние.

Изучение влияния магнитного поля на движение носителей заряда актуально для создания магнитной памяти. В настоящее время имеют востребованность элементы памяти с ультрабыстрым управлением намагниченностью [1]. По коэффициенту Холла можно определить механизм рассеяния [2], величину магнитного поля [3]. При уменьшении толщины пленки коэффициент Холла возрастает, что позволяет точнее определять величину магнитной индукции поля.

Известных работ, посвященных вышеназванной тематике, существует пока ограниченное количество. В последние десятилетия активно развиваются методики, позволяющие определять профиль шероховатости поверхности с высокой точностью (атомно-силовая микроскопия и т.д.). Особый интерес вызывает использование тех моделей граничных условий, в которых фигурирует параметр, характеризующий степень неровности поверхности. В рамках данного проекта предлагается использовать метод, согласно которому поверхностное рассеяние носителей заряда будет учитываться через граничные условия Соффера [4], накладываемые на уравнение Лиувилля. Выбор модели Соффера обусловлен тем, что она получена в результате решения квантовомеханической задачи о взаимодействии электронной волны с поверхностью слоя и в этой модели фигурирует параметр шероховатости поверхности, который можно померить непосредственно в экспериментальных условиях.

Для решения подобных задач необходимо использовать квантовую теорию процессов переноса, заключающуюся в нахождении элементов матрицы плотности решением уравнения Лиувилля. Авторы некоторых работ использовали различные ме-

тоды решения этого уравнения. В работе [5] применен метод функций Грина для решения задачи об электропроводности тонкой металлической пленки. В работах Мейеровича и др., опубликованных в начале 2000-х годов, использовался метод непосредственного расчета вероятности переходов носителей заряда за счет потенциала рассеяния с помощью автокорреляционных функций, описывающих профиль поверхности [6]. В другом источнике [7] производился непосредственный расчет гамильтониана, обусловленного рассеянием носителей заряда. Методы решения задач, использованные авторами, приводят к громоздким математическим расчетам. Теоретические исследования явлений переноса в нанопленках продолжаются в настоящее время.

В настоящей работе для расчета гальваномагнитных параметров тонкой пленки применяется метод, рассмотренный в работах [8, 9], с использованием граничных условий Соффера.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе рассматривается изолированный проводящий нанослой (тонкий слой из полупроводника, расположенный между двумя изолирующими слоями или нанесенный на изолирующую подложку). Толщина слоя равна a. Пленка находится в скрещенных однородных электрических и магнитных полях. Введем декартовую систему координат. Вдоль оси X направлен вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E}$, а вдоль оси Z – вектор напряженности магнитного поля $\mathbf{H}$. Сила, действующая на электроны (дырки), имеет вид

$$\mathbf{F} = e\left(\mathbf{E} + \mathbf{E}_H\right) + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{H}], \tag{1}$$

где c – скорость света, e и $\mathbf{v}$ – соответственно, заряд и скорость свободного электрона, $\mathbf{E}_H$ – напряженность электрического поля, обусловленная эффектом Холла.

Электрические поля меняются по гармоническому закону:

$$E = E_{0x}\exp(i\omega t), \tag{2}$$

$$E_H = E_{0y}\exp(i\omega t), \tag{3}$$

где E_{0x} – амплитуда напряженности внешнего электрического поля, E_{0y} – амплитуда холловской напряженности электрического поля, ω – частота внешнего электрического поля.

Изоэнергетическая поверхность ряда полупроводников (кремний, германий) имеет форму эллипсоидов. Для пленки, толщина которой сравнима с длиной волны де Бройля, необходимо учитывать квантование энергии носителей заряда. Изоэнергетическая поверхность с учетом квантовых размерных эффектов будет представлять собой совокупность равностоящих эллипсах, центры которых лежат на оси p_z, а сами эллипсы расположены на эллипсоиде. В этом случае энергия носителей заряда принимает вид:

$$\begin{gathered}\varepsilon_n = \varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{zn};\quad \varepsilon_{\parallel} = \frac{p_x^2}{2m_1} + \frac{p_y^2}{2m_2};\\ \varepsilon_{zn} = \frac{p_{zn}^2}{2m_3},\quad n = 1,2,3,\ldots,N,\end{gathered} \tag{4}$$

где $m_{\parallel}$ и $m_{\perp}$ – соответственно продольная и поперечная эффективные массы носителя заряда. Проекция импульса носителя заряда на ось p_{zn} принимает дискретный ряд значений, а на осях p_x и p_y – непрерывный ряд значений.

Проводящая пленка расположена между двумя диэлектриками, поэтому для электронов (дырок) пленка в первом приближении представляет собой потенциальную яму с бесконечно высокими стенками

$$U = \begin{cases}0, & 0 \le z \le a,\\ \infty, & z < 0,\ z > a.\end{cases}$$

В этом случае проекция квазиимпульса на ось Z (p_{zn}) принимает следующие значения

$$p_{zn} = \frac{hn}{2a};\quad n = 1,2,3,\ldots, \tag{5}$$

где h – постоянная Планка.

Коэффициенты Холла и магнетосопротивления можно найти с помощью уравнения фон Неймана (квантового уравнения Лиувилля):

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right], \tag{6}$$

где $\hat{\rho}$ – оператор матрицы плотности, $\hat{H}$ – оператор Гамильтона, $\hbar$ – постоянная Дирака, а скобки обозначают коммутатор.

Из уравнения Лиувилля (6) в работах [8, 9] было получено кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}\frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{2\pi}{\hbar}N_{imp}\sum_{n'}\left|V_{0n'}\right|^2\left(f_n - f_{n-n'}\right)\delta\left(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-n'}\right), \tag{7}$$

где f_n – это функция распределения носителей заряда на n-ом энергетическом уровне, $\mathbf{v}$ – это скорость электронов (дырок) в плоскости пленки, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор электрона (дырки) в произвольной точке пленки, $\mathbf{F}$ – сила, действующая на носители заряда (1), N_{imp} – концентрация примесей, $V_{0n'}$ – матричный элемент рассеяния при переходе из n'-ого уровня на n-ый уровень, δ – дельта-функция.

Для учета поверхностного рассеяния будем использовать модель Соффера [4]:

$$\begin{cases} f_n^+(0,v_x,v_y) = q_{1n}(g_1,\vartheta_n) f_n^-(0,v_x,v_y), \\ f_n^-(a,v_x,v_y) = q_{2n}(g_2,\vartheta_n) f_n^+(a,v_x,v_y), \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} q_{1n}(g_1,\vartheta_n) = \exp\left(-\left[4\pi g_1 \cos\vartheta_n\right]^2\right), \\ q_{2n}(g_2,\vartheta_n) = \exp\left(-\left[4\pi g_2 \cos\vartheta_n\right]^2\right), \end{cases} \quad (9)$$

$$g_1 = \frac{g_{s1}}{\lambda_{BV}}, \quad g_2 = \frac{g_{s2}}{\lambda_{BV}}, \quad (10)$$

где g_1 и g_2 – параметры шероховатости для нижней и вахней поверхности пленки; f_n^+ и f_n^- – неравновесные функции распределения электронов (дырок) соответственно с положительной и отрицательной проекциями скорости на ось Z ($n = 1,2,3\ldots$); ϑ_n – угол между импульсом носителя заряда и осью p_z; g_{s1} и g_{s2} – соответственно среднеквадратичная высота поверхностного рельефа для нижней и верхней границы пленки; λ_{BV} – длина волны де Бройля электрона (дырки). В отличие от модели Фукса, в которой коэффициенты зеркальности q_{1n} и q_{2n} выбираются постоянными феноменологическим образом, в модели Соффера вероятность зеркального отражения зависит от угла падения носителя заряда на эту поверхности и от шероховатости этой поверхности.

Плотность тока $\mathbf{j}$ определяется следующим образом

$$\mathbf{j} = \frac{2e}{a}\sum_n \iint \mathbf{v} f_n \frac{dp_x dp_y}{h^2}. \quad (11)$$

Приборы могут показывать только усредненные по толщине пленки величины (9)

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \frac{1}{a}\int_0^a \mathbf{j} dz. \quad (12)$$

Продольная составляющая электропроводности выражается через дифференциальный закон Ома:

$$\langle j_{x0} \rangle = \sigma_{\|} E_{0x}, \quad \sigma_{\|} = \sigma_{xx} - \sigma_{yx}\sigma_{xy}/\sigma_{yy}. \quad (13)$$

Коэффициент Холла R_H и коэффициент поперечного магнетосопротивления $\varkappa_\perp$ будут иметь вид:

$$R_H = \frac{E_{0y}}{\langle j_{x0} \rangle H} = -\frac{\sigma_{yx}}{\left(\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{yx}\sigma_{xy}\right)H}, \quad \varkappa_\perp = \frac{\sigma_{0\|} - \sigma_{\|}}{\sigma_{0\|} H^2}, \quad (14)$$

где $\sigma_{0\|} = \sigma_{\|}(B = 0)$.

3. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ХОЛЛА И МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ

Используя тот же метод решения, что и в работе [8, 9], запишем окончательные результаты. Для этого введем безразмерные параметры:

$$m_0 = \sqrt[3]{m_\perp^2 m_\|}, \quad k_{m\perp} = m_\perp/m_0, \quad k_{m\|} = m_\|/m_0, \quad (15)$$

где $k_{m\perp}$ и $k_{m\|}$ – безразмерные поперечная и продольная эффективные массы носителей заряда, которые связаны соотношением $k_{m\perp}^2 k_{m\|} = 1$,

$$\lambda_B = h/p_{1V}, \quad p_{1V} = m_0 v_{0V}, \\ \Lambda = v_0\tau = v_{0V}\tau_V, \quad x_\lambda = \Lambda/\lambda_B, \quad (16)$$

где Λ – длина свободного пробега электронов (дырок) в объемном проводнике без учета влияния границ пленки, которая при учете квантовых размерных эффектов не меняется, τ и τ_V – объемное время релаксации в присутствии и отсутствии квантового размерного эффекта соответственно, v_0 и v_{0V} – характеристическая скорость носителей заряда в присутствии и отсутствии квантового размерного эффекта соответственно [9],

$$x_B = a/\lambda_B, \quad x_0 = a/\Lambda, \\ y_0 = \omega\tau_V, \quad u_\| = \varepsilon_\|/(k_Б T), \quad (17)$$

где x_0 – безразмерная толщина пленки, y_0 – безразмерная частота внешнего электрического поля, $k_Б$ – постоянная Больцмана, T – температура,

$$u_1 = h^2/\left(8m_0 a^2 k_Б T\right), \quad u_\mu = \mu/(k_Б T), \\ u_0 = m_0 v_0^2/(2k_Б T), \quad (18)$$

где μ – химический потенциал,

$$u_{0V} = m_0 v_{0V}^2/(2k_Б T), \quad k = \sqrt{u_0/u_{0V}}, \quad (19)$$

$$\tau_\beta = \sin(\beta/k_{m\perp})/(\beta/k_{m\perp}), \quad (20)$$

$$z_0 = x_0(k - iy_0), \quad \beta = \tau_V e H/(m_0 c), \quad (21)$$

где β – безразмерная напряженность внешнего магнитного поля,

$$\Omega_{1n} = \frac{2x_0x_\lambda z_0}{nk_{m\perp}^2},\quad \Omega_{2n} = \frac{2x_\lambda x_0^2\beta}{nk_{m\perp}^3}, \tag{22}$$

$$u_{0V} = \frac{5}{6}\left(\frac{2}{k_{m\perp}} + k_{m\perp}^2\right)\frac{F_{3/2}(u_\mu)}{F_{1/2}(u_\mu)}, \tag{23}$$

$$F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)}\int_0^\infty \frac{t^j dt}{1+e^{t-x}},\quad \Gamma(j+1) = \int_0^\infty t^j e^{-t}dt, \tag{24}$$

где $F_j(x)$ – интеграл Ферми–Дирака с индексом j, $\Gamma(j+1)$ – гамма-функция,

$$u_0 = \frac{5}{3P_1}\left(\frac{P_3}{k_{m\perp}} + k_{m\perp}^2 P_2\right), \tag{25}$$

$$P_1 = \sum_{n=1}^{\infty}\ln\left(1+\exp\left(u_\mu - \frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\right), \tag{26}$$

$$P_2 = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\ln\left(1+\exp\left(u_\mu - \frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\right), \tag{27}$$

$$P_3 = \sum_{n=1}^{\infty}F_1\left(u_\mu - \frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right). \tag{28}$$

Косинус угла cosθ в коэффициентах зеркальностей q_{1n} и q_{2n} (5) определяется через отношение скоростей:

$$\cos\vartheta_n = \frac{v_{zn}}{v} = \frac{\dfrac{nk_{m\perp}\sqrt{u_{0V}}}{2x_0x_\lambda}}{\sqrt{\dfrac{u_\perp}{k_{m\perp}^3} + \left(\dfrac{nk_{m\perp}\sqrt{u_{0V}}}{2x_0x_\lambda}\right)^2}}, \tag{29}$$

где $u_\perp = \varepsilon_\perp/(k_Б T)$.

Выражения для удельной электропроводности $\sigma_\parallel$, коэффициентов Холла R_H и магнетосопротивления $\varkappa_\perp$ (14) выглядят следующим образом:

$$\sigma_\parallel = \sigma_0\Sigma(x_0, y_0, x_\lambda, k_{m\perp}, \beta, g_1, g_2),\quad \sigma_0 = n_{cV}e^2\tau_V/m_0, \tag{30}$$

$$\sigma_{0\parallel} = \sigma_0\Sigma_0(x_0, y_0, x_\lambda, k_{m\perp}, g_1, g_2),\quad \sigma_0 = n_{cV}e^2\tau_V/m_0, \tag{31}$$

$$R_H = R_{H0}A_H(x_0, y_0, x_\lambda, k_{m\perp}, \beta, g_1, g_2),\quad R_{H0} = 1/(n_{cV}ec), \tag{32}$$

$$\varkappa_\perp = \varkappa_{\perp0}D_\perp(x_0, y_0, x_\lambda, k_{m\perp}, \beta, g_1, g_2),\quad \varkappa_{\perp0} = (\sigma_0R_{H0})^2, \tag{33}$$

$$\Sigma = \frac{P_1\sqrt{u_{0V}}\tau_\beta}{F_{1/2}(u_\mu)x_\lambda\sqrt{\pi}}\times$$
$$\times\frac{\left(z_0 - \dfrac{a_q}{4P_1x_0x_\lambda}\right)^2 + \left(\dfrac{x_0\beta}{k_{m\perp}} - \dfrac{b_q}{2P_1x_0x_\lambda}\right)^2}{z_0\left(z_0^2 + \dfrac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right) + \dfrac{1}{4P_1x_0x_\lambda}\left(a_q\left(\dfrac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2} - z_0^2\right) - 4z_0b_q\dfrac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\right)}, \tag{34}$$

$$\Sigma_0 = \frac{P_1\sqrt{u_{0V}}}{F_{1/2}(u_\mu)x_\lambda\sqrt{\pi}z_0}\left(1 - \frac{a_{0q}}{4P_1x_0x_\lambda z_0}\right), \tag{35}$$

$$A_H = \frac{F_{1/2}(u_\mu)x_\lambda\sqrt{\pi}}{\beta P_1\sqrt{u_{0V}}\tau_\beta}\times$$
$$\times\frac{\dfrac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\left(z_0^2 + \dfrac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right) + \dfrac{k_{m\perp}}{2P_1x_0x_\lambda}\left(b_q\left(z_0^2 - \dfrac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right) - z_0a_q\dfrac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\right)}{\left(z_0 - \dfrac{a_q}{4P_1x_0x_\lambda}\right)^2 + \left(\dfrac{x_0\beta}{k_{m\perp}} - \dfrac{b_q}{2P_1x_0x_\lambda}\right)^2}, \tag{36}$$

$$D_{\perp} = \frac{\Sigma_0 - \Sigma}{\Sigma_0 \beta^2}, \tag{37}$$

$$a_q = \sum_{n=1}^{\infty} n \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial u_{\perp}} \right) u_{\perp} A_1 (\Omega_{1n}, \Omega_{2n})\, du_{\perp}, \tag{38}$$

$$a_{0q} = \sum_{n=1}^{\infty} n \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial u_{\perp}} \right) u_{\perp} A_0 (\Omega_{1n0})\, du_{\perp}, \tag{39}$$

$$b_q = \sum_{n=1}^{\infty} n \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial u_{\perp}} \right) u_{\perp} A_2 (\Omega_{1n}, \Omega_{2n})\, du_{\perp}, \tag{40}$$

$$A_0 (\Omega_{1n0}) = \\ = \frac{(1 - \exp(-\Omega_{1n0}))(2 - q_1 - q_2 + (q_1 + q_2 - 2q_1 q_2)\exp(-\Omega_{1n0}))}{1 - q_1 q_2 \exp(-2\Omega_{1n0})}, \tag{41}$$

$$A_1 (\Omega_{1n}, \Omega_{2n}) = \{(2 - q_1 - q_2) + q_1 q_2 (q_1 + q_2 - 2q_1 q_2)\exp(-4\Omega_{1n}) - \\ - 2(1 - q_1)(1 - q_2)\exp(-\Omega_{1n})(1 - q_1 q_2 \exp(-2\Omega_{1n}))\cos\Omega_{2n} - \\ - [q_1 + q_2 - q_1 q_2 (q_1 + q_2)]\exp(-2\Omega_{1n})\cos(2\Omega_{2n})\} \Big/ \big(1 + q_1^2 q_2^2 \exp(-4\Omega_{1n}) - \\ - 2q_1 q_2 \exp(-2\Omega_{1n})\cos(2\Omega_{2n}), \tag{42}$$

$$A_2 (\Omega_{1n}, \Omega_{2n}) = \{(1 - q_1)(1 - q_2)\exp(-\Omega_{1n})(1 + q_1 q_2 \exp(-2\Omega_{1n})) + \\ + [q_1 + q_2 + q_1 q_2 (q_1 + q_2 - 4)]\exp(-2\Omega_{1n})\cos(\Omega_{2n})\}\sin(\Omega_{2n}) \big/ (1 + \\ + q_1^2 q_2^2 \exp(-4\Omega_{1n}) - 2q_1 q_2 \exp(-2\Omega_{1n})\cos(2\Omega_{2n}). \tag{43}$$

Здесь σ_0 – статическая электропроводность, Σ и Σ_0 – безразмерная удельная электропроводность в присутствии и отсутствии магнитного поля соответственно, R_{H0} – коэффициент Холла в случае толстой пленки $(a \gg \Lambda,\ a \gg \lambda_{BV})$, A_H – безразмерный коэффициент Холла, $D_{\perp}$ – безразмерный коэффициент магнетосопротивления.

4. ПРЕДЕЛЬНЫЕ СЛУЧАИ

1. Случай вырожденного электронного газа $(\exp(u_{\mu}) \gg 1)$.

Данный случай соответствует высокой концентрации, малой эффективной массе и низкой температуре газа свободных носителей заряда (электронов, дырок). Функция распределения Ферми–Дирака примет ступенчатый вид.

$$k_0 = \frac{1}{3}\left(\frac{2}{k_{m\perp}} + k_{m\perp}^2 \right), \quad N_0 = \frac{2x_0 x_{\lambda}}{k_{m\perp}\sqrt{k_0}}, \tag{44}$$

$$P_{11} = \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} \left(1 - \frac{n^2}{N_0^2} \right), \quad P_{21} = \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} \frac{n^2}{N_0^2} \left(1 - \frac{n^2}{N_0^2} \right), \tag{45}$$

$$P_{31} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} \left(1 - \frac{n^2}{N_0^2} \right)^2, \tag{46}$$

$$\Sigma = \frac{3P_{11}\tau_{\beta}\sqrt{k_0}}{4x_{\lambda}} \times \\ \times \frac{\left(z_0 - \dfrac{a_{q1}}{4P_{11}x_0 x_{\lambda}} \right)^2 + \left(\dfrac{x_0 \beta}{k_{m\perp}} - \dfrac{b_{q1}}{2P_{11}x_0 x_{\lambda}} \right)^2}{z_0 \left(z_0^2 + \dfrac{x_0^2 \beta^2}{k_{m\perp}^2} \right) + \dfrac{1}{4P_{11}x_0 x_{\lambda}} \left(a_{q1} \left(\dfrac{x_0^2 \beta^2}{k_{m\perp}^2} - z_0^2 \right) - 4z_0 b_{q1} \dfrac{x_0 \beta}{k_{m\perp}} \right)}, \tag{47}$$

$$\Sigma_0 = \frac{3P_{11}\sqrt{k_0}}{4x_{\lambda}z_0} \left(1 - \frac{a_{0q1}}{4P_{11}x_0 x_{\lambda} z_0} \right), \tag{48}$$

$$A_H = \frac{4x_\lambda}{3\beta P_{11}\tau_\beta\sqrt{k_0}}\times$$
$$\times\frac{\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\left(z_0^2+\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right)+\frac{k_{m\perp}}{2P_{11}x_0x_\lambda}\left(b_{q1}\left(z_0^2-\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right)-z_0a_{q1}\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\right)}{\left(z_0-\frac{a_{q1}}{4P_{11}x_0x_\lambda}\right)^2+\left(\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}-\frac{b_{q1}}{2P_{11}x_0x_\lambda}\right)^2}, \quad (49)$$

$$a_{q1} = \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} n\left(1-\frac{n^2}{N_0^2}\right)A_1(\Omega_{1n},\Omega_{2n}), \quad (50)$$

$$a_{0q1} = \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} n\left(1-\frac{n^2}{N_0^2}\right)A_0(\Omega_{1n0}), \quad (51)$$

$$b_{q1} = \sum_{n=1}^{\mathrm{int}(N_0)} n\left(1-\frac{n^2}{N_0^2}\right)A_2(\Omega_{1n},\Omega_{2n}). \quad (52)$$

2. Случай невырожденного электронного газа $(\exp(-u_\mu)\gg 1)$.

Данный случай соответствует низкой концентрации, высокой эффективной массе и высокой температуре газа свободных носителей заряда (электронов, дырок). Функция распределения Ферми–Дирака примет вид классического распределения Максвелла–Больцмана.

$$u_{0V} = \frac{5}{6}\left(\frac{2}{k_{m\perp}}+k_{m\perp}^2\right), \quad P_{12} = \sum_{n=1}^{\infty}\exp\left(-\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right) \quad (53)$$

$$P_{22} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\exp\left(-\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\Big/P_{12}, \quad (54)$$

$$\Sigma = \frac{P_{12}\tau_\beta\sqrt{u_{0V}}}{x_\lambda\sqrt{\pi}}\times$$
$$\times\frac{\left(z_0-\frac{a_{q2}}{4P_{12}x_0x_\lambda}\right)^2+\left(\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}-\frac{b_{q2}}{2P_{12}x_0x_\lambda}\right)^2}{z_0\left(z_0^2+\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right)+\frac{1}{4P_{12}x_0x_\lambda}\left(a_{q2}\left(\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}-z_H^2\right)-4z_0b_{q2}\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\right)}, \quad (55)$$

$$\Sigma_0 = \frac{P_{12}\sqrt{u_{0V}}}{x_\lambda\sqrt{\pi}z_0}\left(1-\frac{a_{0q2}}{4P_{12}x_0x_\lambda z_0}\right), \quad (56)$$

$$A_H = \frac{x_\lambda\sqrt{\pi}}{\beta P_{12}\tau_\beta\sqrt{u_{0V}}}\times$$
$$\times\frac{\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\left(z_0^2+\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right)+\frac{k_{m\perp}}{2P_{12}x_0x_\lambda}\left(b_{q2}\left(z_0^2-\frac{x_0^2\beta^2}{k_{m\perp}^2}\right)-z_Ha_{q2}\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}\right)}{\left(z_0-\frac{a_{q2}}{4P_{12}x_0x_\lambda}\right)^2+\left(\frac{x_0\beta}{k_{m\perp}}-\frac{b_{q2}}{2P_{12}x_0x_\lambda}\right)^2}, \quad (57)$$

$$a_{q2} = \sum_{n=1}^{\infty} n\exp\left(-\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\int_0^\infty u_\perp e^{-u_\perp}A_1(\Omega_{1n},\Omega_{2n})\,du_\perp, \quad (58)$$

$$a_{0q2} = \sum_{n=1}^{\infty} n\exp\left(-\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\int_0^\infty u_\perp e^{-u_\perp}A_0(\Omega_{1n0})\,du_\perp, \quad (59)$$

$$b_{q2} = \sum_{n=1}^{\infty} n\exp\left(-\frac{u_{0V}k_{m\perp}^2n^2}{4x_0^2x_\lambda^2}\right)\int_0^\infty u_\perp e^{-u_\perp}A_2(\Omega_{1n},\Omega_{2n})\,du_\perp. \quad (60)$$

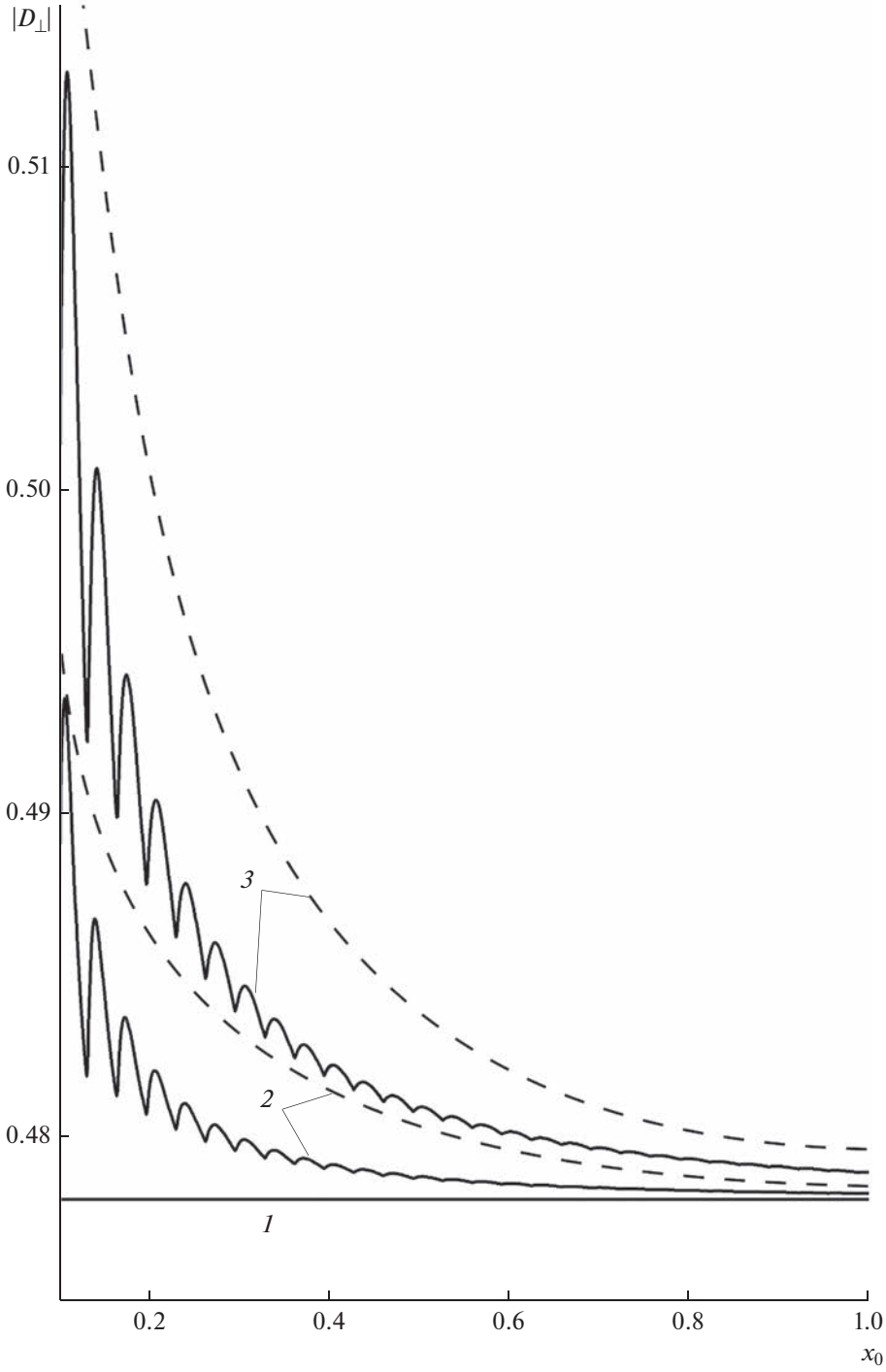


Рис. 1. Зависимость $|D_\perp|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной толщины пленки x_0 при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

3. Случай зеркальных границ пленки $(g_1 = g_2 = 0)$.

Для гладкой поверхности некоторые вспомогательные величины A_0, A_1, A_2 обращаются в нуль в независимости от толщины пленки. В итоге выражения (34)–(43) преобразуются следующим образом:

$$\Sigma = \frac{P_1\sqrt{u_{0V}}\tau_\beta}{F_{1/2}(u_\mu)x_\lambda z_0\sqrt{\pi}}, \quad A_H = \frac{F_{1/2}(u_\mu)x_\lambda x_0\sqrt{\pi}}{P_1\sqrt{u_{0V}}k_{m\perp}}, \tag{61}$$

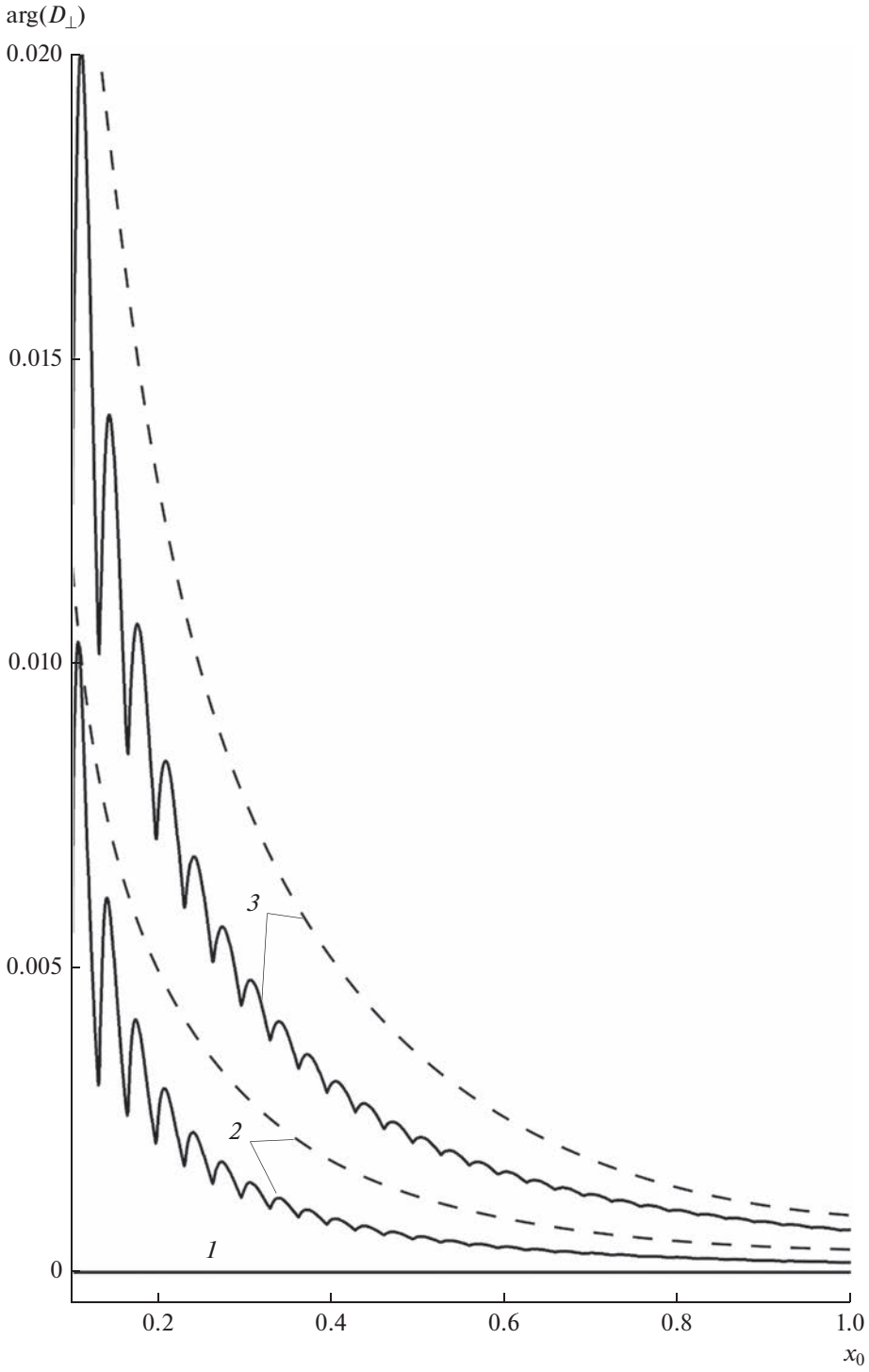


Рис. 2. Зависимость $\arg(D_\perp)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной толщины пленки x_0 при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

$$A_H = \frac{F_{1/2}(u_\mu)\, x_\lambda x_0 \sqrt{\pi}}{P_1 \sqrt{u_{0V}}\, k_{m\perp}}, \quad D_\perp = \frac{1-\tau_\beta}{\beta^2} \approx \frac{1}{6k_{m\perp}^2}. \tag{62}$$

В этом предельном случае коэффициенты Холла и магнетосопротивления не зависят от толщины пленки и от величины магнитного поля.

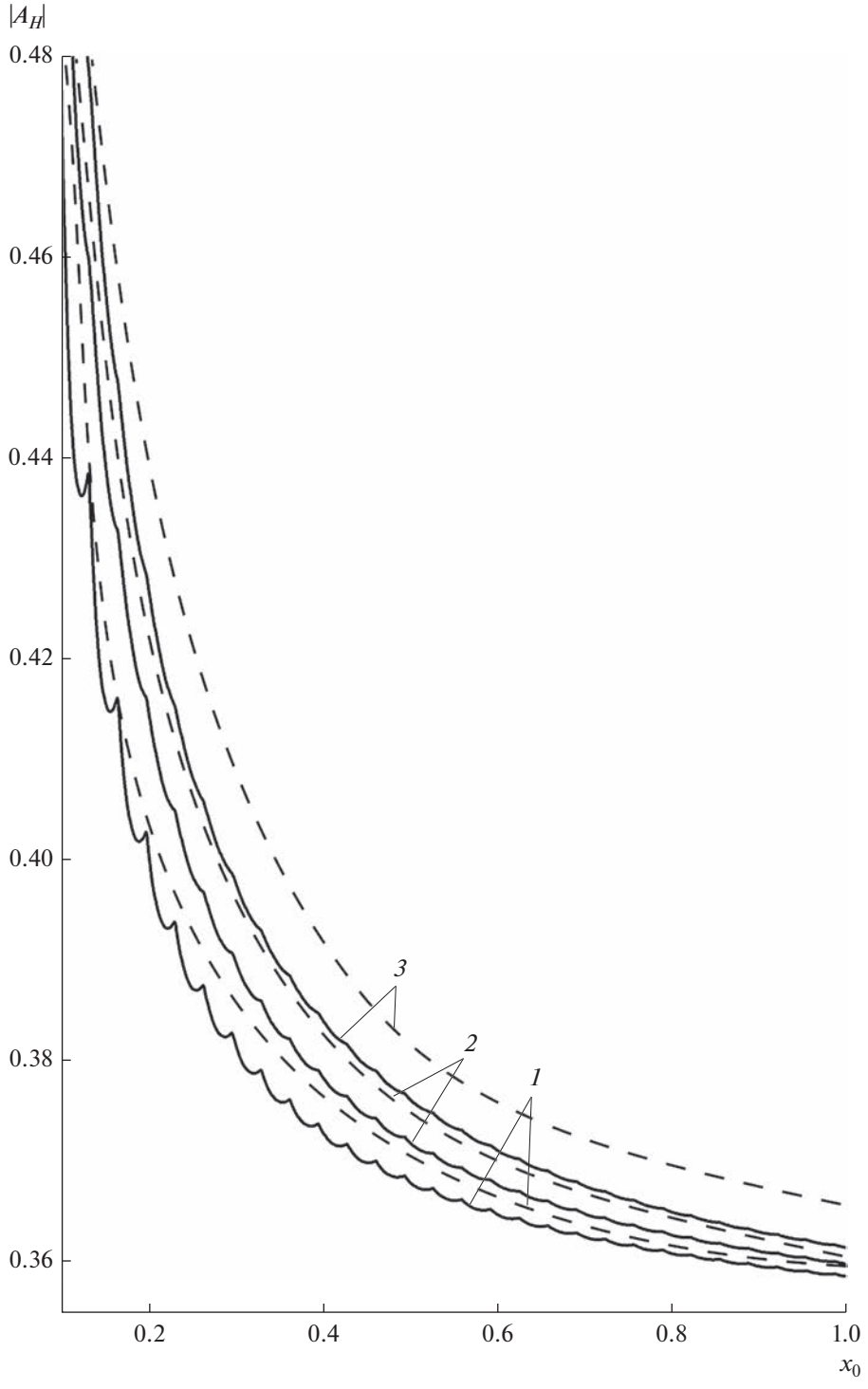


Рис. 3. Зависимость $|A_H|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной толщины пленки x_0 при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

5. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Везде в расчетах будем использовать безразмерную поперечную эффективную массу для кремния Si, равную $k_{m\perp} = 0.59$.

На рис. 1–4 изображены зависимости модуля и аргумента безразмерных коэффициентов магнетосопротивления $D_\perp$ и Холла A_H от безразмерной толщины пленки x_0. С увеличением толщины пленки

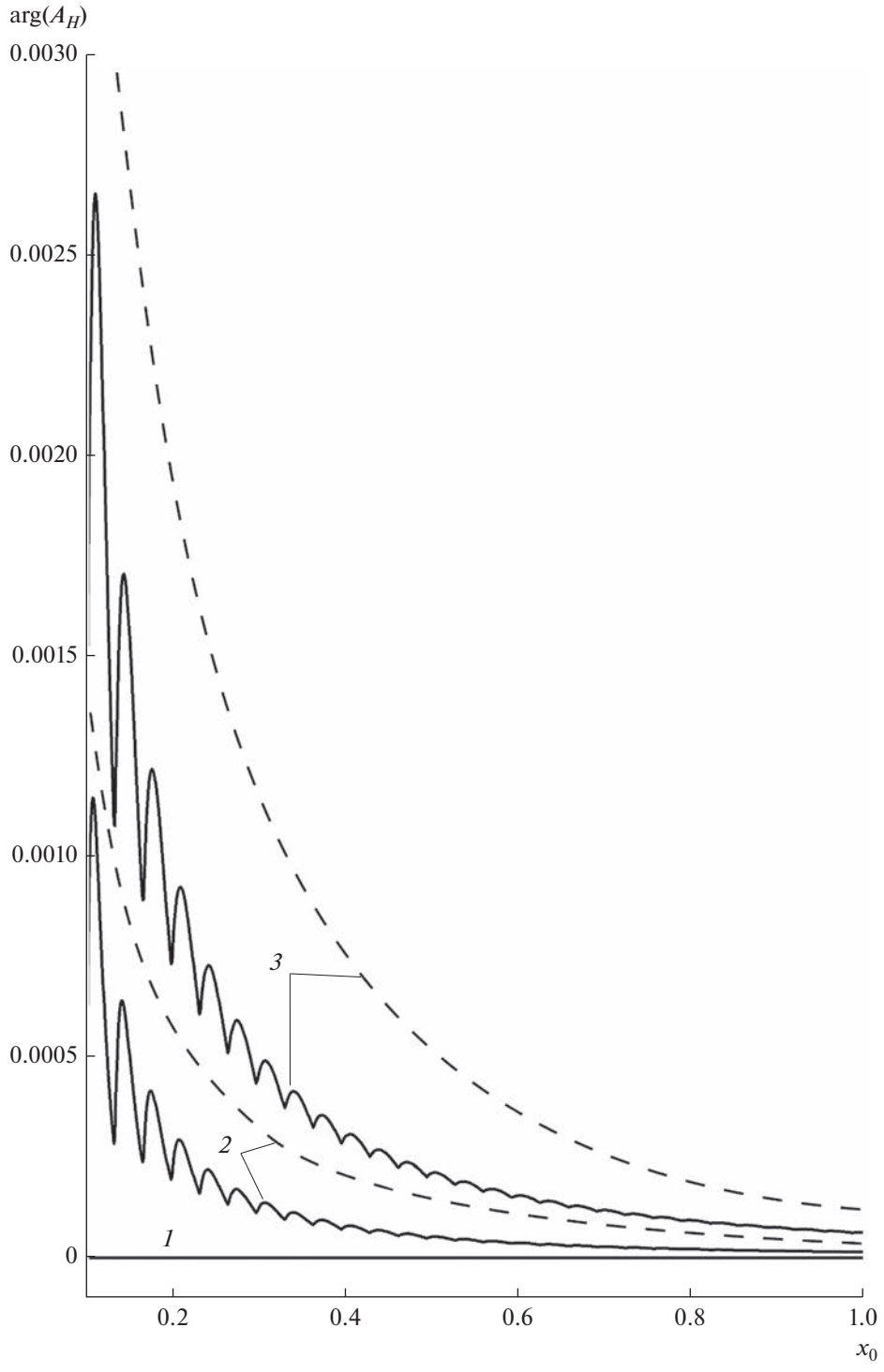


Рис. 4. Зависимость $\arg(A_H)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной толщины пленки x_0 при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

данные коэффициенты уменьшаются как по модулю, так и по аргументу, что связано не только с уменьшением вклада поверхностного рассеяния по сравнению с объемным рассеянием, но и с ростом числа разрешенных энергетических состояний носителей заряда. На графиках присутствуют осцилляции для случая вырожденного электронного газа. Период этих осцилляций равен:

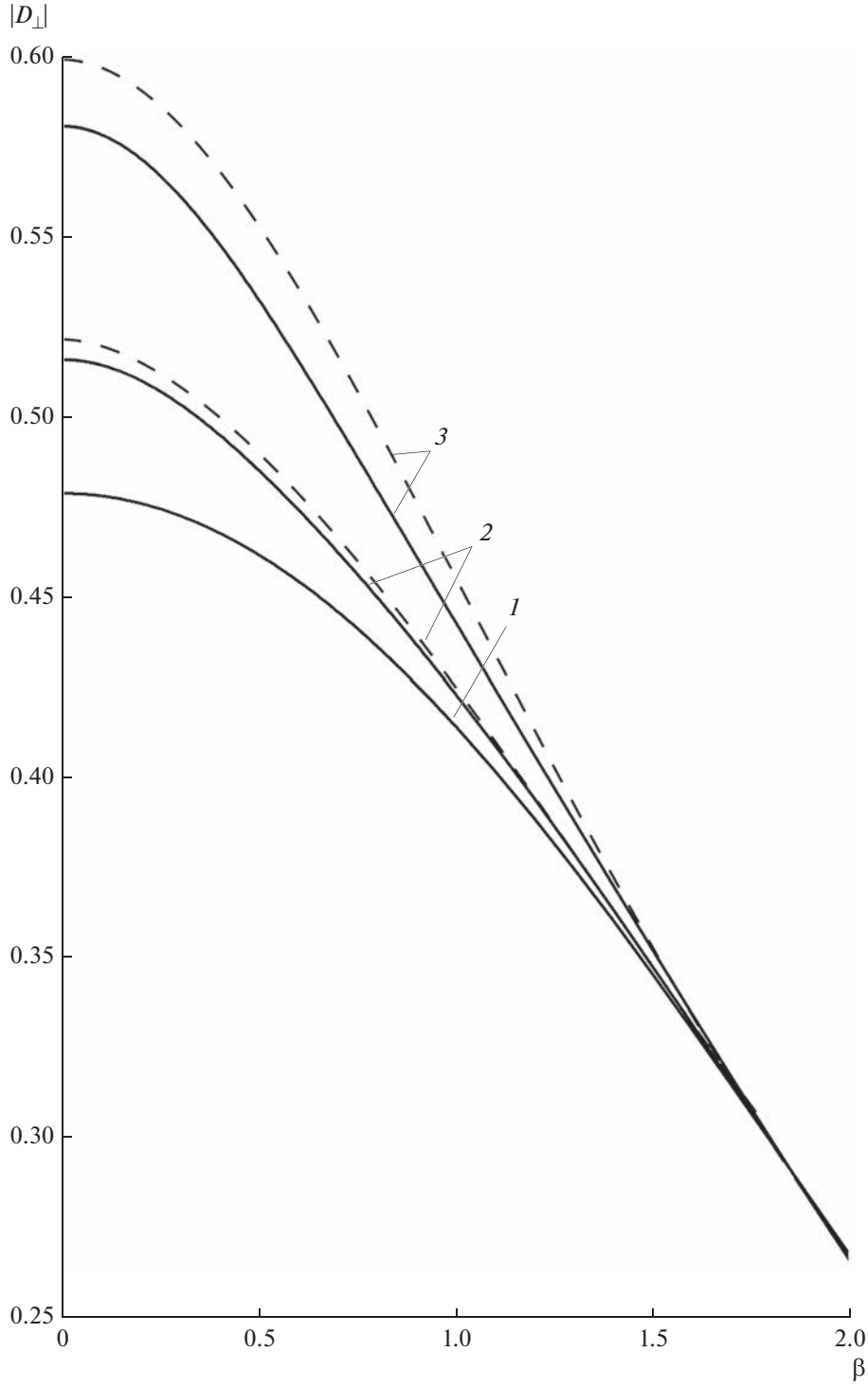


Рис. 5. Зависимость $|D_\perp|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной индукции магнитного поля β при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

$$\frac{x_B}{N_0} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{k_{m\perp}\left(2 + k_{m\perp}^3\right)}{3}}.$$

В случае невырожденного электронного газа осцилляции пропадают из разброса по тепловым скоростям. С уменьшением шероховатости поверхно-

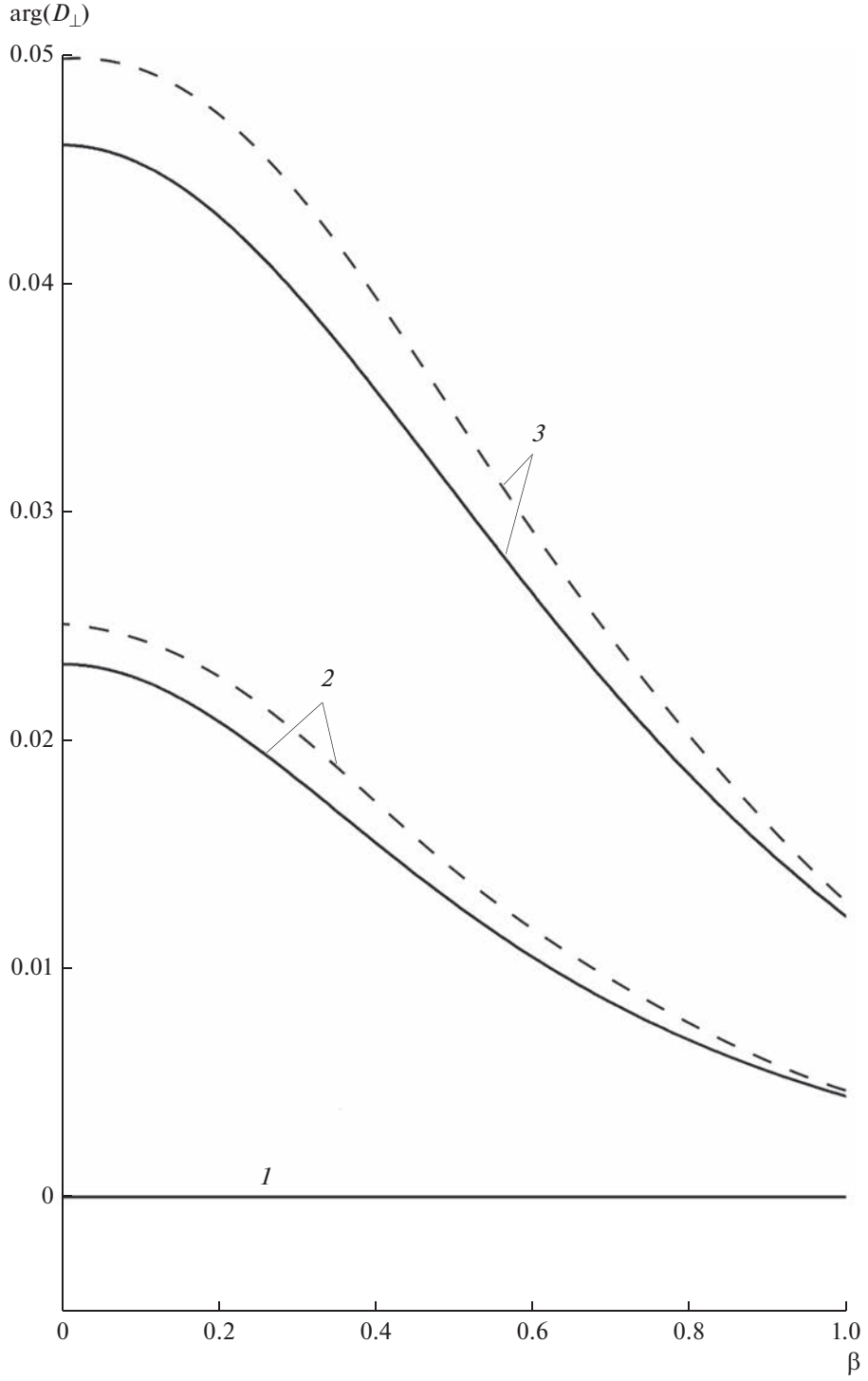


Рис. 6. Зависимость $\arg(D_\perp)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной индукции магнитного поля β при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

стей пленки относительное расхождение между случаями вырожденным и невырожденным электронным газом снижается. При зеркальном рассеянии коэффициенты не зависят от степени вырождения газа свободных носителей заряда (51), (52).

На рис. 5 и 6 построены зависимости модуля и аргумента безразмерного коэффициента магнетосопротивления $D_\perp$ от безразмерной индукции магнитного поля β. В скрещенном электрическом и магнитном поле траектория электро-

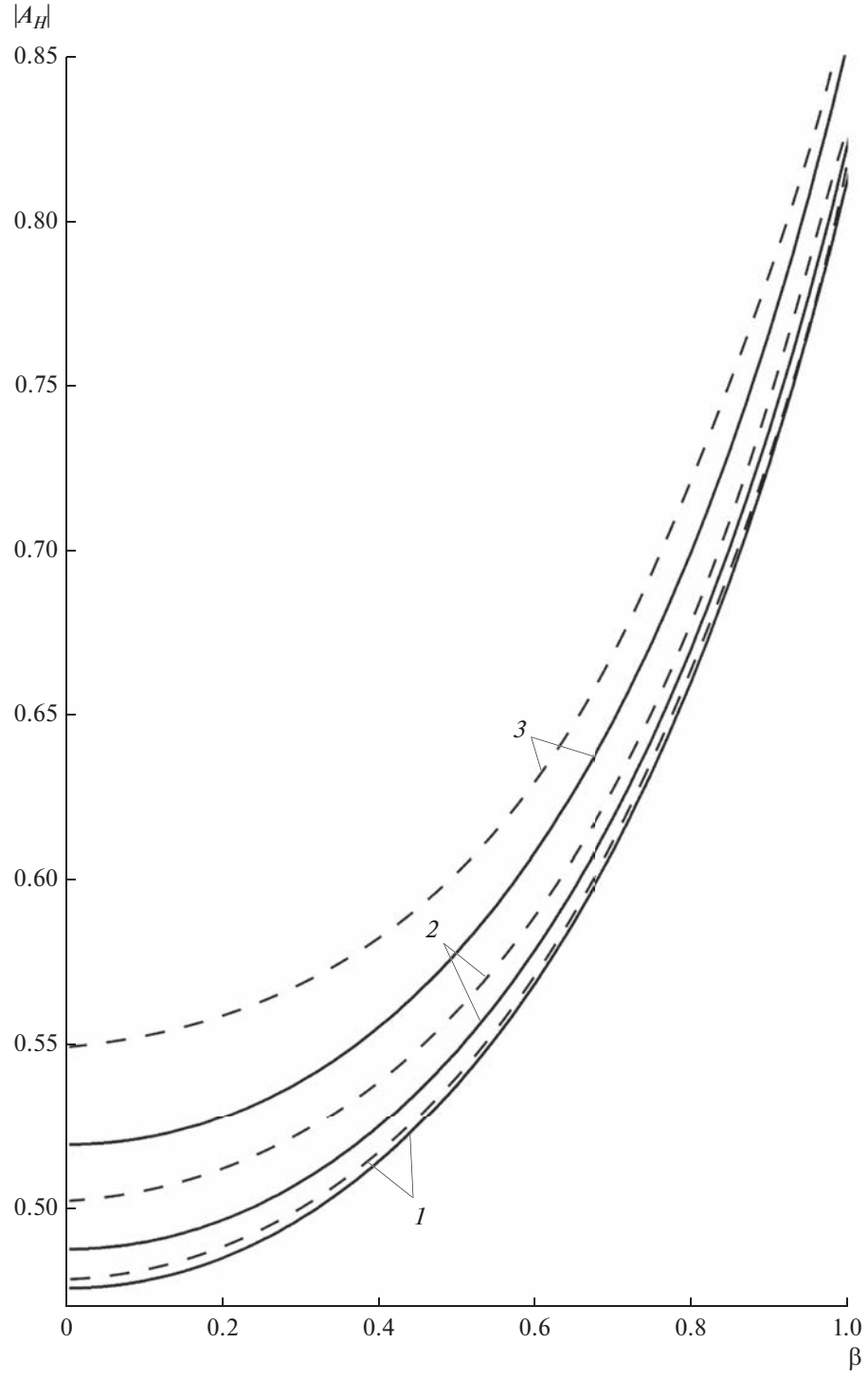


Рис. 7. Зависимость $|A_H|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной индукции магнитного поля β при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

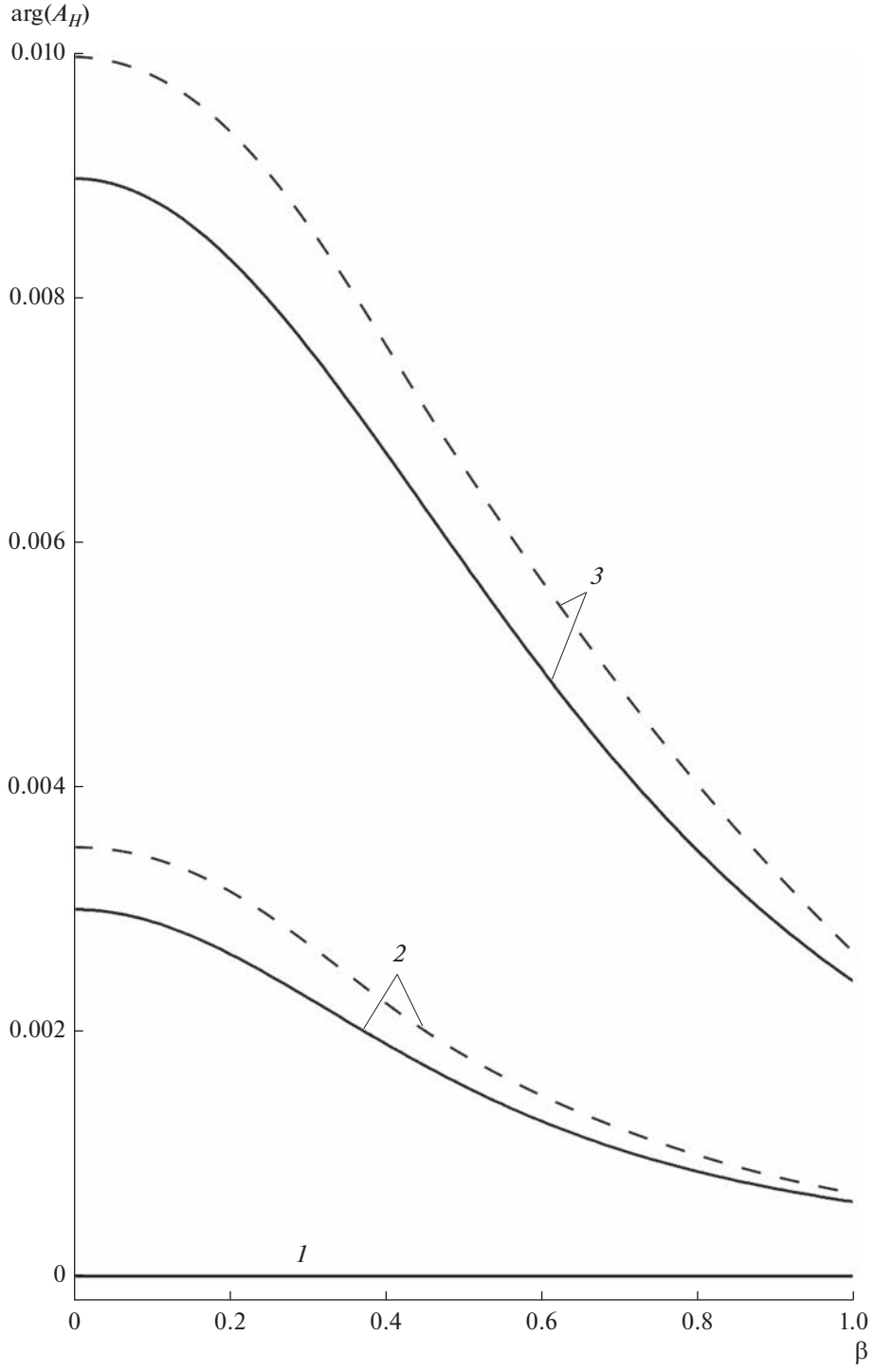


Рис. 8. Зависимость $\arg(A_H)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от безразмерной индукции магнитного поля β при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$. Кривые *1*, *2*, *3* построены при $g_1 = g_2 = 0$; $g_1 = 0.01$, $g_2 = 0.02$; $g_1 = 0.03$, $g_2 = 0.04$ соответственно.

нов в общем случае является трохоида. В случае сильного магнитного поля траектория носителей заряда вырождается в прямую, то есть случай сильного магнитного поля аналогичен случаю отсутствия данного магнитного поля, следовательно, с ростом магнитного поля магнетосопротивление уменьшается как по модулю, так и по аргументу.

На рис. 7 и 8 представлены зависимости модуля и аргумента безразмерного коэффициента Холла

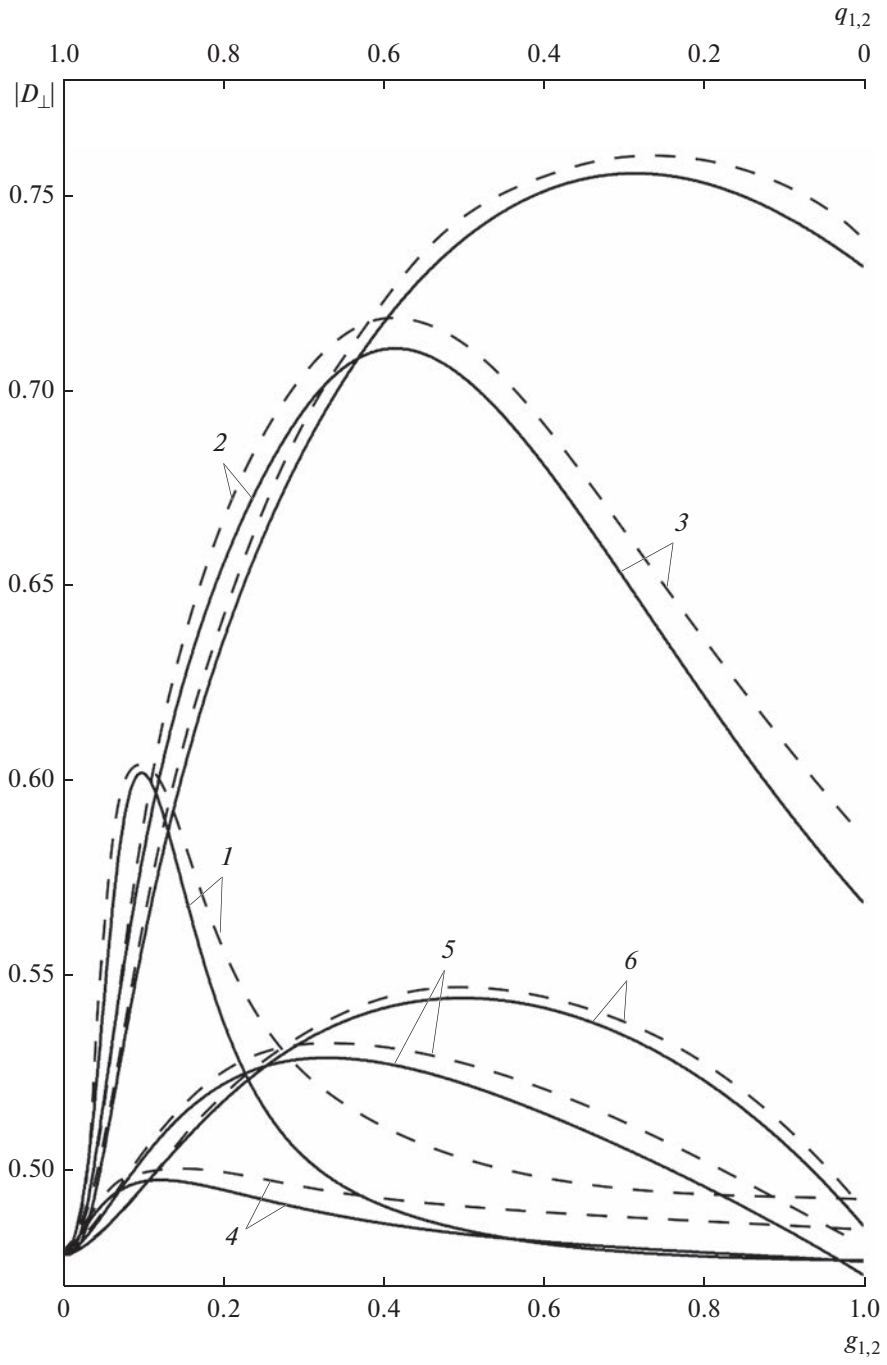


Рис. 9. Зависимость $|D_\perp|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от параметров шероховатости поверхностей. $g_{1,2} = g_1 = g_2$ (кривые *1–3*) и от коэффициентов зеркальностей поверхностей $q_{1,2} = q_1 = q_2$ (кривые *4–6*) при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1* и *4*, *2* и *5*, *3* и *6* построены при $x_0 = 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно.

A_H от безразмерной индукции магнитного поля β. С ростом магнитного поля модуль коэффициента Холла возрастает, так как растет напряжение Холла, а аргумент (разность фаз между напряженностью Холла и плотности тока) снижается.

На рис. 9–12 построены зависимости модуля и аргумента безразмерных коэффициентов магнетосопротивления $D_\perp$ и Холла A_H от параметров шероховатости поверхностей $g_{1,2} = g_1 = g_2$ для модели Соффера и от коэффициентов зеркальностей по-

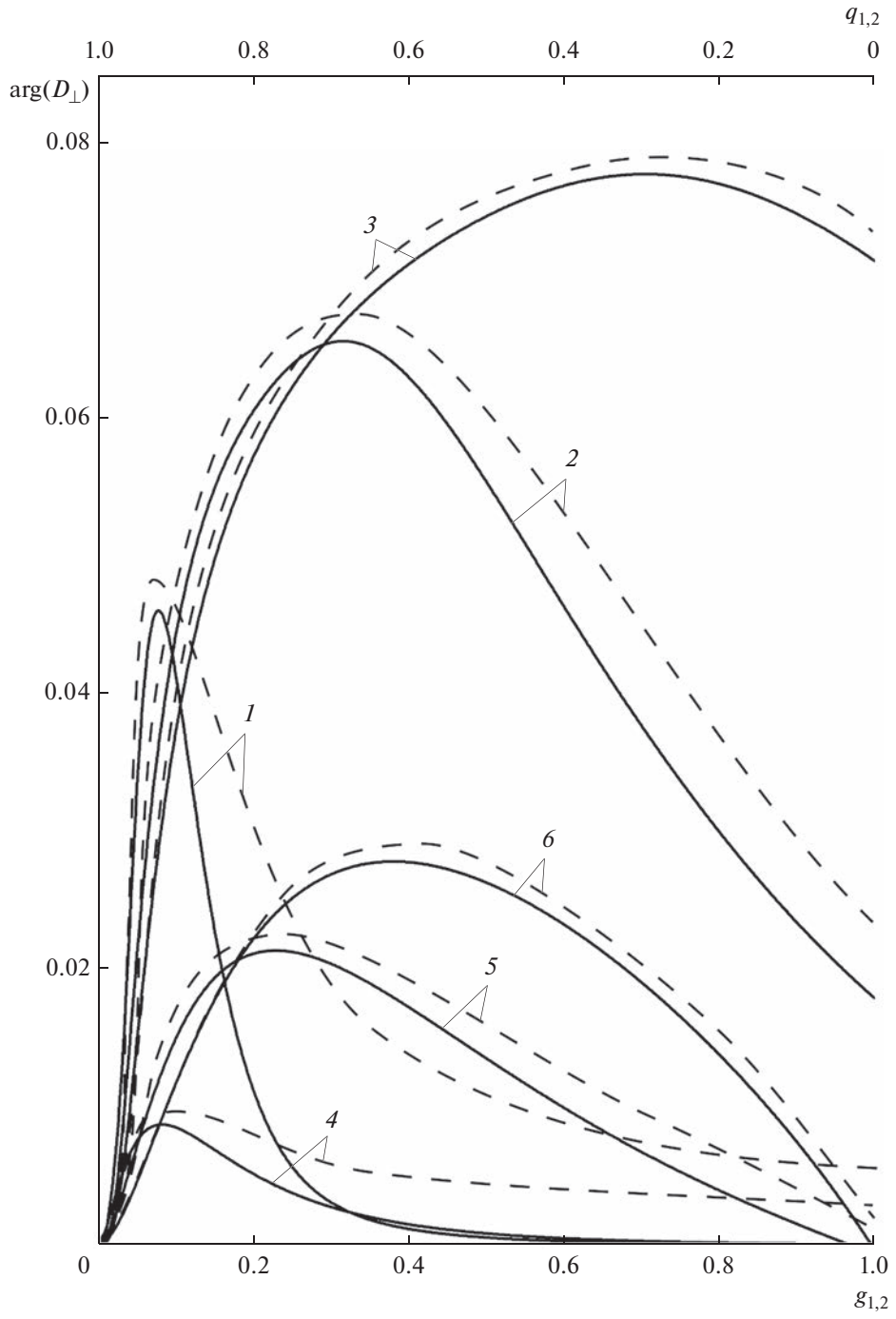


Рис. 10. Зависимость $\arg(D_\perp)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от параметров шероховатости поверхностей $g_{1,2} = g_1 = g_2$ (кривые *1–3*) и от коэффициентов зеркальностей поверхностей $q_{1,2} = q_1 = q_2$ (кривые *4–6*) при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1* и *4*, *2* и *5*, *3* и *6* построены при $x_0 = 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно.

верхностей $q_{1,2} = q_1 = q_2$ и для модели Фукса. Максимум у всех зависимостей объясняется траекторией носителей заряда: электрон рассеивается, когда его продольная скорость максимальна. При полном зеркальном отражении $(g_1 = g_2 = 0,\ q_1 = q_2 = 1)$ значения совпадают. Наибольшее различие между расчетами наблюдается в диапазоне значений параметров шероховатости $g = 0.2–0.4$ $(q = 0.6–0.8)$.

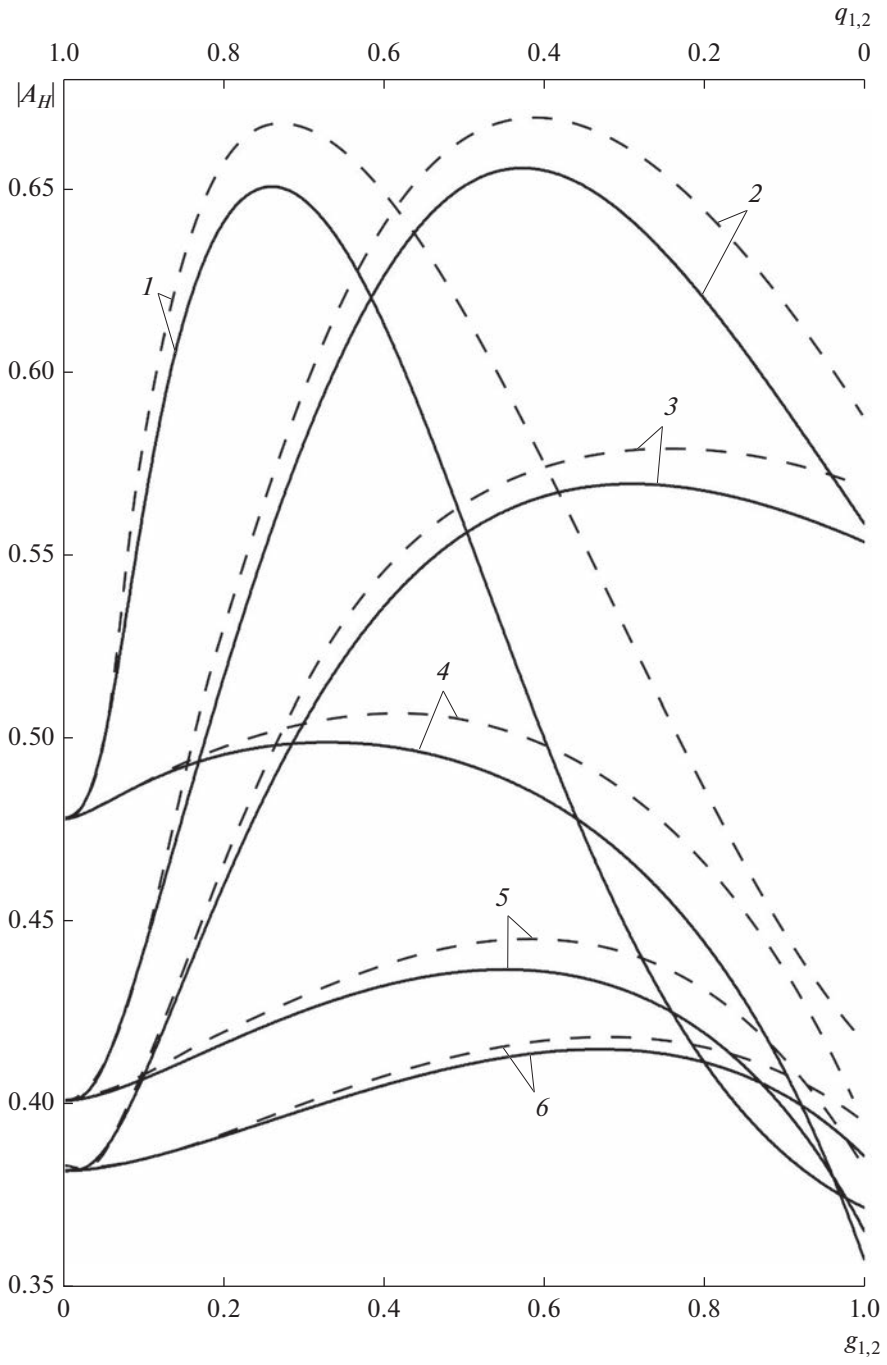


Рис. 11. Зависимость $|A_H|$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от параметров шероховатости поверхностей $g_{1,2} = g_1 = g_2$ (кривые *1–3*) и от коэффициентов зеркальностей поверхностей $q_{1,2} = q_1 = q_2$ (кривые *4–6*) при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1* и *4*, *2* и *5*, *3* и *6* построены при $x_0 = 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно.

На рис. 13 построены зависимости теоретических и экспериментальных данных для пленки висмута [10]. Висмут чистоты 99.999% осаждали методом электронно-лучевого испарения в вакууме 10^{-6} Па. Образец помещен во магнитное поле величиной 1T. Метод определения проводимости пленки Bi был показан в статье [9]. Небольшое расхождение экспериментальных и теоретических результатов возможно связано с поликристаллической структурой пленки.

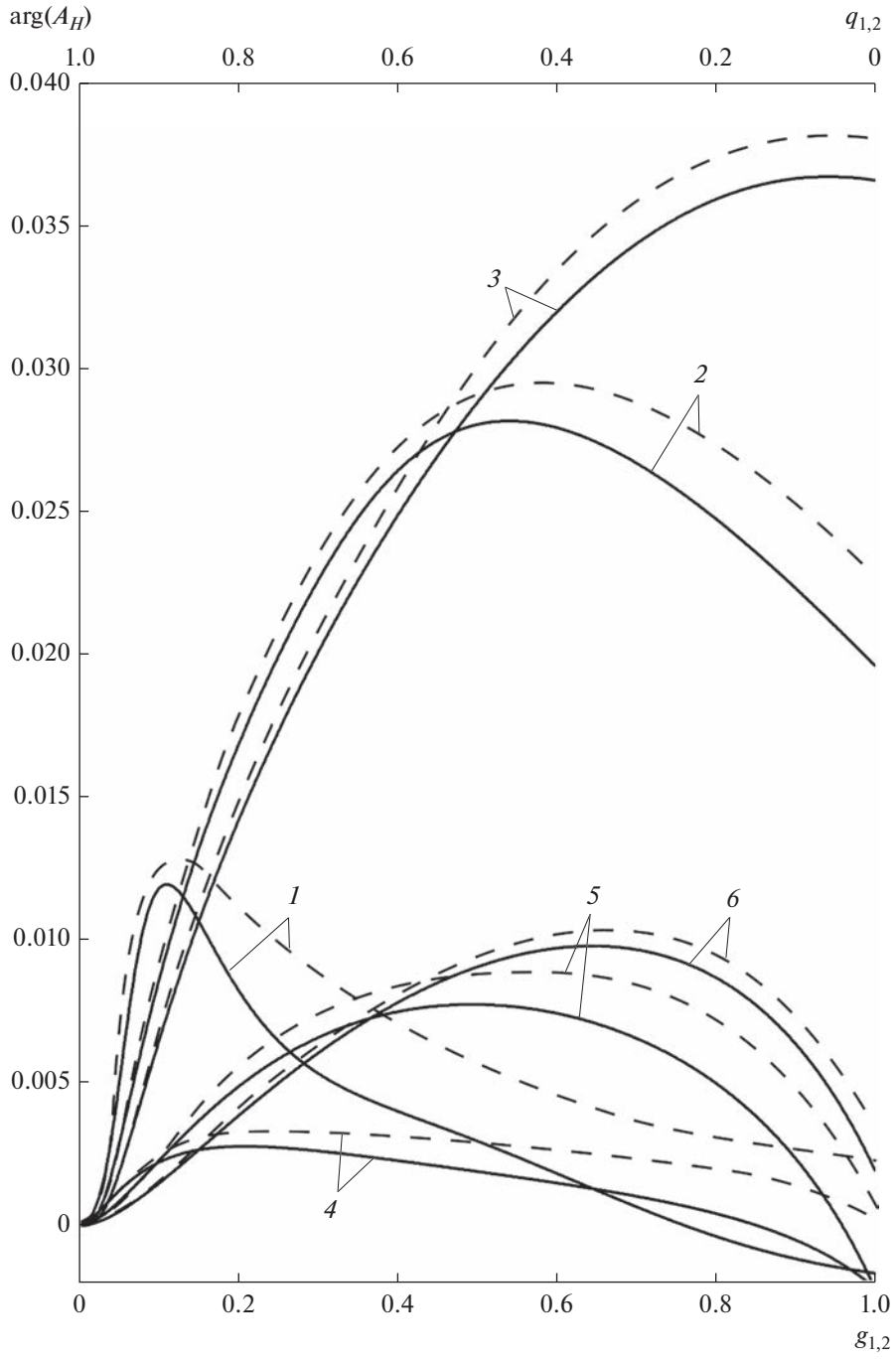


Рис. 12. Зависимость $\arg(A_H)$ в вырожденном случае (сплошные линии) и в невырожденном случае (пунктирные линии) от параметров шероховатости поверхностей $g_{1,2} = g_1 = g_2$ (кривые *1–3*) и от коэффициентов зеркальностей поверхностей $q_{1,2} = q_1 = q_2$ (кривые *4–6*) при $k_{m1} = 0.59$, $y_0 = 0.1$, $x_0 = 0.1$, $\beta = 0.1$. Кривые *1* и *4*, *2* и *5*, *3* и *6* построены при $x_0 = 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассчитаны коэффициенты Холла и магнетосопротивления нанослоя в поперечном магнитном поле с учетом модели Софера и квантования энергии носителей заряда. Обнаружены осцилляции в зависимости коэффициентов Холла и магнетосопротивления от толщины пленки в случае вырожденного электронного газа. По периоду этих осцилляций мож-

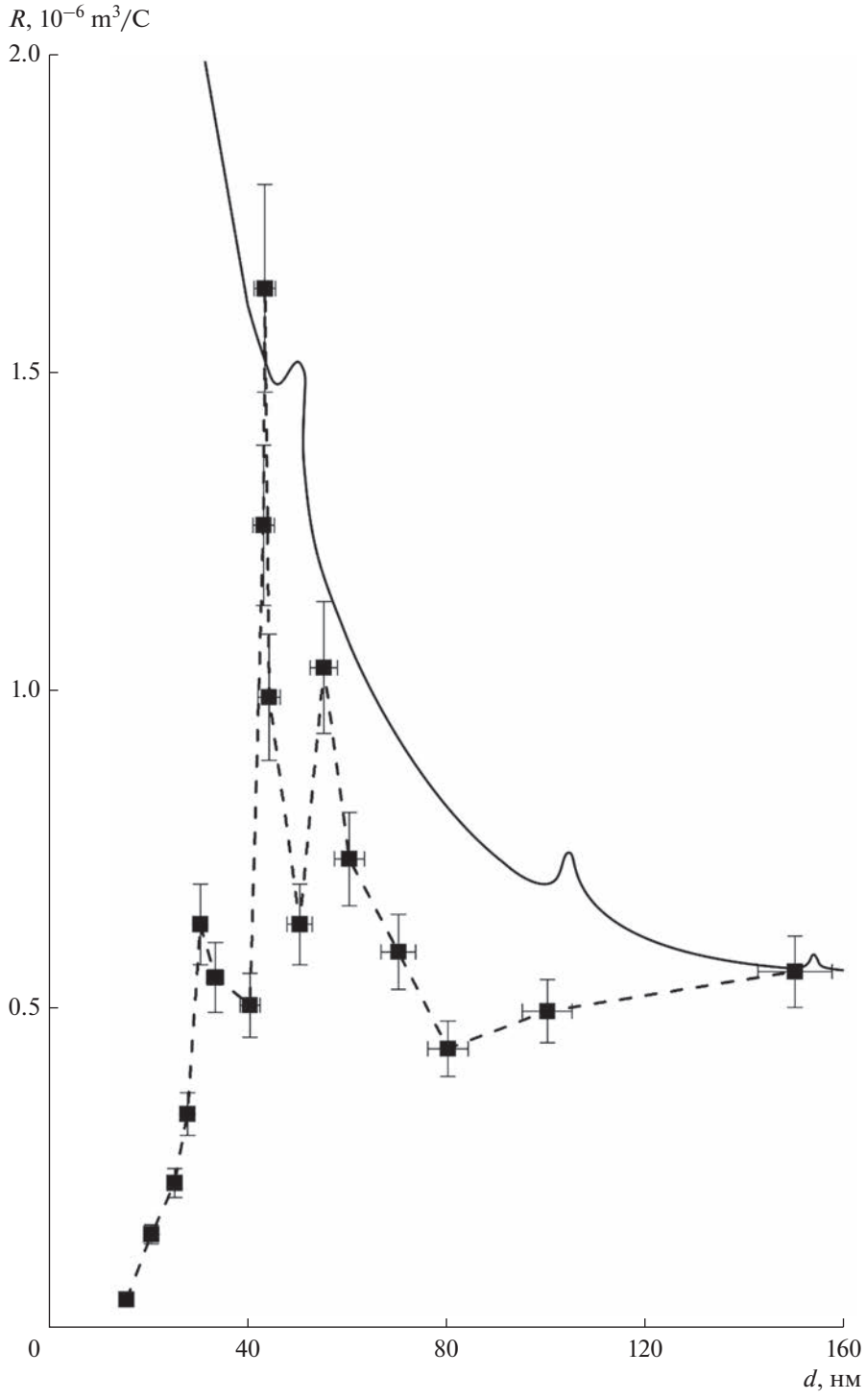


Рис. 13. Зависимость коэффициента Холла тонкой пленки висмута от толщины. Точками обозначены экспериментальные данные [10], а сплошной кривой – теоретический расчет. Расчет выполнен при следующих параметрах: $\lambda = 400$ нм, $\lambda_B = 27$ нм, $k_{m\perp} = 0.17$, $g_{s1} = g_{s2} = 1.6$ нм.

но определить толщину пленки, эффективную массу. В случае зеркальных границ отсутствует зависимость гальваномагнитных коэффициентов от магнитного поля, так как не учитывалась зависимость времени релаксации от энергии. Для модели Соффера получаются большие значения коэффициентов Холла и магнетосопротивления, чем для модели Фукса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Звездин А.К., Давыдова М.Д., Звездин К.А.* // УФН. 2018. Т. 188. С. 1238.
2. *Блинов М.И., Черненко В.А., Прудников В.Н., Асегуинолаза И.Р., Барандиаран Ж.М., Ладеранта Э., Ховайло В.В., Грановский А.Б.* // ЖЭТФ. 2021. Т. 159. С. 546.
3. *Семенчинский С.Г.* Измерительная техника. 2021. Т. 1. С. 9.
4. *Soffer S.B.* // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 1710.
5. *Ünal B.* // AIP Advances. 2012. V. 2. P. 042145.
6. *Chatterjee S., Meyerovich A.E.* // Physical review. 2010. V. 81. P. 245409.
7. *Bihun R.I., Stasyuk Z.V., Balitskii O.A.* // Physica B: Condens. Matter. 2016. V. 487. P. 73.
8. *Kuznetsova I.A., Savenko O.V., Romanov D.N.* // JPCS. 2021. V. 2056. P. 012018.
9. *Kuznetsova I.A., Savenko O.V., Romanov D.N.* // Phys. Lett. A. 2022. V. 427. P. 127933.
10. *Демидов Е.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Крушельницкий А.Н., Суслов А.В., Суслов М.В.* // ФТП. 2019. Т. 63. С. 736.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 282–289

НАДЕЖНОСТЬ

УДК 621.382

ИССЛЕДОВАНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ МОП-ТРАНЗИСТОРА К ВОЗДЕЙСТВИЮ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ, ВОЗНИКАЮЩИХ ВСЛЕДСТВИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

© 2023 г. А. А. Глушко[a], *, С. А. Морозов[a], **, М. Г. Чистяков[b], *

[a]*Федеральное государственное учреждение "Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук", Нахимовский проспект, 36, к. 1, Москва, 117218 Россия*

[b]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)", ул. 2-я Бауманская, 5, к. 1, Москва, 105005 Россия*

**E-mail: andrei19386@mail.ru*

***E-mail: Sergey_Morozov@srisa.ru*

****E-mail: chistyakov.mikhail.g@gmail.com*

Поступила в редакцию 06.04.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Ранее было показано [1, 2], что зависимость сбоеустойчивости ячейки статической оперативной памяти от энергии вторичных частиц, возникающих в результате воздействия потока нейтронов, не учитывает другой существенный фактор – в какой части транзистора произошла генерация этих вторичных частиц. Для определения области ячейки памяти, в которой воздействие вторичных частиц может привести к возникновению сбоя, была исследована вероятность возникновения сбоя в зависимости от места возникновения вторичной частицы. Предложен метод анализа накопленного заряда для оценки сбоеустойчивости ячейки статической оперативной памяти в зависимости от места возникновения вторичной частицы, и заряда, соответствующего запасу статической помехоустойчивости. Анализ проводился на основе результатов приборно-технологического моделирования одиночного МОП-транзистора, входящего в состав ячейки статической оперативной памяти, и интегрирования полученных значений токовых откликов от областей транзистора.

Ключевые слова: TCAD, вторичные частицы, СОЗУ, МОП

DOI: 10.31857/S0544126923700448, **EDN:** NXDJBB

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопросы радиационной стойкости электронной аппаратуры являются чрезвычайно важными с позиции ее проектирования и эксплуатации. Разработка сбоеустойчивой аппаратуры, отвечающей требованиям по снижению массогабаритных параметров, невозможна без обеспечения сбоеустойчивости электронной компонентой базы (ЭКБ). Для создания ЭКБ, стойкой к нейтронному облучению, необходимо разработать конструктивно-технологический базис, на основе которого будет разработана библиотека стандартных элементов и с ее помощью – микросхема. Основными элементами этого базиса должны быть схемно-технологические решения, обеспечивающие стойкость к воздействию нейтронного облучения [1, 2]. Оценка наличия и частоты сбоев, а также исследование механизмов их возникновения является центральной задачей при построении схемно-технологических решений, обеспечивающих стойкость к воздействию нейтронного облучения.

Одним из важнейших элементов СБИС, чувствительных к воздействию одиночных заряженных частиц и нейтронов, является схема статической оперативной памяти [5, 6]. Рассмотрим одиночную ячейку статической оперативной памяти, ее электрическая принципиальная схема представлена на рис. 1.

Одним из факторов, вследствие которого происходит нарушение функционирования ячейки памяти, может быть воздействие потока быстрых нейтронов. Исследования, посвященные одиночным сбоям, возникающим вследствие их воздействия, описаны в работах [1, 3, 4]. В частности, в работе [1] для более детального изучения процесса проведено сопряжение системы приборно-технологического моделирования с системой моделирования радиационного транспорта. В этой работе в качестве критерия отбора событий ис-

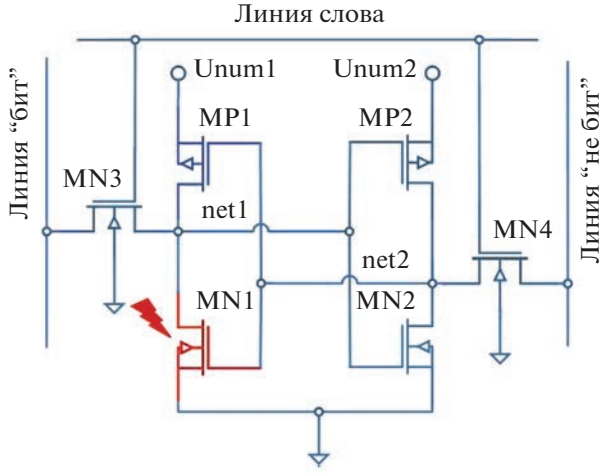


Рис. 1. Схема ячейки СОЗУ.

пользовался максимум энергии вторичной частицы, а под чувствительной областью подразумевалась вся область МОП-транзистора.

Выбранный в работе [1] метод отбора частиц приводил к тому, что при дальнейшем моделировании работы ячейки памяти воздействия вторичных частиц с одной и той же энергией приводили к различным результатам. Как следствие, это вызывало необходимость проводить моделирование работы ячейки СОЗУ для случаев, когда влияние вторичных частиц на составляющие ее транзисторы либо было пренебрежимо малым, либо транзисторы были не подвержены их влиянию, а, следовательно, и сбои в работе ячейки памяти не наблюдались.

Анализ результатов проведенного моделирования показал, что поведение ячейки СОЗУ зависит не только от энергии попадающей частицы, но и от места возникновения вторичной заряженной частицы в ней.

Кроме того, в работе [1] показано, что причиной возникновения сбоя в ячейке памяти является превышение критического заряда. В связи с этим, для оценки событий, заведомо не приводящих к сбою в ней, достаточно выполнить моделирование работы входящего в нее одиночного транзистора, а не моделирование работы всей ячейки памяти целиком. Это позволит без выполнения приборно-технологического моделирования определить, какие события потенциально могут привести к возникновению сбоя, а какие не могут. Подобный подход позволит в дальнейшем сократить объем и соответственно уменьшить время необходимого приборно-технологического моделирования работы ячейки памяти и определить ту область входящего в нее транзистора, которая наиболее чувствительна к воздействию вторичных заряженных частиц. Поэтому задача определения области транзистора, при попадании в которую вторичных частиц потенциально возможен сбой ячейки памяти, является актуальной. Эту область транзистора в дальнейшем будем называть чувствительной областью.

Цель настоящей работы состояла в определении чувствительной области МОП-транзистора как критерия отбора вторичных частиц, пролетающих через него.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

– провести анализ приборно-технологической модели МОП-транзистора ячейки памяти;

– разработать методику имитации треков вторичных частиц нейтронного облучения для выбранной приборно-технологической модели МОП-транзистора;

– провести анализ токовых откликов МОП-транзистора при воздействии вторичных частиц нейтронного облучения;

– определить статический запас помехоустойчивости ячейки памяти;

– определить чувствительные области МОП-транзистора ячейки памяти.

2. ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОП-ТРАНЗИСТОРА

Для определения положения чувствительной области МОП-транзистора относительно его затвора, контактов к “телу” транзистора, областей стока и истока, рассмотрим приборно-технологическую модель МОП-транзистора с прямолинейным затвором. Топология и вертикальный профиль такого МОП-транзистора представлены на рис. 2 и 3.

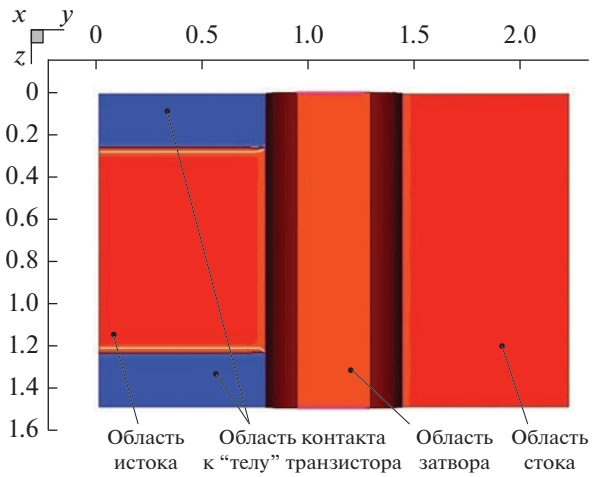


Рис. 2. Топология рассматриваемого транзистора.

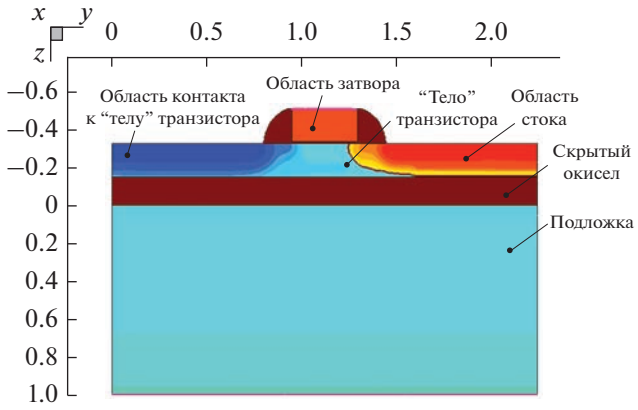


Рис. 3. Вертикальный профиль рассматриваемого транзистора.

3. ИМИТАЦИЯ ТРЕКОВ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ

Определение чувствительной области МОП-транзистора выполнено на основе исследования треков, имитирующих треки вторичных частиц, возникших вследствие нейтронного взаимодействия.

Вследствие высокой вычислительной сложности расчета большого числа вариантов проникновения нейтрона в объеме полупроводникового материала необходимо определить те направления, в которых расчет чувствительной области был бы наиболее целесообразным и информативным. Очевидно, что наиболее чувствительными к воздействиям внешних частиц должны быть те области, в которых концентрация свободных носителей заряда наименьшая, а значит, изменение чувствительности следует искать в направлениях, где существует обратно смещенный p-n-переход (с большой шириной обедненной области). Именно поэтому задача определения чувствительной области МОП-транзистора выполнена в первую очередь для оси y, перпендикулярной затвору транзистора.

Расчеты выполнены для двух взаимно перпендикулярных направлений пролета частицы – параллельно оси x и параллельно оси z. В качестве примера рассмотрено воздействие атома кремния с линейной потерей энергии 0.07 пКл/мкм. Длина трека, используемая для расчетов, составляла 1.6 мкм, что больше ширины канала МОП-транзистора, а также толщины областей истока и стока МОП-транзистора (областей стока и истока). Поэтому справедливо использование выбранного трека вторичной частицы совместно с приборно-технологической моделью.

Токовые всплески, полученные для имитирующих треков вторичных частиц, воздействующих параллельно оси x, на порядок меньшие, чем токовые всплески для имитирующих треков вторичных частиц, воздействующих параллельно оси z. Поэтому в дальнейшем использовались именно имитирующие треки вторичных частиц, воздействующие параллельно оси z, а в результатах указана только начальная координата возникновения частицы.

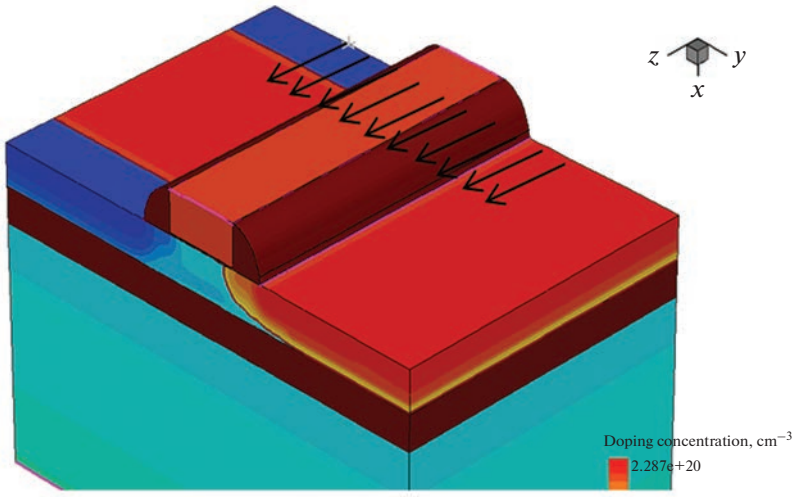


Рис. 4. Места возникновения вторичных частиц.

В связи с этим в дальнейшем выполнено моделирование воздействия вторичных частиц, начальная координата которых (в соответствии с рис. 2–3, координата по оси *y*) меняется перпендикулярно затвору транзистора.

4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОКОВЫХ ОТКЛИКОВ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ

Выполнено приборно-технологическое моделирование отдельного транзистора, входящего в состав ячейки статической оперативной памяти при воздействии вторичной заряженной частицы, порожденной в результате ядерной реакции взаимодействия нейтрона с кристаллической решеткой кремния. Места возникновения и направления пролета вторичных частиц показаны на рис. 4.

Начальная координата частицы варьировалась в направлении, перпендикулярном затвору транзистора (ось *y*, рис. 4). В результате моделирования построены семейства временных зависимостей токовых откликов транзистора с учетом начального положения, рис. 5 (*а* – на стоке, *б* – на затворе, *в* – на истоке).

Токовые отклики построены при нулевом смещении на затворе (наихудший случай, [6]), а на сток подано напряжение, соответствующее напряжению питания ячейки памяти. По временным зависимостям токовых откликов можно определить накопленный заряд $q_{\text{нак}}$, полученный в результате воздействия вторичной заряженной частицы [5], формула (1).

$$q_{\text{нак}} = \int_0^T I_{drain} dt, \qquad (1)$$

где I_{drain} – токовый отклик транзистора на выводе стока, T – продолжительность временного отклика воздействия вторичной частицы.

На рис. 6 представлен график накопленных зарядов от координаты попадания вторичной частицы. Помимо накопленного заряда, на рис. 6 пунктиром показаны границы затвора транзистора.

5. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТАТИЧЕСКОГО ЗАПАСА ПОМЕХОУСТОЙЧИВОСТИ

Рассчитана величина статического запаса помехоустойчивости (SNM) и соответствующий ей заряд [2, 6]. Для определения величины статического запаса помехоустойчивости использовалась электрическая схема, представленная на рис. 7.

Далее проведен анализ для определения статической передаточной характеристики инвертора ячейки памяти, представленной на рис. 8.

Из полученной статической передаточной характеристики инвертора ячейки памяти определен статический запас помехоустойчивости. Он определен следующим образом: в графики переключения ячейки памяти вписаны квадраты наибольшей диагонали, как это показано на рис. 8. Горизонтальные границы квадрата, расположенного рядом с осью ординат, и вертикальные границы квадрата, расположенного рядом с осью абсцисс, соответствуют напряжениям переключения ячейки памяти: 1.3 и 1.9 В, в соответствии с графиком. Критический заряд определялся по методике, описанной в [6]: в системе схемотехнического моделирования собрана схема, представленная ранее на рис. 8; на вход схемы поданы напряжения переключения ячейки памяти (1.3 и 1.9 В, как было показано ранее); результат интегрирования токового отклика на стоке и дает значение критического заряда, оно оказалось равным 60 фКл (наименьшее значение – для наихудшего случая).

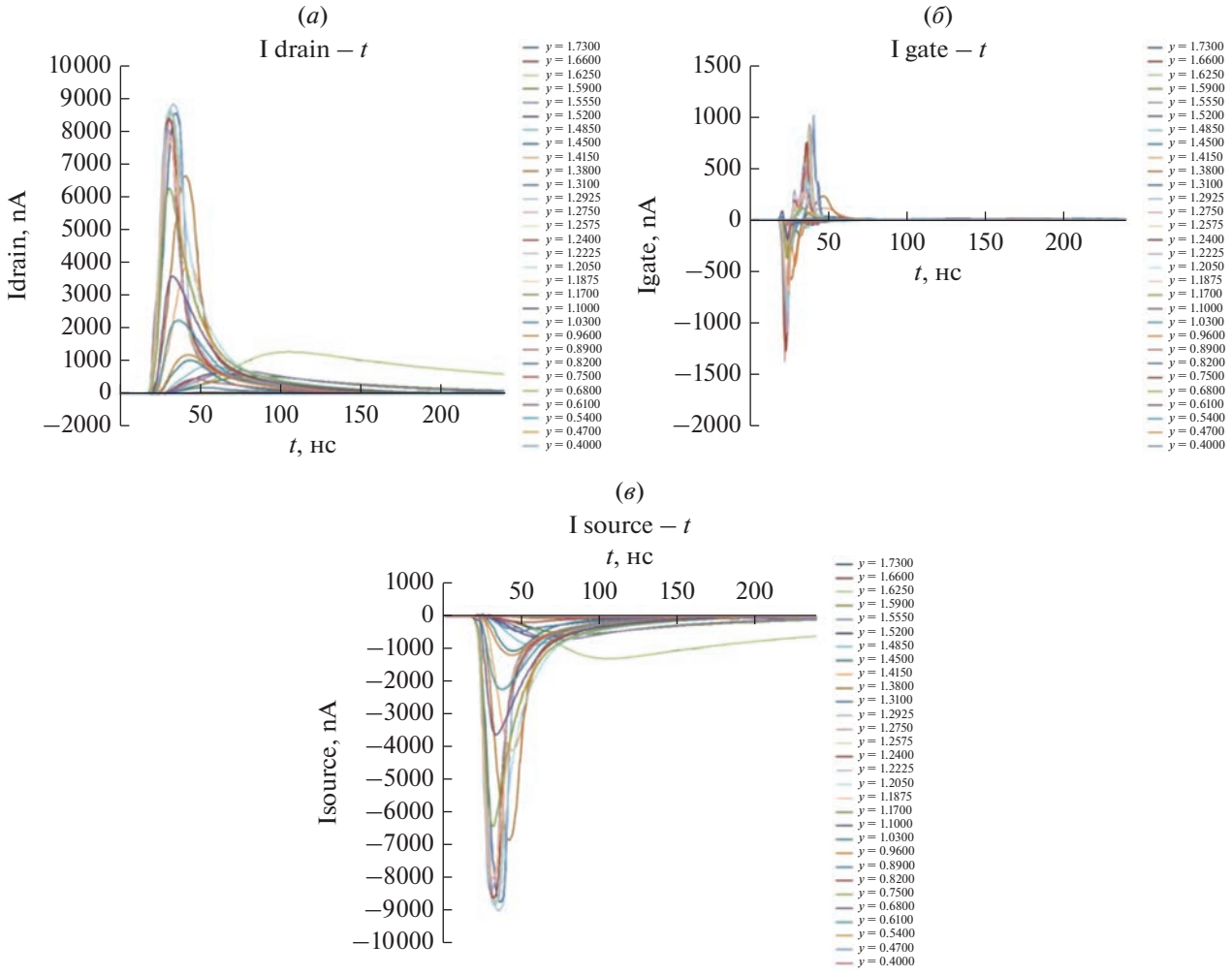


Рис. 5. Временные зависимости токовых откликов транзистора.

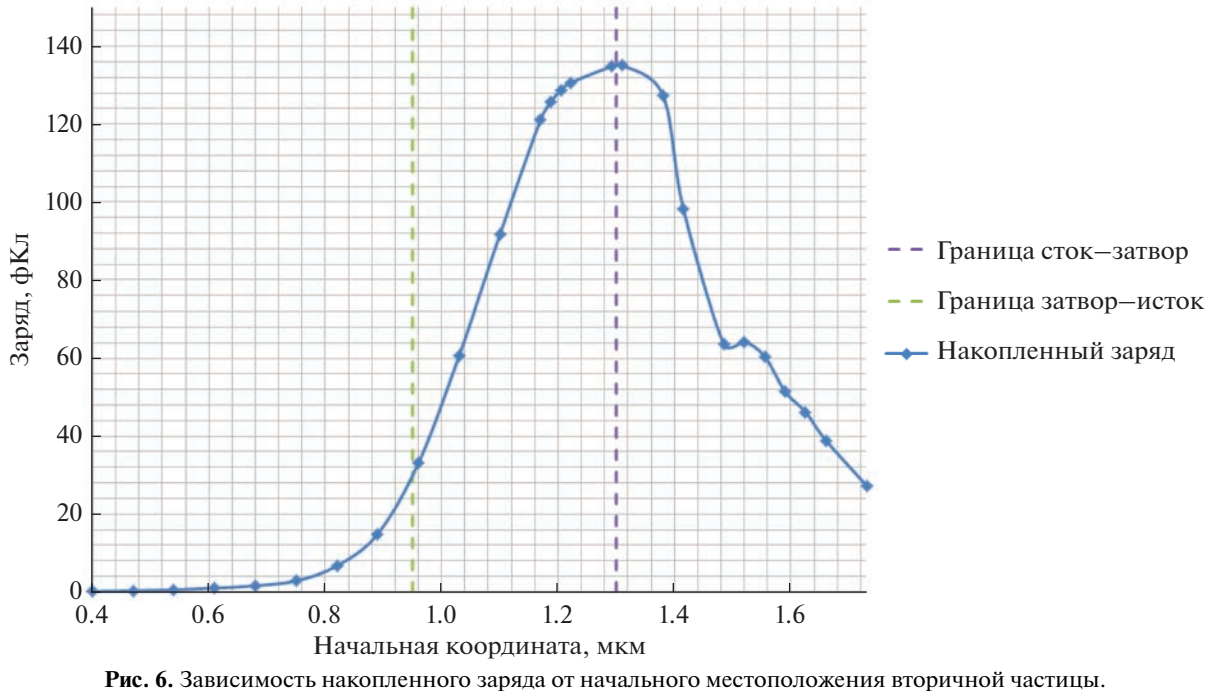


Рис. 6. Зависимость накопленного заряда от начального местоположения вторичной частицы.

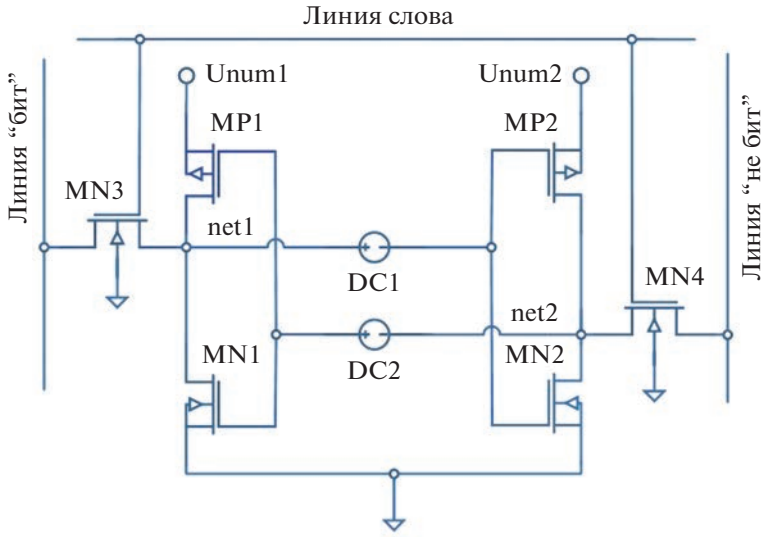


Рис. 7. Схема электрическая для определения статической передаточной характеристики инвертора ячейки памяти.

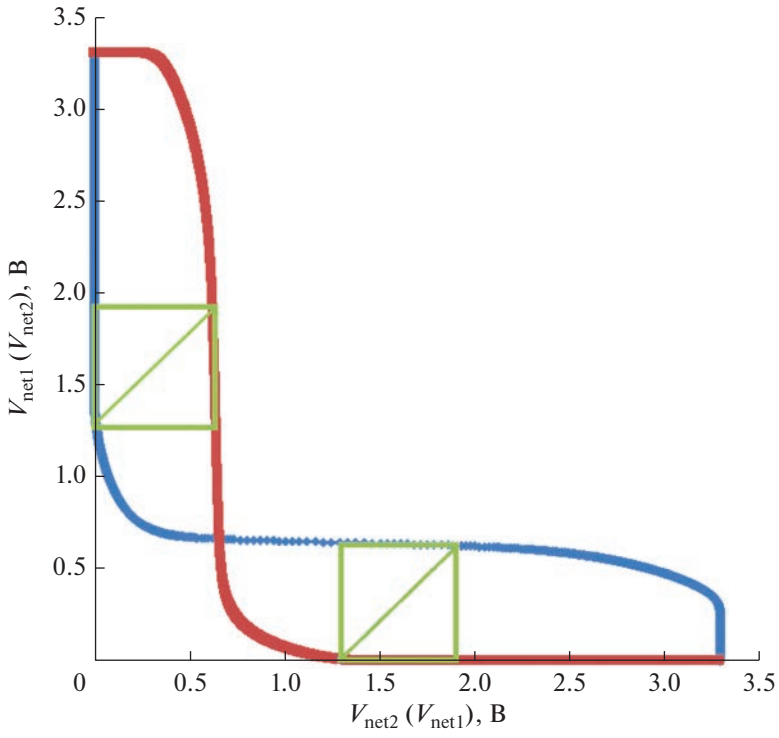


Рис. 8. Статическая передаточная характеристика инвертора ячейки памяти.

6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ТРАНЗИСТОРА

Для определения чувствительной области построены два графика – график зависимости накопленного заряда от начальной координаты вторичной частицы, и график заряда, определенный по результатам анализа статического запаса помехоустойчивости, рис. 9.

Те величины накопленного заряда, которые больше величины запаса статической помехоустойчивости, соответствуют переключению ячейки памяти, а, следовательно, сбою в режиме хранения информации. Те же величины накопленного заряда, которые меньше величины заряда статического запаса помехоустойчивости, соответствуют бессбойной работе ячейки памяти, а, следовательно, и корректному режиму хранения информации.

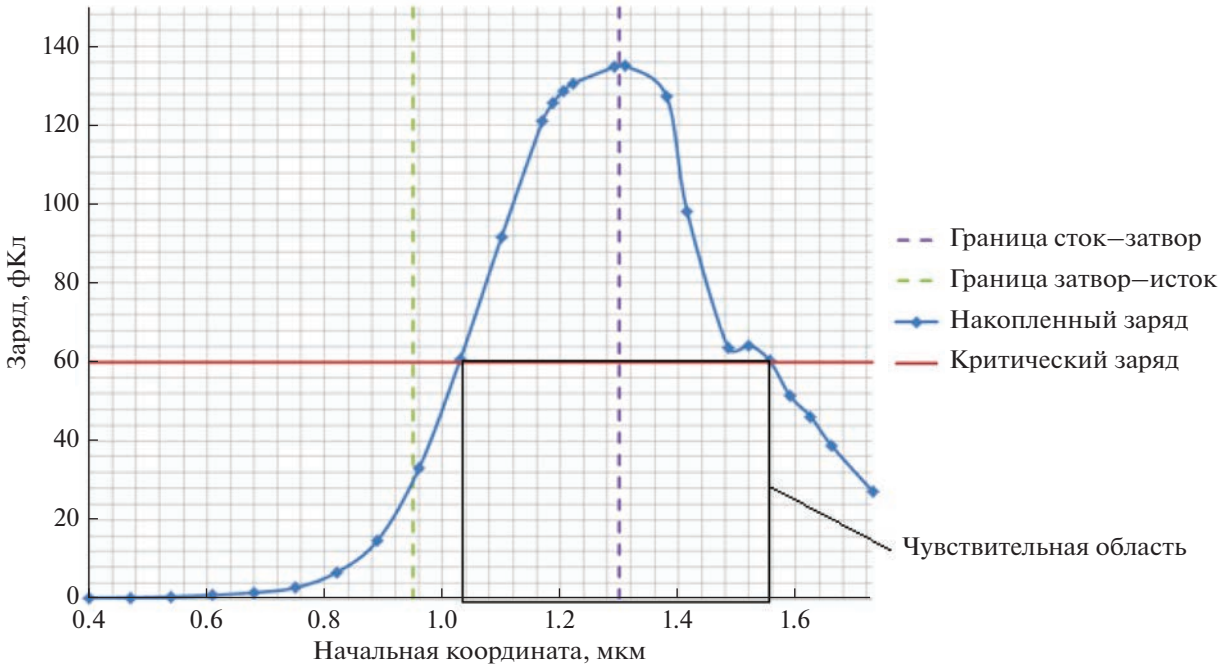


Рис. 9. Зависимости накопленного заряда от начальной координаты вторичной частицы и заряда, определенного по результатам анализа статического запаса помехоустойчивости.

На основании графика на рис. 9 можно сделать вывод, в какие области попадание вторичных заряженных частиц будет приводить к сбою ячейки, следовательно, эти области и можно назвать чувствительными. Для исследуемого транзистора чувствительная область расположена частично под затвором, а частично – в области стока. Остальные же вторичные частицы, не попавшие в чувствительную область транзисторов, к сбоям приводить не будут, и их рассмотрение для анализа сбоев нецелесообразно.

Необходимо отметить, что при пролете вторичной частицы под произвольным углом к осям y и z (в плоскости yz) значение накопленного заряда не будет превосходить значение заряда, полученного на графике (рис. 9). Это связано с тем, что при пролете частицы не параллельно оси z частица пролетает меньшую часть чувствительной области (в то время как пролет вдоль оси z в наихудшем случае затрагивает чувствительную область по всей ширине канала транзистора).

В соответствии с приведенным на рис. 9 графиком, можно оценить, что чувствительная область по протяженности (координаты от 1.05 до 1.5 мкм) составляет лишь 35% от всей протяженности транзистора. Это позволяет предполагать, считая попадание в любую часть транзистора частицы равновероятным, что полученные результаты позволяют уменьшить на 35% количество рассматриваемых частиц для приборно-технологического моделирования ячейки памяти, что должно сократить суммарное время этого моделирования на 65%, считая одинаковым время моделирования каждого случая воздействия одиночной заряженной частицы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, вышеописанную методику можно использовать для определения чувствительных областей в теле транзистора. Моделирование показало, что чувствительная область расположена под затвором и стоком транзистора.

Применяемая методика позволяет оценить возможность возникновения сбоя в ячейке памяти, не применяя приборно-технологическое моделирование, на основе предварительного отбора входных данных о треках частиц по критерию их попадания в чувствительную область транзистора.

Определена эффективность применения предложенной методики. Показано, что ее применение позволит сэкономить время расчета приблизительно на 65%.

Авторы данной работы считают новой методику определения чувствительной области воздействия частиц для фильтрации большого количества событий, полученных методом Монте-Карло, и последующего моделирования ячейки памяти с использованием трёхмерных приборно-технологических моделей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Глушко А.А., Чистяков М.Г., Кудинов И.В., Морозов С.А., Яшин Г.А., Амирханов А.В., Макарчук В.В., Зинченко Л.А.* Методика сопряжения Монте-Карло моделирования радиационного транспорта и приборно-технологического моделирования для исследования одиночных сбоев / В сборнике докладов Международного форума “Микроэлектроника 2018” 4-й научной конференции “Электронная компонентная база и электронные модули”, Республика Крым, г. Алушта, 1–6 октября 2018 г., М., Изд-во “Техносфера”. С. 292–293.
2. *Чистяков М.Г.* Исследование и оптимизация по критерию сбоеустойчивости ячейки памяти для технологии КНИ КМОП 0.25 мкм при облучении быстрыми нейтронами В сборнике докладов Международного форума “Микроэлектроника 2017” 3-й научной конференции “Электронная компонентная база и электронные модули”, Республика Крым, г. Алушта, 2–7 октября 2017 г., М., Изд-во “Техносфера”. С. 351–358.
3. *Gordon M.S., Goldhagen P., Rodbell K.P., Zabel T.H., Tang H.H.K., Clem J.M., Bailey P.* Measurement of the flux and energy spectrum of cosmic-ray induced neutrons on the ground / IEEE Transactions on Nuclear Science. 2004. V. 51. Issue 6.
4. *Batista A.J.N., Leong C., Santos B., Fernandes A., Ramos A.R., Santos J.P., Marques J.G., Teixeira J.P., Gonçalves B.* Test results of an ITER relevant FPGA when irradiated with neutrons / 4th International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation Measurement Methods and their Applications (ANIMMA), Lisbon, Portugal, 20–24 April 2015, IEEE.
5. *Dodd P.E., Sexton F.W.* Critical Charge Concepts for CMOS SRAMs / IEEE Transactions on Nuclear Science. 1995. V. 42. № 6.
6. *Seevinck E., List F.J., Lohstroh J.* Static-Noise Margin Analysis of MOS SRAM Cells / IEEE J. Solid-State Circuits. 1987. V. Sc-22. № 5.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 290–297

НАДЕЖНОСТЬ

ОДИНОЧНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПОВРЕЖДЕНИЯ В СБИС

© 2023 г. А. И. Чумаков*

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" – АО "ЭНПО СПЭЛС", Москва, Россия

*****E-mail: aichum@spels.ru*

Поступила в редакцию 13.02.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 20.04.2023 г.

Представлены результаты анализа проявления одиночных структурных повреждений в элементах СБИС при воздействии нейтронного излучения. Приведены оценки для определения энерговыделения при одном акте взаимодействия нейтронов с атомами кремния в чувствительном микрообъеме элемента СБИС. Определены условия влияния отдельных разупорядоченных областей, кластеров радиационных дефектов, на работоспособность СБИС. Показаны возможности проявления нестационарного отжига даже при стационарном воздействии и аддитивного влияния увеличения обратных токов нескольких элементов СБИС на условия возникновения отказов всей микросхемы.

Ключевые слова: одиночные радиационные эффекты, тяжелые заряженные частицы, СБИС, ускорители ионов

DOI: 10.31857/S0544126923700370, **EDN:** SLCKEZ

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная тенденция развития изделий микроэлектроники определяется непрерывным уменьшением активных объемов элементов СБИС и связанных с этим снижением напряжений питания и зарядов переключения. Подобная тенденция приводит к тому, что оценка радиационной стойкости СБИС с использованием традиционных подходов, основанных на усредненных величинах поглощенной энергии в чувствительных объемах, во многих случаях оказывается неприменима из-за статической природы взаимодействия излучения с веществом. Ярким примером подобного поведения являются одиночные радиационные эффекты (ОРЭ), приводящие к сбоям и отказам СБИС, за счет ионизационных потерь отдельных ядерных частиц [1, 2].

Однако, помимо объемной ионизации, имеют место радиационные эффекты, обусловленные структурными повреждениями и накоплением заряда в окислах. Их отличительной особенностью является формирование радиационного эффекта за счет накопления поглощенной энергии в чувствительной области отдельного элемента. Поэтому помимо традиционных ОРЭ, в которых рассматривается только один акт энерговыделения в чувствительном объеме, для этих случаев возможно проявление эффектов при наличии нескольких событий в течение промежутка времени [3, 4]. В этом случае количество взаимодействий ядерных частиц с веществом в активном объеме элемента, необходимых для проявления радиационного эффекта, превышает одно, но остается достаточно малым. Тем не менее, потенциально возможны отказы отдельных элементов СБИС и при одном акте энерговыделения в чувствительной области отдельного элемента СБИС. В настоящей работе представлены результаты оценок влияния одиночных структурных повреждений (ОСП) применительно к эффектам, обусловленных вводом радиационных дефектов в их чувствительные области. Это является первым шагом для дальнейшей оценки микродозиметрических эффектов в СБИС.

2. ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЕ НА СТРУКТУРНЫЕ ПОВРЕЖДЕНИЯ

Анализ ОСП базируются на оценке энерговыделения, затрачиваемой на дефектообразование (неионизационные потери, NIEL) от одного акта взаимодействия отдельной ядерной частицы в чувствительном объеме [5]. Ярким примером таких ОСП являются "спайки" в ПЗС матрицах [6], но подобные эффекты возможны и в других типах СБИС. Наиболее актуально эта проблема стоит при анализе сбоев и отказов при нейтронном воздействии, обладающих наиболее значимой долей неионизационных потерь, хотя подобные эффекты возможны и при воздействии протонов высоких энергий и тяжелых заряженных частиц.

В отличие от классических ОРЭ, вызванных объемной ионизацией, подход с использованием линейных потерь энергии (ЛПЭ) здесь не приме-

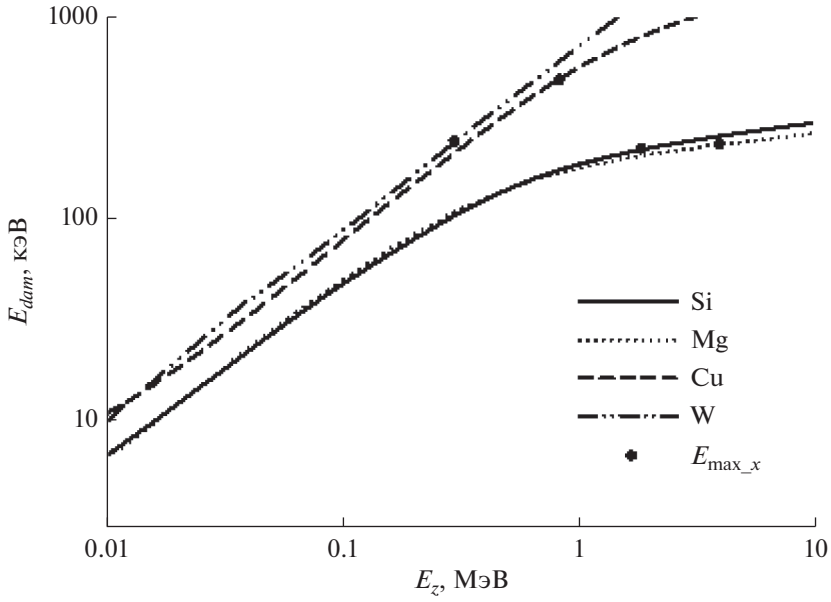


Рис. 1. Энергия, идущая на структурные повреждения в кремнии, в функции энергии вторичных частиц. Символы – максимальная энергия ионов для 14 МэВ нейтронов.

ним, так как в этом случае требуется оценка только энергии, затрачиваемой на дефектообразование. Второй отличительной особенностью, является размытый спектр этой энергии, так как локальные структурные повреждения вызываются вторичными ядерными частицами в результате рассеяния нейтрона или ядерной реакции с ним. В основном, структурные повреждения вызываются первично-выбитыми атомами (ПВА, обычно атомами кремния внутри чувствительного объема элемента СБИС). При этом основная доля энергии выделяется в конце пробега, образуя, как правило, разупорядоченные области (РО) с типичными размерами в районе 25–100 нм [7].

На рис. 1 представлены расчетные зависимости энергии, затрачиваемой на структурные повреждения в кремнии, от энергии ионов с использованием программы SRIM [8], которые потенциально могут попасть в чувствительную область элемента СБИС. Символами на графиках отложены максимальные энергии этих ионов при облучении 14 МэВ нейтронами.

На следующем рисунке (рис. 2) представлены аналогичные зависимости для пробегов в кремнии для этих же ионов. Нетрудно заметить, что для ионов меди и вольфрама даже при их максимальной энергии пробеги крайне малые, что делает маловероятным возникновение ОСП от материалов, входящих в состав металлизации СБИС. Они могут играть только значимую роль при облучении тяжелыми заряженными частицами высоких энергий. Ионы магния, образующиеся в результате ядерной реакции $Si^{28}(n,\alpha)Mg^{25}$, при облучении 14 МэВ нейтронами имеют максимальную энергию среди всех образующихся тяжелых вторичных частиц. При этом различия по энергетике на дефектообразование между ионами магния и кремния не очень существенное, что в ряде случаев позволяет оценки проводить только для ионов кремния, но с учетом суммарного сечения всех процессов взаимодействий нейтронов с кремнием и максимальной энергии, идущей на дефектообразование.

Средняя энергия E_{dam1_av} от одного акта взаимодействия, затрачиваемая на структурные повреждения, при воздействии нейтронов может быть определена из следующего соотношения:

$$E_{dam1_av} = K_{dn}\rho/\Sigma_n, \quad (1)$$

где K_{dn} – величина неионизационных потерь для нейтронов [5], ρ – плотность вещества, Σ_n – макроскопическое сечение взаимодействия нейтронов с веществом. Например для спектра деления ($K_d = 3.8 \times 10^{-11}$ рад см^2, $\Sigma_n = 0.16$ см$^{-1}$) получим $E_{dam1_av} = 34$ кэВ, а для 14 МэВ нейтронов ($K_d = 6.1 \times \times 10^{-11}$ рад см^2, $\Sigma_n = 0.09$ см$^{-1}$) – $E_{dam1_av} = 97$ кэВ. При этом значение средней полной энергии ПВА составляет величины порядка 80 кэВ в первом случае и 2 МэВ для 14 второго случая.

Очевидно, что при оценке чувствительности СБИС к ОСП пользоваться только средними величинами нельзя. Необходим полный спектр энерговыделения на структурные повреждения, из которого важна только та часть, которая превышает некоторое пороговое значение E_{do}.

Плотность вероятности выделения энергии на структурные повреждения при однократном вза-

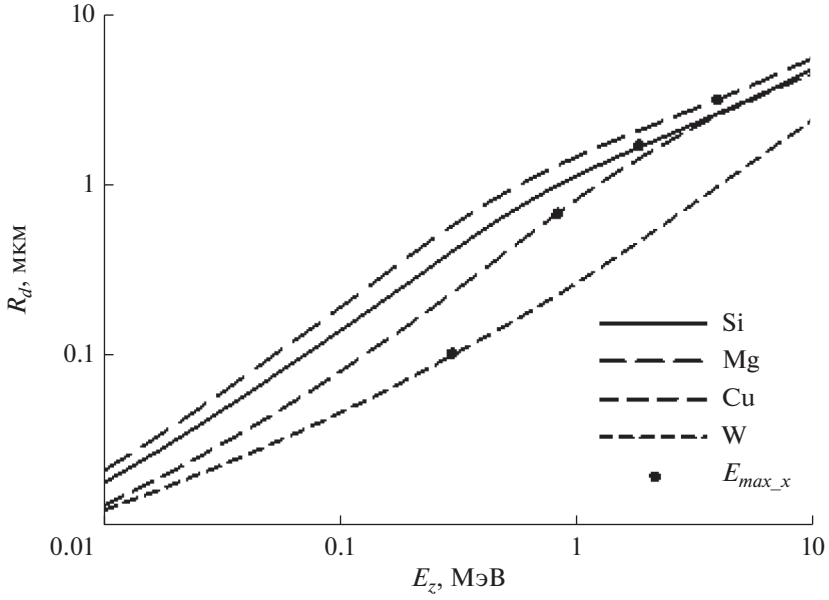


Рис. 2. Пробеги ионов в кремнии в функции его кинетической энергии. Символы – максимальные пробеги ионов для 14 МэВ нейтронов.

имодействии нейтрона с веществом dN/dE_{dam} может быть оценена из следующего соотношения:

$$dN/dE_{dam} = dN/dE_z\, dE_z/dE_{dam}, \qquad (2)$$

где dN/dE_z – энергетический спектр тяжелых вторичных частиц, продуктов рассеяния нейтронов на атомах кремния; dE_z/dE_{dam} – производная для зависимости полной энергии вторичной частицы E_z от энергии E_{dam}, затрачиваемой на структурные повреждения. Последняя зависимость может быть оценена из графиков на рис. 1 или через функцию Линхарда [2]:

$$E_{dam} = E_a/[1 + k_l g(\varepsilon_a)], \qquad (3)$$

где $k_l = 0.1334Z^{2/3}A^{-0.5}$; $g(\varepsilon_a) = \varepsilon_a + 0.4e_a^{3/4} + 3.4e_a^{1/6}$; E_z – энергия ПВА; $\varepsilon_a = E_z/E_l$; E_l – энергия Линдхарда ($E_l = 41$ кэВ для Si); Z, A – заряд и атомный вес иона.

Сложнее дело обстоит с оценкой dN/dE_z. В первом приближении можно считать, что при упругом рассеянии отсутствует угловая анизотропия, а для неупругого рассеяния имеет место изотропное распределение вторичных частиц в системе центра масс.

На рис. 3 представлены приближенные зависимости dN/dE_{dam} для трех значений энергий нейтронов: 1, 2.5 и 14 МэВ при сделанных выше предположениях. При воздействии 1 МэВ нейтронов имеет место только упругие рассеяния нейтронов. При энергиях 2.5 МэВ дополнительный включается механизм неупругого рассеяния. Для 14 МэВ нейтронов необходимо также учитывать образование вторичных частиц – продуктов ядерных реакций.

При указанных предположениях получаем консервативную оценку спектра dN/dE_{dam}. Например, из этих зависимостей значение средней энергии для 14 МэВ нейтронов будет почти на 1/3 больше, чем оценки через соотношение (1). Однако с учетом неопределенностей и погрешностей оценки сечений взаимодействия нейтронов с веществом, можно ориентироваться на полученные консервативные зависимости. Более точные функции могут быть получены с помощью программного обеспечения типа GEANT4 [9], но эти результаты достаточно тяжело распространить на другие элементы СБИС, так как они привязаны к конкретной структуре чувствительного объема.

3. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЭФФЕКТЫ

Хотя традиционно считается, что структурные повреждения являются стабильными во времени и слабо отжигаются, тем не менее, на начальном этапе имеет место трансформация образуемых первичных радиационных дефектов (вакансий и междоузлий) в стабильные радиационные эффекты. Эти процессы обычно характеризуют коэффициентом быстрого отжига AF, который изменяется во времени от нескольких единиц до своего стационарного значения $AF = 1$ [10]. Продолжительность этих процессов и максимальное значение AF зависят от многих факторов: уровня инжекции, температуры, типа полупроводниковой структуры и т.п. Типовые значения AF лежат в пределах 2–4, но могут и достигать величины около 10, а дли-

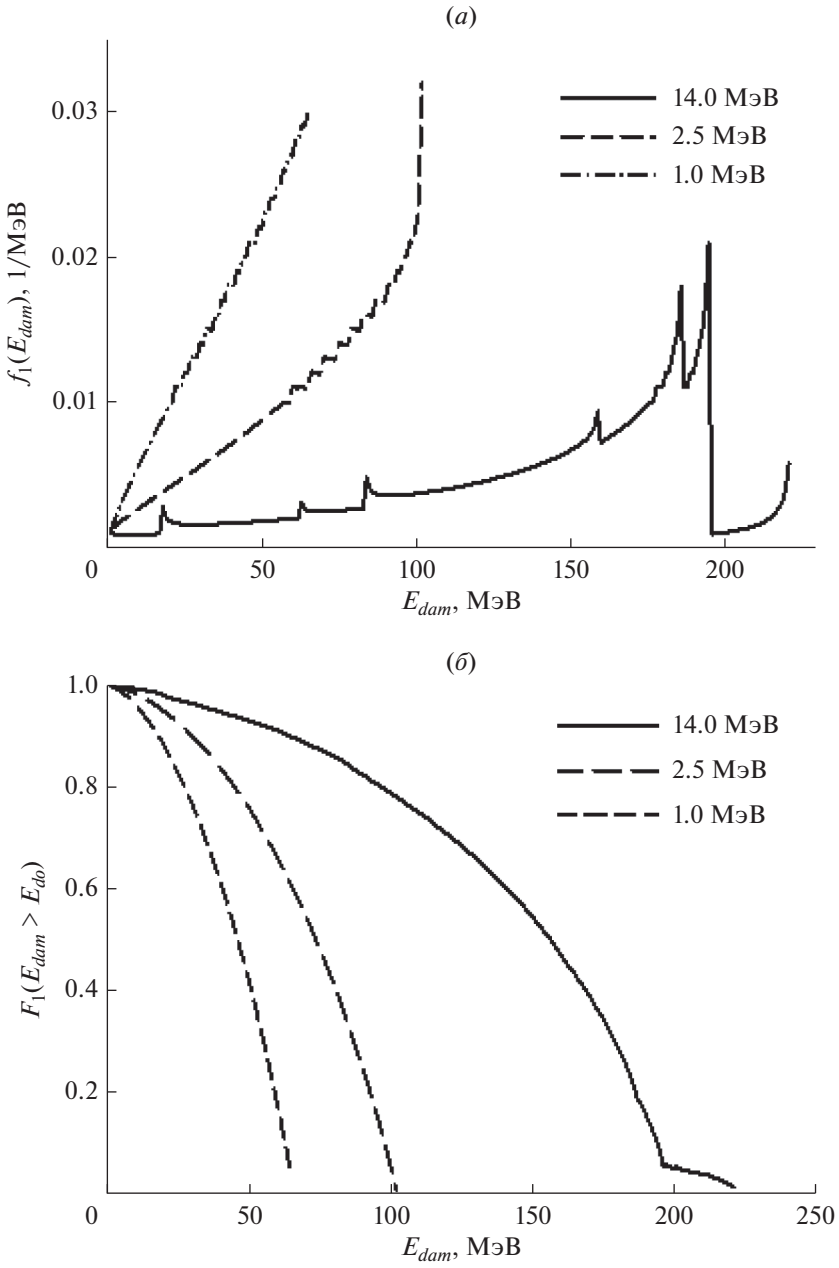


Рис. 3. Дифференциальные (*а*) и интегральные (*б*) распределения энергии на дефектообразование при разных значениях энергий нейтронов.

тельность этого процесса может исчисляться секундами.

Любое отдельное взаимодействие нейтрона с веществом может трактоваться как импульсное воздействие с очень короткой длительностью, фактически это дельта импульс во времени. Поэтому с формальной точки зрения учет процессов быстрого отжига приводит к увеличению на коэффициент *AF* энергии, затрачиваемой на структурные повреждения. Поэтому не исключен случай временной потери работоспособности элемента СБИС, когда после выделения энергии в его чувствительном объеме в течение определенного промежутка времени элемент вышел из режима нормального функционирования [11].

Однако важно отметить, что наряду с неионизационными потерями одновременно имеет место также генерация избыточного заряда. Генерируемый при этом избыточный заряд имеет достаточно высокое значение. Например, при выделении энергии ПВА в области пространственного заряда *p–n* перехода имеет место увеличение обратного тока

p–n перехода, как за счет собственно ионизационного тока, так и возрастания скорости рекомбинации при вводе радиационных дефектов. Как показывают оценки в начальные моменты времени ионизационный ток доминирует, и только после завершения процессов собирания заряда начинает сказываться влияние на обратный ток радиационных дефектов.

Типовое время завершения диффузионных процессов собирания заряда t_{df} можно оценить из следующего соотношения:

$$t_{df} \approx (10l_c)^2/D_n \sim 100A_s/D_n, \quad (4)$$

где D_n – коэффициент диффузии неосновных носителей заряда, l_c – эффективная длина собирания носителей заряда [12, 13], A_s – площадь чувствительной области. Например, при $A_s = 0.1$ мкм^2 ионизационные процессы завершаться за времена порядка нс. Однако этот процесс может затянут во времени из-за возможного влияния внутренних и внешних инерционностей СБИС [14]. В дальнейшем будут играть основную роль нестационарные процессы дефектообразования.

4. ОЦЕНКА УРОВНЯ СТОЙКОСТИ ЭЛЕМЕНТА СБИС

При вводе радиационных дефектов уменьшаются время жизни неосновных носителей заряда, концентрация и подвижность основных носителей заряда. Роль двух последних факторов в СБИС не очень велика, в силу исходных малых размеров активных областей и относительно высоких уровней легирования для активных областей (на уровне 10^{16} см$^{-3}$ и выше), поэтому остановимся только на анализе деградации характеристик элементов СБИС за счет изменения рекомбинационных свойств в локальной области элемента.

Полученные выше соотношения позволяют провести оценки уровня стойкости отдельного элемента при наличии ОСП через количественную меру повреждения η_d, которая характеризует вероятность возникновения эффекта при одном акте взаимодействии нейтрона в чувствительном объеме элемента СБИС:

$$\eta_d = \int_0^{E_{dam_mx}} \psi_d(E) f_1(E) dE, \quad (5)$$

где $\psi_d(E)$ – функция чувствительности отдельного элемента СБИС. В случае, если необходимо учесть возможность временной потери работоспособности аргумент функции $f_1(E)$ нужно расширить/сдвинуть в область больших энергий, умножив на AF.

В первом приближении $\psi_d(E)$ можно представить в виде ступенчатой функции (все элементы СБИС имеют одинаковый уровень стойкости). В этом случае получаем простое соотношение

$$\eta_d = F_1(E_{dam} > E_{do}), \quad (6)$$

где E_{do} – пороговая энергия, необходимая для отказа.

Величина E_{do} напрямую зависит от величины чувствительного объема элемента V_s и уровня стойкости Φ_n, определяемого через усредненные значения:

$$E_{do} = \Phi_n V_s K_d \rho = \Phi_n V_s E_{dam1_av} \Sigma_n \quad (7)$$

Таким образом, ОСП могут иметь место в СБИС при $E_{do} \sim 200$ кэВ при облучении 14 МэВ нейтронами, а при воздействии 2.5 нейтронов при E_{do} менее 100 кэВ. Данные результаты позволяют оценить проектные нормы, при которых будут иметь место ОСП с учетом ограничений на уровень стойкости и величину чувствительного объема. В качестве типового уровня стойкости элемента СБИС возьмем величину равную $\Phi_n = 1 \times 10^{15}$ нейтрон/см^2 при облучении нейтронами со спектром деления.

Связь величины чувствительного объема V_s и проектных норм λ можно представить в следующем виде [15]:

$$V_s \cong 3.5\lambda 2\lambda 2.8\lambda \le E_{dam1_mx}/(E_{dam1_av}\Sigma_n\Phi_n), \quad (8)$$

где E_{dam1_mx} – максимальная энергия на дефектообразование при одном акте взаимодействия.

При сделанных предположениях получим, что ОСП будут иметь место в СБИС с проектными нормами менее 0.1 мкм для 14 МэВ нейтронов и 0.08 мкм для 2.5 МэВ нейтронов. Это ограничение определяется флюенсом Φ_n, необходимым для отказа отдельного элемента по критериальному параметру. Если же принять во внимание возможность нестационарных процессов, то ОСП

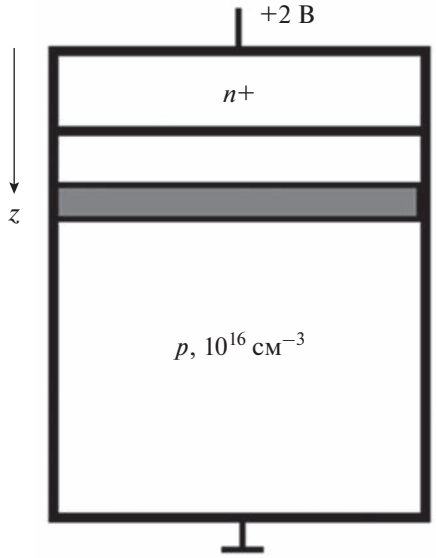


Рис. 4. Структура для оценки влияния РО на изменения обратных токов.

могут иметь место при проектных нормах в два раза больше.

Проведем оценку возможности ОСП в КМОП СБИС. Предположим, что основными причинами отказов КМОП СБИС за счет структурных повреждений является существенное увеличение токов утечек [2, 14]. Увеличение токов утечек происходит в первую очередь из-за роста обратных токов p–n переходов при вводе в него и в соседние с ним области радиационных дефектов.

Оценка влияния создаваемых радиационных дефектов на величину обратного тока проводилось в рамках двумерного численного моделирования простейшей диодной структуры, представленной на рис. 4. Узкий слой толщиной 0.1 мкм и площадью 0.35 мкм^2 моделировал влияние РО за счет резкого уменьшения в нем времени жизни.

Результаты проведенного численного моделирования показали (рис. 5), что заметные изменения в обратных токах p–n перехода будут иметь место при расположении РО только внутри обедненной области p–n перехода. При этом увеличение обратного тока может быть на более, чем четыре порядка выше по сравнению с исходной величиной.

Эти результаты носят качественный характер, так как на самом деле все разупорядоченная область состоит из субкластеров с типовыми размерами в районе нескольких нм. При этом размеры самой РО зависят от энергии ПВА и на порядок и более превышают размеры субкластеров [7]. Например, при энергии ПВА в районе 50 кэВ сама РО имеет размеры порядка 50 нм. В качестве первого приближения можно принять, что энергия образования субкластера E_{sb} ~ 5 кэВ, тогда их количество N_{sc} и радиус РО r_c можно оценить следующим образом:

$$N_{sc} = E_{dam1}/E_{sb}, \tag{9}$$

$$r_c \approx r_{co}\sqrt[3]{E_{dam1}/E_{sb}} \tag{10}$$

при $r_{co} \cong 15$ нм. Таким образом, при максимальной энергии E_{dam1_mx} потенциально возможно образование до 40 субкластеров, а радиус РО будет порядка 50 нм. Следовательно, в наихудшем варианте одна РО может перекрывать чувствительный объем элемента СБИС с линейными размерами менее 100 нм.

В ряде случаев даже полное перекрытие чувствительной области одной РО не всегда может привести к отказу элемента СБИС. В этом случае надо ориентироваться на субкластеры, которые имеют существенно более высокую концентрацию РД. Перекрытие одним субкластером будет иметь место только при линейных размерах элементов СБИС на уровне нескольких нанометров.

Следует отметить, что в ряде СБИС резкое увеличение обратного тока стокового p-n перехода одного МОП транзистора не всегда может привести к отказу микросхемы. Однако увеличение обратных токов нескольких транзисторов приводит к увеличению статического тока потребления и может вызвать отказ всей СБИС. При этом достижение этого критериального значения будет иметь место при более низких уровнях флюенсов нейтронов, чем это имело бы место при использовании усредненных дозиметрических величин. Например, из рис. 5 видно, что обратный ток может

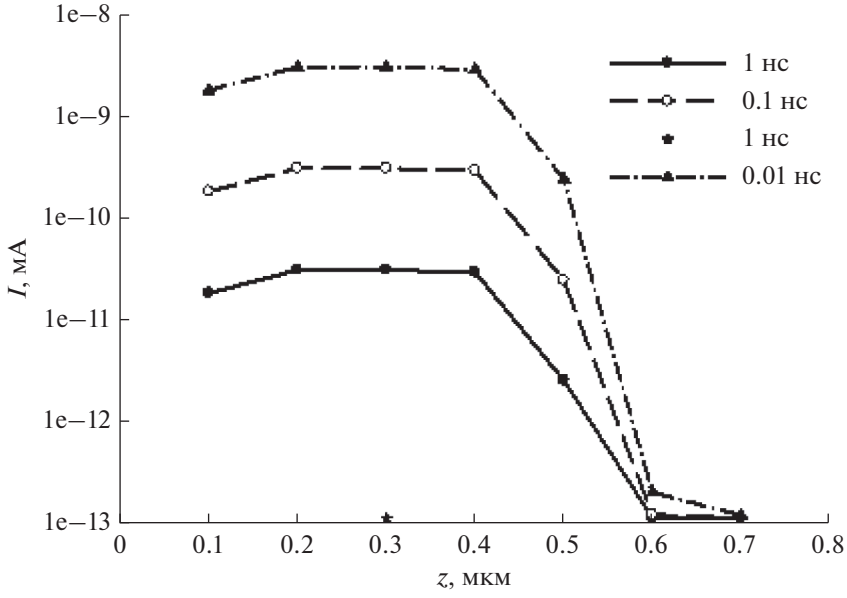


Рис. 5. Изменение обратного тока *p–n* перехода в зависимости от расположения РО от поверхности кристалла и разных временах жизни в ней.

увеличиваться в отдельном элементе на 3–4 порядка по сравнению с исходным значением. Поэтому даже если, критериальная величина суммарного статического тока потребления превышает исходное значение на порядок, то в среднем это может привести к снижению уровня стойкости к флюенсу нейтронов на 1–3 порядка. Однако эти оценки применимы только к “чисто” нейтронному воздействию. В реальных условиях вместе с ним действует сопутствующее гамма-излучение, которое вызывает более сильное возрастание утечек за счет образования паразитных каналов [2, 14].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты представленной работы позволяют выделить следующие основные выводы:

– максимальное энерговыделение на структурные повреждения в чувствительном микрообъеме элемента СБИС может отличаться в 2–5 раз от своего среднего значения при нейтронном облучении со спектром деления и синтеза;

– потенциально за счет процессов нестационарного отжига возможна временная потеря работоспособности СБИС даже при стационарном воздействии. Однако в области относительно малых времен будут доминировать ионизационные одиночные радиационные эффекты, которые маскируют структурные повреждения;

– одиночные структурные повреждения в элементах КМОП СБИС могут проявляться уже при проектных нормах менее 100 нм, однако они не всегда могут приводить к потере функционирования всей СБИС;

– отказ СБИС возможен за счет деградации нескольких элементов СБИС при наличии одиночных радиационных эффектов, при этом уровни стойкости будут на 1–3 порядка ниже, чем оцениваемые через усредненные дозовые характеристики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Petersen E.* Single Event Effects in Aerospace. Wiley-IEEE Press. 2011. 520 p.
2. *Чумаков А.И.* Действие космической радиации на ИС. М.: Радио и Связь. 2004. 320 с.
3. *Агаханян Т.М., Аствацатурьян Е.Р., Скоробогатов П.К., Чумаков А.И.* Физические ограничения на стойкость биполярных полупроводниковых структур в ИМС повышенной степени интеграции к дестабилизирующим воздействиям // Микроэлектроника. 1984. Т. 13. № 5. С. 392–400.
4. *Агаханян Т.М., Аствацатурьян Е.Р., Чумаков А.И.* Особенности использования БИС и сверхБИС в аппаратуре ядерного физического эксперимента // В сб.: Электронные приборы и схемы для экспериментальной физики / Под ред. Т.М. Агаханяна. М.: Энергоатомиздат. 1983. С. 3–9.
5. https://www.sr-niel.org/index.php/sr-niel-long-write-up/sr-niel-results.
6. Ionizing Radiation Effects in Electronics: From Memories to Imagers / Ed. by M. Bagatin and S. Gerardin. Tyalor&Francis Group. 2016. 390 p.

7. *Srour J.R., Palko J.W.* Displacement Damage Effects in Irradiated Semiconductor Devices // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2013. V. 60. № 3. P. 1740–1766.
8. http://www.srim.org.
9. https://geant4.web.cern.ch/support.
10. *McMurray L.R., Messenger G.C.* Rapid annealing factor for bipolar silicon devices irradiated by fast neutron pulse // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1981. V. 28. № 6. P. 4392–4396.
11. *Agahanyan T.M., Astvacaturyan E.R., Chumakov A.I.* On the possibility of controlling non-stationary annealing characteristics in a stationary environment // International J. Electronics. 1986. V. 61. № 1. P. 73–78.
12. *Чумаков А.И.* Оценка чувствительности интегральных схем к одиночным радиационным эффектам для точечной области собирания заряда // Микроэлектроника. 2015. Т. 44. № 1. С. 34–40.
13. *Chumakov A.I.* Modified Charge Collection Model by Point Node for SEE Sensitivity Estimation // Proceedings of the European Conference on Radiation and its Effects on Components and Systems, RADECS. 2015. December. P. 511–515.
14. Радиационная стойкость изделий ЭКБ: Научное издание // Под ред. А.И. Чумакова. М.: НИЯУ МИФИ. 2015. 512 с.
15. *Xiao-Ming Jin*. Single event upset on static random access memory devices due to spallation, reactor, and monoenergetic neutrons // Chinese Phys. B 28. № 10. 2019. P. 104212-1–104212-10.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 298–306

ПЛАЗМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 537.525

КОНЦЕНТРАЦИЯ АТОМОВ ФТОРА И КИНЕТИКА РЕАКТИВНО-ИОННОГО ТРАВЛЕНИЯ КРЕМНИЯ В СМЕСЯХ $CF_4 + O_2$, $CHF_3 + O_2$ И $C_4F_8 + O_2$

© 2023 г. А. М. Ефремов[a, b], А. В. Бобылев[a], К.-Н. Kwon[c]

[a]*ФГБОУ ВО "Ивановский государственный химико-технологический университет", Шереметевский просп., 7, Иваново, 153000 Россия*

[b]*ЯрФ ФТИАН им. К.А. Валиева РАН, ул. Университетская, 21, Ярославль, Россия*

[c]*Korea University, Sejong, 339-700 South Korea*

*****E-mail: amefremov@mail.ru*

Поступила в редакцию 05.04.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Проведено сравнительное исследование электрофизических параметров плазмы, концентраций атомов фтора и кинетики реактивно-ионного травления кремния в смесях $CF_4 + O_2$, $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$ переменного (0–75% O_2) начального состава. Показано, что доминирующим механизмом травления всегда является ионно-стимулированная химическая реакция $Si + xF \rightarrow SiF_x$, скорость которой имеет максимум в области 20–50% O_2. По результатам диагностики плазмы установлено, что аналогичное поведение концентрации атомов фтора характерно только для смесей $CF_4 + O_2$ и $CHF_3 + O_2$, при этом в смеси $C_4F_8 + O_2$ имеет место немонотонное изменение вероятности взаимодействия. Предположено, что причиной последнего эффекта является конкуренция процессов снижения толщины фторуглеродной полимерной пленки и окисления поверхности кремния атомами кислорода.

Ключевые слова: фторуглеродные газы, плазма, атомы фтора, травление, полимеризация, кинетика, механизм

DOI: 10.31857/S0544126923700424, **EDN:** GAQIOI

1. ВВЕДЕНИЕ

Газы семейства фреонов ($C_xH_yF_z$) нашли повсеместное применение в технологии изделий микро- и нано-электроники микроэлектроники при проведении процессов реактивно-ионного травления (РИТ) кремния и его соединений в реакторах индуктивно-связанной плазмы [1–3]. Такие системы допускают независимое регулирование концентраций активных частиц и энергии ионной бомбардировки, что обеспечивает широкие возможности оптимизации скорости РИТ, анизотропии и селективности по отношению к выше- и нижележащим слоям [3, 4]. Известно также, что конечный результат РИТ в значительной степени зависит от полимеризационной способности плазмообразующего газа, которая определяется отношением z/x в исходной молекуле. Так, например, плазма CF_4 ($z/x = 4$) характеризуется низкой полимеризационной способностью, обеспечивающей высаживание фторуглеродной полимерной пленки малой толщины (менее 1–2 нм [4–6]) и/или островковой структуры. Лимитирующей стадией травления здесь является гетерогенное взаимодействие атомов фтора, при этом достигаются высокие скорости травления при минимальном остаточном загрязнении поверхности. В то же время, оборотной стороной медали являются близкий к изотропному профиль травления кремния и низкая селективность в системе SiO_2/Si [6, 7]. Напротив, плазма C_4F_8 ($z/x = 2$) представляет систему с высокой полимеризационной способностью [7, 8]. Наличие толстой сплошной полимерной пленки на контактирующей с плазмой поверхности обуславливает низкие скорости травления (из-за лимитирования потока атомов фтора), но обеспечивает высокую анизотропию процесса (из-за маскирования полимером боковых стенок формируемого рельефа [7, 8]) и селективность в системе SiO_2/Si (из-за меньшей толщины полимерной пленки на кислородсодержащей поверхности [6, 8]). Таким образом, выбор фторуглеродного газа для достижения целей конкретного процесса требует понимания сути физико-химических явлений, определяющих кинетику процессов травления и полимеризации.

Характерной особенностью современной технологии РИТ является использование бинарных

плазмообразующих смесей, комбинирующих фторуглеродный газ с кислородом. Известно, что последний всегда способствует подавлению полимеризации за счет окисления полимеробразующих радикалов CF_x ($x = 1, 2$) в соединения вида CF_xO ($x = 1, 2$), CO и CO_2 в объеме плазмы, а также окислительной деструкции (газификации) уже осажденной фторуглеродной полимерной пленки [3, 4]. Это существенно расширяет области применения фреонов с низкими z/x (например, C_4F_8 или CHF_3), при этом начальный состав смеси является дополнительным инструментом оптимизации выходных характеристик РИТ. В настоящее время, наиболее изученной в теоретическом плане является система $CF_4 + O_2$, для которой а) выявлены механизмы влияния кислорода на параметры электронной и ионной компонент плазмы; б) определены ключевые плазмохимические процессы, формирующие стационарный состав газовой фазы; и в) установлена прямая причинно-следственная связь между немонотонным (с максимумом) изменением скорости травления кремния и концентрацией атомов фтора в плазме при варьировании начального состава смеси [9–12]. На этом фоне аналогичные данные для C_4F_8 и CHF_3 крайне малочисленны, при этом имеющиеся работы касаются, в основном, смесей с аргоном или кислородом фиксированного состава [13–18]. Наибольшую ценность, на наш взгляд, здесь имеет работа [18], в которой для смеси $C_4F_8 + O_2$ изучено влияние содержания кислорода на состав плазмы, кинетику полимеризации и селективность травления в системе SiO_2/Si. В то же время, обсуждение результатов ограничивается лишь констатацией фактов и не обеспечивает понимания взаимосвязей между пара мерами газовой фазы и процессами на обрабатываемой поверхности. Кроме этого, данные различных авторов не согласуются по диапазонам исследованных условий, типам реакторов и способам возбуждения плазмы. Очевидно, что такая ситуация не обеспечивает возможностей адекватного сравнения эффекта кислорода на физико-химические свойства различных плазменных систем.

В нашей предшествующей работе [19] было проведено сравнительное исследование состава плазмы и кинетики РИТ кремния в смесях $CF_4 + Ar + O_2$, $CHF_3 + Ar + O_2$ и $C_4F_8 + Ar + O_2$ при варьировании соотношения Ar/O_2 и постоянном 50%-м содержании фторуглеродного компонента. Очевидно, что полученные результаты отражают лишь совокупный эффект плазмохимических процессов, протекающих в условиях недостатка кислорода. Кроме этого, анализ кинетики травления проводился с использованием расчетных концентраций атомов фтора, которые не были подтверждены экспериментом. С учетом вышесказанного, целью данной работы являлось сравнительное исследование бинарных смесей $CF_4 + O_2$, $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$, начальный состав которых заведомо перекрывает режимы как недостатка, так и избытка кислорода. Основное внимание было уделено вопросам а) диагностики плазмы для получения данных по концентрациям плотностям потоков активных частиц на обрабатываемую поверхность; и б) анализа кинетики и механизмов РИТ кремния в приближении эффективной вероятности взаимодействия. Ранее в наших работах [19–21] было показано, что характер изменения данного параметра при постоянной температуре обрабатываемой поверхности позволяет достаточно надежно идентифицировать сторонние (за исключением концентрации реагирующих частиц) факторы, влияющие на эффективность гетерогенной химической реакции.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Оборудование и условия эксперимента

Эксперименты проводились в реакторе планарного типа с цилиндрической ($r = 13$ см, $l = 16$ см) рабочей камерой из анодированного алюминия [20] при возбуждении индукционного ВЧ (13.56 МГц) разряда. Неизменными входными параметрами служили общий расход плазмообразующего газа ($q = 40$ станд. см^3/мин), его рабочее давление ($p = 6$ мтор), мощность смещения ($W_{dc} = 200$ Вт) и вкладываемая мощность ($W = 700$ Вт), что соответствовало удельной мощности ~0.7 Вт/см^3. В качестве единственного варьируемого параметра выступал начальный состав плазмообразующей смеси, задаваемый парциальными расходами ее компонентов. Соответственно, увеличение q_{O_2} до 30 станд. см^3/мин при пропорциональном снижении расхода фторуглеродного газа обеспечивало долю кислорода в смеси $y_{O_2} = q_{O_2}/q$ в диапазоне 0–75%.

Подвергаемые травлению образцы в виде фрагментов пластин Si(100) размером ~2 × 2 см размещались в центральной части нижнего электрода. Последний был оборудован встроенной системой водяного охлаждения, позволяющей стабилизовать его температуру, T_S, за счет автоматического регулирования потока хладагента. Поверхность образцов была частично маскирована фоторезистом с толщиной слоя ~1.5 мкм. Высоту ступеньки травления на границе маскированной и немаскированной областей Δh измеряли профилометром Alpha-step D-500 (KLA-Tencor, USA). Значение времени травления $\tau \sim 2$ мин выбиралось в пределах квазилинейного участка кинетической зависимости $\Delta h = f(\tau)$, отвечающего стационарному режиму процесса. В предварительных экспериментах было найдено также, что увеличение числа одновременно загружаемых образцов не при-

водит к снижению скорости травления $R = \Delta h/\tau$ и не сопровождается заметными возмущениями электрофизических параметров плазмы. Таким образом, исследуемый нами режим травления однозначно отражает кинетику гетерогенных процессов на обрабатываемой поверхности и характеризуется пренебрежимо малым влиянием продуктов травления на кинетику плазмохимических процессов, определяющих стационарные концентрации и активных частиц.

2.2. Диагностика плазмы

Для получения информации по влиянию начального состава смесей на параметры электронной и ионной компонент плазмы использовался двойной зонд Ленгмюра DLP2000 (Plasmart Inc., Korea). Обработка зондовых вольт-амперных характеристик (ВАХ) проводилась на основе известных положений зондовой теории для разрядов низкого давления [22]. Результатами обработки являлись данные по температуре электронов (T_e) и плотности ионного тока (J_+). Для минимизации искажений ВАХ из-за полимеробразования на зондах была задействована система импульсной очистки рабочей поверхности зондов ионной бомбардировкой. Кроме этого, перед каждым измерением зонды дополнительно обрабатывались в плазме 50% Ar + 50% O_2 в течение ~2 мин. Эффективность процедуры очистки подтверждалась отсутствием принципиальных различий зондовых ВАХ, измеряемых последовательно в течение 5 мин после зажигания плазмы.

Величину отрицательного смещения на нижнем электроде, $-U_{dc}$, измеряли высоковольтным зондом AMN-CTR (Youngsin Eng, Korea).

Стационарные концентрации атомов фтора в объеме плазмы, n_F, определяли с использованием оптической эмиссионной спектроскопия в варианте актинометрии. Для этих целей в плазмообразующую смесь вводили 2 станд. см^3/мин аргона, что соответствовало постоянному значению $y_{\mathrm{Ar}} = 4.8\%$. В экспериментах использовалась аналитическая пара F 703.8 нм/Ar 750.4 нм, которая характеризуется отсутствием ступенчатых механизмов заселения возбужденных состояний, а также низкими временами их жизни, что позволяет пренебречь процессами не излучательной релаксации [23]. Расчеты концентраций атомов фтора проводили по соотношению

$$n_F = y_{\mathrm{Ar}} N_0 C_{\mathrm{Ar}}^F \frac{I_F}{I_{\mathrm{Ar}}}, \qquad (1)$$

где I – интенсивности излучения, измеренные с помощью спектрометра AvaSpec-3648 (JinYoung Tech, Korea), а $N_0 = p/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{gas}}$ – общая концентрация частиц в реакторе при данной температуре газа, T_{gas}. В расчетах по ур. (1) использовалось постоянное значение $T_{\mathrm{gas}} = 600$ K, которое адекватно отражает реальную ситуацию в плазме CF_4 и O_2, возбуждаемой в реакторе подобной геометрии и при аналогичном уровне удельной мощности [24]. Актинометрический коэффициент C_{Ar}^F находили как отношение констант возбуждения и вероятностей соответствующих оптических переходов, которые хорошо известны по литературным данным [23]. В работе [23] было показано также, что концентрации атомов фтора, найденные по описанной выше процедуре, удовлетворительно согласуются с результатами масс-спектральных измерений.

2.3. Анализ кинетики травления

Анализ кинетики травления кремния базировался на имеющихся данных по механизмам реактивно-ионных процессов в плазме фторуглеродных газов [6–8, 25–27]. С учетом обобщений, сделанных в наших работах [13, 19, 20, 28], можно полагать следующее:

1) В условиях, когда энергия ионной бомбардировки $\varepsilon_i = e\left|-U_f - U_{dc}\right|$ (где U_f – плавающий потенциал [4]) превышает пороговую энергию распыления кремния (~30–40 эВ [4, 29]), наблюдаемая скорость травления может быть представлена суперпозицией физической (R_{phys}) и химической (R_{chem}) составляющих.

2) Скорость физического распыления кремния $R_{\mathrm{phys}} = Y_S\Gamma_+$, где $Y_S = f(\varepsilon_i)$ – коэффициент распыления (атом/ион) [29], и $\Gamma_+ \approx J_+/e$ – плотность потока ионов.

3) Скорость химического взаимодействия кремния с атомами фтора $R_{\mathrm{chem}} = \gamma_R\Gamma_F$, где γ_R – эффективная вероятность взаимодействия, и $\Gamma_F \approx 0.25 n_F\sqrt{8RT_{\mathrm{gas}}/\pi M_F}$ – плотность потока атомов фтора. В общем случае характер изменения γ_R при $T_S \approx$ const зависит от кинетики адсорбционно-десорбционнных процессов с участием активных частиц и продуктов взаимодействия. Так, например, симбатное изменение параметров γ_R и $\sqrt{\varepsilon_i}\Gamma_+$ обычно указывает на ионную активацию химической реакции через очистку и/или образование активных центров, способных адсорбировать атомы фтора. Напротив, снижение γ_R при увеличении интенсивности ионной бомбардировки может свидетельствовать об ионно-стимулированной десорбции самих активных частиц, которые, таким образом, “исключаются” из химической реакции. Кроме этого, в условиях полимеробразующей плазмы, существенное влияние на γ_R оказывает толщина фторуглеродной поли-

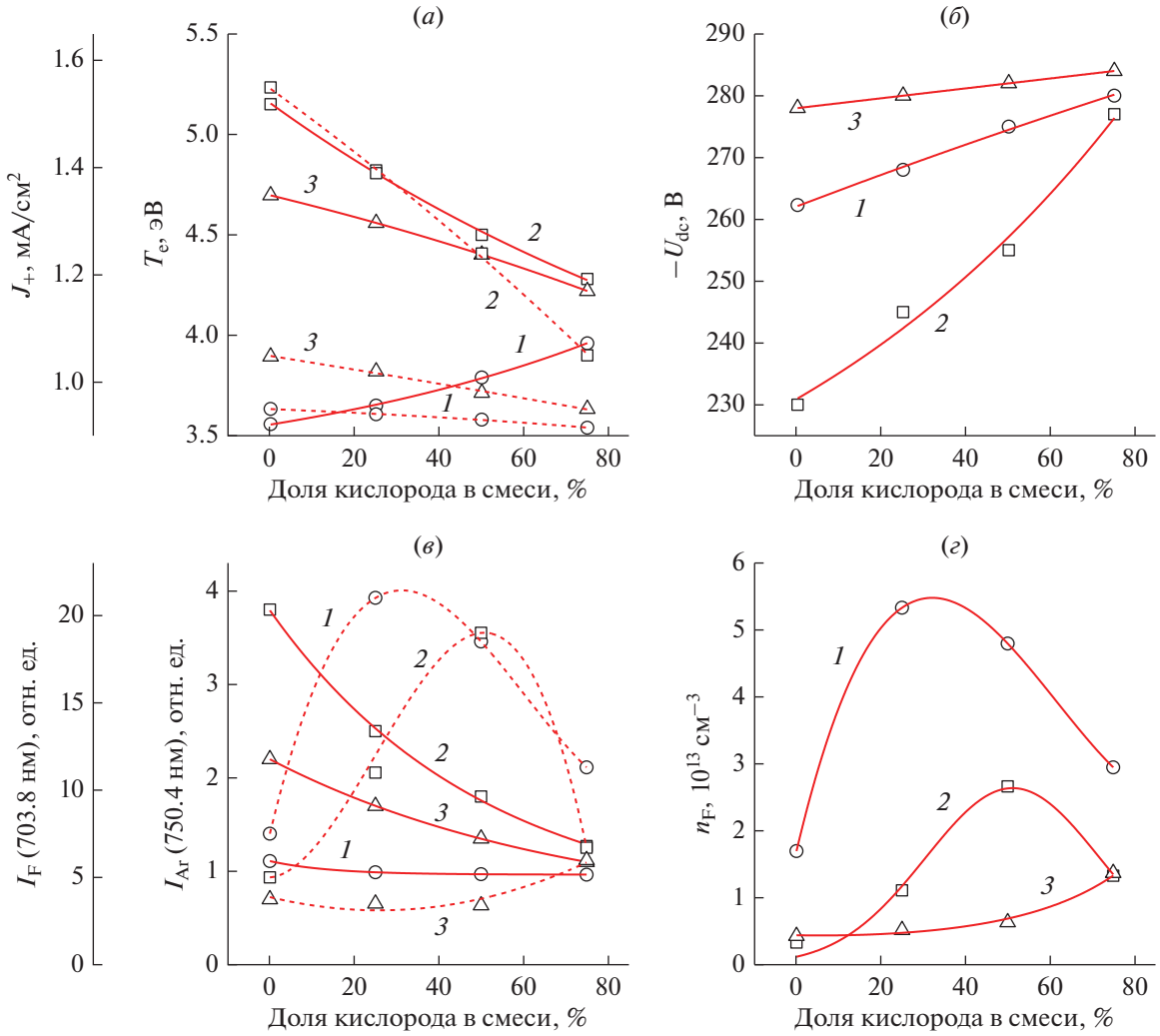


Рис. 1. Параметры плазмы, определяющие потоки активных частиц на подвергаемую травлению поверхность в смесях $CF_4 + O_2$ (*1*), $CHF_3 + O_2$ (*2*) и $C_4F_8 + O_2$ (*3*). На рис. *а*: температура электронов (сплошная линия + символы) и плотность ионного тока (пунктир + символы). На рис. *б*: отрицательное смещение на обрабатываемой поверхности. На рис. *в*: интенсивности излучения линий Ar 750.4 нм (сплошная линия + символы) и F 703.8 нм (пунктир + символы). На рис. *г*: концентрация атомов фтора.

мерной пленки, которая затрудняет доступ атомов фтора к обрабатываемой поверхности. В результате реальная величина Γ_F на границе пленка/поверхность может быть ниже значения, определяемого концентрацией этих частиц в газовой фазе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Известно, что интегральный эффект РИТ любого материала формируется как потоками активных частиц, приходящими из объема плазмы, так и кинетическими коэффициентами (выходами распыления, вероятностями химического взаимодействия), характеризующими гетерогенное взаимодействие этих частиц с атомами поверхности [2–4]. Поэтому для анализа кинетики травления с целью выявления доминирующих каналов гетерогенного взаимодействия и их элементарных механизмов необходимы данные по электрофизическим параметрам и составу плазмы.

Сравнительный анализ электрофизических параметров и состава плазмы CF_4, CHF_3 и C_4F_8 в отсутствии кислорода (в бинарных смесях с аргоном [13, 14, 20], либо в многокомпонентных системах, комбинирующих аргон и два фторуглеродных газа [20, 28]) являлся предметом детального рассмотрения в наших предшествующих работах. Поэтому ниже мы остановимся лишь на специфических эффектах, обусловленных физико-химическими процессами с участием кислорода. На рис. 1*а*, *б* представлены экспериментальные данные по влиянию доли кислорода на параметры электронной и ионной компонент плазмы. Эти результаты могут быть обобщены в виде следующих положений:

– Температура электронов (рис. 1*а*) демонстрирует незначительный рост в смеси $CF_4 + O_2$ (3.6–4.0 эВ при 0–75% O_2), но снижается в системах $CHF_3 + O_2$ (5.2–4.3 эВ при 0–75% O_2) и $C_4F_8 + O_2$ (4.7–4.2 эВ при 0–75% O_2). Последние два эффекта качественно подобны наблюдаемым ранее в смесях $CHF_3 + O_2 + Ar$ и $C_4F_8 + O_2 + Ar$ при варьировании соотношения Ar/O_2 [19] и, по-видимому, имеют аналогичное объяснение. Причина здесь заключается в том, что рост y_{O_2} приводит к смене доминирующих нейтральных частиц (HF в плазме CHF_3 и CF_2 в плазме C_4F_8 [13, 14, 28]) на более крупные молекулярные продукты плазмохимических реакций – CFO, CF_2O, CO и CO_2. Очевидно, такая ситуация способствует увеличению интегральных потерь энергии электронами в процессах вращательного, колебательного и низкопорогового электронного возбуждения частиц газа. Растущая зависимость $T_e = f\left(y_{O_2}\right)$ объяснима лишь в том случае, если доминирующими (или, по крайней мере, значительно более существенными) компонентами плазмы с ростом y_{O_2} становятся атомы фтора. Это неизбежно приведет к снижению потерь энергии электронов из-за "энергетической прозрачности" атомарных частиц до первого потенциала электронного возбуждения.

– Плотность ионного тока (рис. 1*а*) монотонно снижается с ростом доли кислорода в смеси, демонстрируя менее резкую зависимость для смеси $CF_4 + O_2$ (0.95–0.92 мА/см^2, что соответствует $n_+ \sim 4.4 \times 10^{10}$–$2.6 \times 10^{10}$ см$^{-3}$ при 0–75% O_2) и более резкую для $CHF_3 + O_2$ (1.55–1.05 мА/см^2, что соответствует $n_+ \sim 5.1 \times 10^{10}$–$2.8 \times 10^{10}$ см$^{-3}$ при 0–75% O_2). Аналогичным образом изменяется и плотность потока ионов на подвергаемую травлению поверхность ($\Gamma_+ = 5.9 \times 10^{15}$–$5.7 \times 10^{15}$ см$^{-2}$ с$^{-1}$ для $CF_4 + O_2$, 9.7×10^{15}–6.6×10^{15} см$^{-2}$ с$^{-1}$ для $CHF_3 + O_2$ и 6.6×10^{15}–5.5×10^{15} см$^{-2}$ с$^{-1}$ для $C_4F_8 + O_2$ при 0–75% O_2). По нашему мнению, универсальной причиной здесь является снижение суммарной частоты ионизации, которое имеет место либо из-за значительно более низкой константы скорости ионизации для доминирующих нейтральных частиц в условиях $y_{O_2} > 0$ (например, для атомов фтора по сравнению с CF_4 и CF_3 в плазме $CF_4 + O_2$) либо по причине снижения констант скоростей ионизации всех нейтральных компонентов из-за соответствующего изменения T_e (для систем $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$). Отметим также, что совокупный эффект от изменения температуры электронов и плотности плазмы в смесях $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$ приводит к снижению частот процессов под действием электронного удара.

– Отрицательное смещение на нижнем электроде (рис. 1*б*) (а, следовательно, и на подвергаемой травлению поверхности) в условиях W_{dc} = const всегда изменяется противоположно J_+. Причина этого заключается в том, что приходящие из объема плазмы ионы частично компенсируют избыточный отрицательный заряд, наведенный источником постоянной мощности. Соответственно, аналогичным образом изменяется и энергия ионов, бомбардирующих поверхность (ε_i = 285–303 эВ для $CF_4 + O_2$, 262–302 эВ для $CHF_3 + O_2$ и 307–309 эВ для $C_4F_8 + O_2$ при 0–75% O_2). В смесях $CF_4 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$ эффект изменения величины $\sqrt{\varepsilon_i}$ в количественном плане близок к аналогичному для Γ_+. Такая ситуация обуславливает близкое к постоянному значение параметра $\sqrt{\varepsilon_i}\Gamma_+$ (1.0×10^{17}–9.9×10^{17} эВ$^{1/2}$ см$^{-2}$ с$^{-1}$ для $CF_4 + O_2$ и 1.2×10^{17}–1.0×10^{17} эВ$^{1/2}$ см$^{-2}$ с$^{-1}$ для $C_4F_8 + O_2$ при 0–75% O_2), характеризующего интенсивность ионной бомбардировки поверхности образца. Для смеси $CHF_3 + O_2$ ($\sqrt{\varepsilon_i}\Gamma_+ = 1.6 \times 10^{17}$–$1.1 \times 10^{17}$ эВ$^{1/2}$ см$^{-2}$ с$^{-1}$ при 0–75% O_2) можно говорить о незначительном снижении интенсивности ионной бомбардировки с ростом содержания кислорода.

На рис. 1*в* показано влияние начального состава смесей на интенсивности излучения линий Ar 750.4 и F 703.8 нм. Очевидно, что характер зависимости $I_{Ar} = f\left(y_{O_2}\right)$ в условиях n_{Ar} = const определяется лишь изменением параметров электронной компоненты плазмы через функцию возбуждения $k_{Ar}n_e$, где k_{Ar} – константа скорости возбуждения. Из сравнения рис. 1*а* и 1*в* можно заключить, что результаты оптико-спектральной и зондовой диагностики плазмы находятся в полном согласии. Так, противоположные тенденции изменения температуры и концентрации электронов в смеси $CF_4 + O_2$ обеспечивают $k_{Ar}n_e \approx$ const (2.2–1.9 с$^{-1}$ при 0–75% O_2, в предположении $n_e \approx n_+$), при этом величина I_{Ar} также изменяется крайне незначительно. Напротив, плазма $CHF_3 + O_2$ характеризуется максимальными изменениями условий возбуждения, что обеспечивает резкое снижение $k_{Ar}n_e$ (8.1–2.7 с$^{-1}$ при 0–75% O_2) и I_{Ar} при неизменной концентрации аргона в смеси. Резко немонотонный характер зависимостей $I_F = f\left(y_{O_2}\right)$ в смесях $CF_4 + O_2$ и $CHF_3 + O_2$ отслеживает аналогичные изменения концентрации атомов фтора (рис. 1*г*). Ранее в наших работах [19, 20, 30] было показано, что рост n_F при увеличении содержания кислорода в этих системах является следствием различных реакционных механизмов. В частности, в смеси $CF_4 + O_2$ имеет место увеличение скорости генерации атомов фтора в объеме плазмы за счет протекания процессов вида $CF_x + O/O(^1D) \rightarrow CF_{x-1}O + F$ и $CF_xO + e \rightarrow CF_{x-1}O + F$. Напротив, система

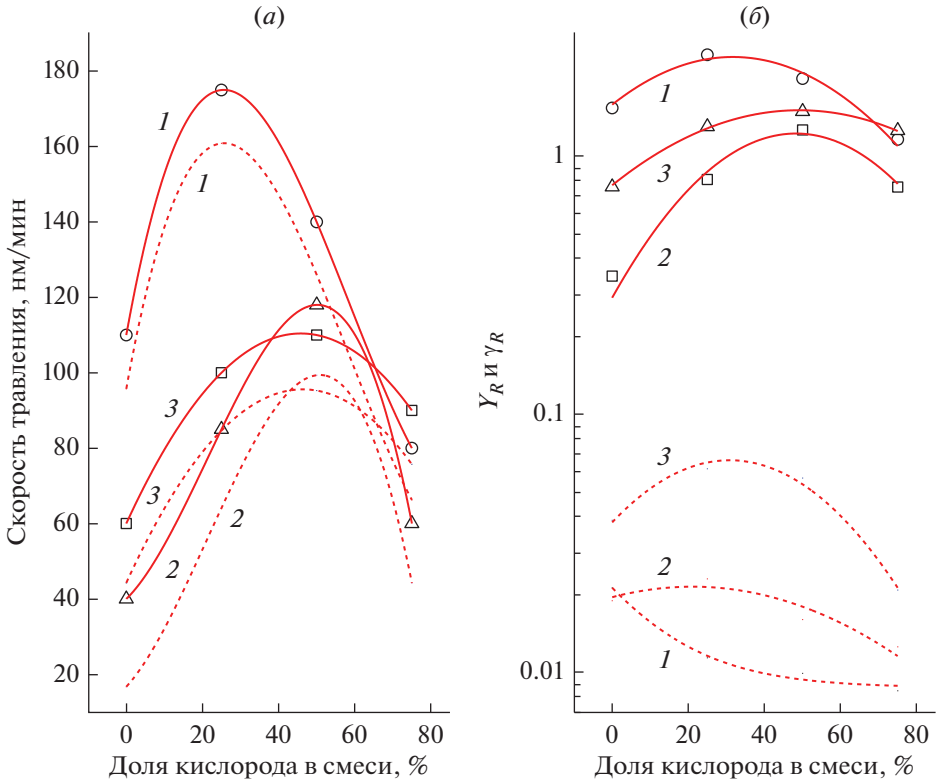


Рис. 2. Кинетика реактивно-ионного травления кремния в смесях $CF_4 + O_2$ (*1*), $CHF_3 + O_2$ (*2*) и $C_4F_8 + O_2$ (*3*). На рис. *а*: измеренные скорости травления (сплошная линия + символы) и расчетная скорость ионно-стимулированной химической реакции (пунктир). На рис. *б*: выход травления (сплошная линия + символы) и эффективная вероятность ионно-стимулированной химической реакции (пунктир).

$CHF_3 + O_2$ характеризуется резким снижением суммарной частоты гибели атомов по доминирующему механизму $CHF_x + F \rightarrow CF_x + HF$ [30]. Что касается смеси $C_4F_8 + O_2$, максимум концентрации атомов фтора достигается, по нашим оценкам, в области 80–85% O_2. Основываясь на данных работ [20, 28], можно предположить, что основной причиной здесь также является изменение кинетики гибели атомов из-за снижения скорости реакции $C_2F_4 + F \rightarrow CF_2 + CF_3$. Таким образом, объекты наших исследований существенно различаются по характеру зависимости $n_F = f\left(y_{O_2}\right)$ – как в количественно плане ($CF_4 + O_2$ по сравнению с $CHF_3 + O_2$), так и качественно ($C_4F_8 + O_2$ по сравнению с двумя остальными).

На рис. 2*а* показано влияние начального состава смесей на скорость травления кремния в условиях постоянства давления газа и вкладываемой мощности. Максимальная скорость травления в отсутствии кислорода ожидаемо наблюдается в плазме тетрафторметана, которая, по сравнению с двумя другим объектами исследований, отличается а) минимальной полимеризационной способностью (в силу максимального значения F/C); и б) максимальной концентрацией атомов фтора. Последний факт следует не только из данных рис. 1*г*, но имеет множественные подтверждения в работах по моделированию плазмы [19, 20, 28]. Можно видеть также, что во всех трех случаях зависимости $R_{Si} = f\left(y_{O_2}\right)$ имеют немонотонный (с максимумом) характер, при этом для смеси $C_4F_8 + O_2$ отсутствует даже формальное согласие с изменением концентрации атомов фтора в объеме плазмы. Расчеты выхода травления $Y_R = R_{Si}/\Gamma_+$ (рис. 2*б*) показали, что данная величина принимает не характерно высокие для чисто физического процесса значения при $\varepsilon_i \sim 300$ эВ, а также не коррелирует с изменением энергии ионной бомбардировки. Таким образом, в данном случае можно говорить о так называемом “химическом распылении”, когда объектом распыления служат частично или полностью фторированные атомы кремния. Высокие абсолютные значения Y_R здесь обеспечиваются снижением пороговой энергии распыления, при этом немонотонность изменения Y_R является следствием зависимости от скорости фторирования. Все это косвенно свидетельствует о том, что основным механизмом травления является химическое взаимодействие кремния с атомами фтора.

Для уточнения механизма травления мы провели оценку скорости физического распыления

кремния $R_{phys} = Y_S\Gamma_+$ ($Y_S \approx 0.18$–0.29 атом/ион при 200–300 эВ [29]), а затем определили химическую составляющую скорости как $R_{chem} = R_{Si} - R_{phys}$. На основании данных рис. 2*а* можно заключить, что а) величина R_{chem} всегда составляет не менее 70% от наблюдаемой скорости травления (за исключением ~45% в плазме чистого CHF_3); б) именно R_{chem} определяет немонотонные изменения наблюдаемых скоростей травления во всех трех смесях; и в) отсутствие согласия между характером зависимости $R_{chem} = f\left(y_{O_2}\right)$ и монотонным изменением концентрации (а, следовательно, и плотности потока) атомов фтора в плазме $C_4F_8 + O_2$ может обеспечиваться только непостоянством эффективной вероятности взаимодействия γ_R. В реальности величина γ_R не является постоянной во всех трех смесях (рис. 2*б*), что указывает на наличие сторонних факторов, влияющих на кинетику гетерогенной химической реакции. Анализ этих факторов на основе простейшего механизма, включающего стадии адсорбции атомов фтора на поверхности кремния R1: F → F(s.), собственно химической реакции R2: Si(s.) + xF(s.) → → SiF_x(s.) и десорбции продуктов в газовую фазу R3: SiF_x(s.) → SiF_x, приводит к следующим заключениям:

– Монотонное снижение γ_R в плазме $CF_4 + O_2$ определенно не может быть вызвано ни ионным "торможением" R1 из-за инициирования обратного процесса R4: F(s.) → F, ни эффектами, связанными с изменением толщины фторуглеродной полимерной пленки. Помимо упомянутого выше условия $\sqrt{\varepsilon_i}\Gamma_+ \approx$ const, причинами этого являются а) низкая полимеризационная способность тетрафторметана в условиях $\varepsilon_i > 200$ эВ, которая не обеспечивает толщин пленок, достаточных для лимитирования потока атомов фтора [4–6]; и б) снижение концентраций полимеробразующих радикалов CF_x (x = 1, 2) [9–11], что в совокупности с увеличением плотности потока атомов кислорода неизбежно уменьшает количество остаточного полимера на обрабатываемой поверхности. Очевидно, что результатом этих процессов должно быть увеличение, а не снижение эффективной вероятности взаимодействия. По нашему мнению, наиболее реалистичным механизмом здесь является конкурентная адсорбция атомов кислорода R5: O → O(s.) с последующим развитием в виде R6: Si(s.) + xO(s.) → SiO_x(s.). Известно, что химическая реакция между окисленным кремнием и атомами фтора обеспечивается реакцией R2, что требует ионного инициирования в виде R7: SiO_x(s.) → Si(s.) + xO [4]. Таким образом, комбинация растущей скорости R6 и постоянной R7 приводит к увеличению степени окисления поверхности и снижению свободных центров адсорбции для атомов фтора. Это снижает вероятность как R1, так и всей цепочки химических превращений, приводящих к газификации атомов кремния. К аналогичным выводам пришли и авторы работ [31, 32] при экспериментальном и теоретическом исследовании механизма травления кремния в плазме смеси $SF_6 + O_2$.

– Немонотонное (с максимумом при 30–40% O_2) изменение γ_R в плазме $C_4F_8 + O_2$ является, по-видимому, следствием высокой полимеризационной способности данной системы. Логично предположить, что при $y_{O_2} < 30\%$ на поверхности кремния формируется толстая сплошная полимерная пленка, затрудняющая доступ атомов фтора к обрабатываемой поверхности. С ростом доли кислорода в смеси толщина пленки снижается (что имеет экспериментальное подтверждение по данным работы [18]), а вероятность R1 увеличивается за счет более быстрого роста плотности потока атомов фтора на границе полимер/кремний по сравнению с Γ_F. В условиях $y_{O_2} > 40\%$ тонкая пленка теряет свои маскирующие свойства, при этом плотность потока атомов кислорода становится сравнимой с аналогичной величиной для атомов фтора. Это интенсифицирует рассмотренные выше механизмы, связанные с окислением поверхности кремния и приводящие к снижению γ_R. Таким образом, наличие максимума на зависимости $\gamma_R = f\left(y_{O_2}\right)$ фактически обусловлено конкуренцией различные гетерогенных процессов, оказывающих противоположный эффект на γ_R.

– Относительно слабые изменения γ_R в плазме $CHF_3 + O_2$ в целом не противоречат предложенному выше конкурентному механизму. Так, участок слабого роста γ_R при $y_{O_2} < 20\%$ явно отражает меньшую полимеризационную способность трифторметана по сравнению с C_4F_8 [7, 8, 13], при этом близкие абсолютные значения γ_R в системах $CHF_3 + O_2$ и $CF_4 + O_2$ при $y_{O_2} \sim 75\%$ согласуются с близкими концентрациями и плотностями потоков атомов кислорода [19, 20].

Очевидно, что предложенные выше механизмы гетерогенного взаимодействия не имеют прямо экспериментального подтверждения и, таким образом, могут рассматриваться лишь как один из возможных вариантов. В то же время, они адекватно объясняют экспериментальные данные по кинетике травления, а также по ряду косвенных признаков согласуются с результатами предшествующих работ по моделированию плазмы [19, 20]. В частности, на основании расчетных данных по составу плазмы из работы [20] можно заключить, что в смесях с высоким содержанием кислорода (т.е. в условиях, когда влиянием полимерной пленки на кинетику R1 можно пренебречь) выполняется правило "чем больше концентрация

атомов кислорода, тем меньше γ_R". По нашему мнению, это свидетельствует в пользу "окислительного" механизма снижения эффективной вероятности химической реакции кремния с атомами фтора. Тем не менее, окончательное выяснение данного вопроса требует исследований химического состава поверхности для подтверждения корреляции между содержанием кислорода в смеси и концентрацией окисленных форм кремния.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование электрофизических параметров плазмы, концентраций атомов фтора и кинетики реактивно-ионного травления кремния в смесях $CF_4 + O_2$, $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$ при варьировании содержания кислорода в диапазоне 0–75%. По результатам диагностики плазмы установлено, что а) добавка кислорода всегда сопровождается изменениями характеристик ионной компоненты плазмы, приводящими к снижению интенсивности ионной бомбардировки; и б) немонотонное (с максимумом) поведение концентрации атомов фтора имеет место лишь в смесях $CF_4 + O_2$ и $CHF_3 + O_2$. Показано, что доминирующим механизмом травления кремния во всех трех смесях является химическая реакция $Si + xF \rightarrow SiF_x$, скорость которой имеет максимум в области ~20% O_2 для плазмы $CF_4 + O_2$ и ~50% O_2 для систем $CHF_3 + O_2$ и $C_4F_8 + O_2$. Наличие такого эффекта для смеси $C_4F_8 + O_2$ не согласуется с поведением плотности потока атомов фтора, но обусловлено немонотонным изменением вероятности взаимодействия. Наиболее вероятной причиной здесь является конкуренция процессов снижения толщины фторуглеродной полимерной пленки (что интенсифицирует реакцию травления за счет облегчения доступа атомов фтора к поверхности кремния) и окисления поверхности атомами кислорода (что ингибирует реакцию травления из-за снижения доли доступных центров адсорбции для атомов фтора).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00216, https://rscf.ru/project/22-29-00216/.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Roosmalen J., Baggerman J.A.G., H. Brader S.J.* Dry etching for VLSI. N.Y.: Plenum Press, 1991.
2. *Wolf S., Tauber R.N.* Silicon Processing for the VLSI Era. V. 1. Process Technology. N.Y.: Lattice Press, 2000.
3. *Nojiri K.* Dry etching technology for semiconductors. Tokyo: Springer International Publishing, 2015.
4. *Lieberman M.A., Lichtenberg A.J.* Principles of plasma discharges and materials processing. N.Y.: John Wiley & Sons Inc., 1994.
5. *Stoffels W.W., Stoffels E., Tachibana K.* Polymerization of fluorocarbons in reactive ion etching plasmas // J. Vac. Sci. Tech. A. 1998. V. 16. P. 87–95.
6. *Kay E., Coburn J., Dilks A.* Plasma chemistry of fluorocarbons as related to plasma etching and plasma polymerization. In: Veprek S., Venugopalan M. (eds) Plasma Chemistry III. Topics in Current Chemistry. V. 94. Berlin, Heidelberg: Springer, 1980.
7. *Standaert T.E.F.M., Hedlund C., Joseph E.A., Oehrlein G.S., Dalton T.J.* Role of fluorocarbon film formation in the etching of silicon, silicon dioxide, silicon nitride, and amorphous hydrogenated silicon carbide // J. Vac. Sci. Technol. A. 2004. V. 22. P. 53–60.
8. *Schaepkens M., Standaert T.E.F.M., Rueger N.R., Sebel P.G.M., Oehrlein G.S., Cook J.M.* Study of the SiO_2-to-Si_3N_4 etch selectivity mechanism in inductively coupled fluorocarbon plasmas and a comparison with the SiO_2-to-Si mechanism // J. Vac. Sci. Technol. A. 1999. V. 17. P. 26–37.
9. *Kimura T., Noto M.* Experimental study and global model of inductively coupled CF_4/O_2 discharges // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. P. 063303 (1–9).
10. *Plumb I.C., Ryan K.R.* A model of the chemical processes occurring in CF_4/O_2 discharges used in plasma etching // Plasma Chem. Plasma Process. 1986. V. 6. P. 205–230.
11. *Efremov A., Lee J., Kim J.* On the Control of Plasma Parameters and Active Species Kinetics in $CF_4 + O_2 + Ar$ Gas Mixture by CF_4/O_2 and O_2/Ar Mixing Ratios // Plasma Chem. Plasma Process. 2017. V. 37. P. 1445–1462.
12. *Mogab C., Adams A., Flamm D.* Plasma Etching of Si and SiO_2 – The Effect of Oxygen Additions to CF_4 Plasmas // J. Appl. Phys. 1978. V. 49. P. 3796–3803.
13. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.-H.* Concerning the Effect of Type of Fluorocarbon Gas on the Output Characteristics of the Reactive-Ion Etching Process // Russian Microelectronics. 2020. V. 49. № 3. P. 157–165.
14. *Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.-H.* Features of the Kinetics of Bulk and Heterogeneous Processes in CHF_3 + Ar and C_4F_8 + Ar Plasma Mixtures // Russian Microelectronics. 2019. V. 48. № 2. P. 119–127.
15. *Kokkoris G., Goodyear A., Cooke M., Gogolides E.* A global model for C_4F_8 plasmas coupling gas phase and wall surface reaction kinetics // J. Phys. D. Appl. Phys. 2008. V. 41. P. 195211 (1–12).
16. *Rauf S., Ventzek P.L.* Model for an inductively coupled Ar/c-C_4F_8 plasma discharge // J. Vac. Sci. Technol. A. 2002. V. 20. P. 14–23.
17. *Proshina O., Rakhimova T.V., Zotovich A., Lopaev D.V., Zyryanov S.M., Rakhimov A.T.* Multifold study of volume plasma chemistry in Ar/CF_4 and Ar/CHF_3 CCP discharges // Plasma Sources Sci. Technol. 2017. V. 26. P. 075005.
18. *Li X., Ling L., Hua X., Fukasawa M., Oehrlein G.S., Barela M., Anderson H.M.* Effects of Ar and O_2 additives on SiO_2 etching in C_4F_8-based plasmas // J. Vac. Sci. Technol. A. 2003. V. 21. P. 284–293.
19. *Lim N., Efremov A., Kwon K.-H.* A comparison of CF_4, CHF_3 and C_4F_8 + Ar/O_2 Inductively Coupled Plasmas for Dry Etching Applications // Plasma Chem. Plasma Process. 2021. V. 41. P. 1671–1689.
20. *Efremov A., Lee B.J., Kwon K.-H.* On relationships between gas-phase chemistry and reactive-ion etching ki-

netics for silicon-based thin films (SiC, SiO_2 and Si_xN_y) in multi-component fluorocarbon gas mixtures // Materials. 2021. V. 14. P. 1432(1–27).

21. *Lee B.J., Efremov A., Nam Y., Kwon K.-H.* Plasma parameters and silicon etching kinetics in $C_4F_8 + O_2 + Ar$ gas mixture: Effect of component mixing ratios // Plasma Chem. Plasma Process. 2020. V. 40. P. 1365–1380.
22. *Shun'ko E.V.* Langmuir Probe in Theory and Practice, Boca Raton: Universal Publishers, 2008.
23. *Lopaev D.V., Volynets A.V., Zyryanov S.M., Zotovich A.I., Rakhimov A.T.* Actinometry of O, N and F atoms // J. Phys. D: Appl. Phys, 2017. V. 50. P. 075202(1–17).
24. *Cunge G., Ramos R., Vempaire D., Touzeau M., Neijbauer M., Sadeghi N.* Gas temperature measurement in CF_4, SF_6, O_2, Cl_2, and HBr inductively coupled plasmas // J. Vac. Sci. Technol. A. 2009. V. 27. №. 3. P. 471–478.
25. *Coburn J.W.* Plasma etching and reactive ion etching. N.Y.: AVS Monograph Series, 1982.
26. *Derkach V.P., Bagrii I.P., Chechko G.A.* Modeling of plasma etching in microelectronics // Cybern. Syst. Anal. 1990. V. 26. P. 653–663.
27. *Gray D.C., Tepermeister I., Sawin H.H.* Phenomenological modeling of ion-enhanced surface kinetics in fluorine-based plasma-etching // J. Vac. Sci. Technol. B. 1993. V. 11. P. 1243–1257.
28. *Efremov A., Son H.J., Choi G., Kwon K.-H.* On Mechanisms Influencing Etching/Polymerization Balance in Multi-Component Fluorocarbon Gas Mixtures // Vacuum. 2022. V. 206. P. 111518(1–10).
29. *Seah M.P., Nunney T.S.* Sputtering yields of compounds using argon ions // J. Phys. D: Appl. Phys. 2010. V. 43. № 25. P. 253001(1–24).
30. *Efremov A., Bashmakova D., Kwon K.-H.* Features of plasma composition and fluorine atom kinetics in $CHF_3 + O_2$ gas mixture // ChemChemTech. 2023. V. 66. № 1. P. 48–55.
31. *d'Agostino R., Flamm D.L.* Plasma etching of Si and SiO_2 in SF_6–O_2 mixtures // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. P. 162–167.
32. *Knizikevicius R.* Simulations of Si and SiO_2 Etching in $SF_6 + O_2$ Plasma // Acta Physica Polonica A. 2010. V. 117. № 3. P. 478–483.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 307–314

ПРИБОРЫ

УДК 621.382

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ *p-i-n*-ФОТОДИОДОВ

© 2023 г. Н. С. Ковальчук[a], С. Б. Ластовский[b], В. Б. Оджаев[c], А. Н. Петлицкий[a], В. С. Просолович[c, *], Д. В. Шестовский[a], В. Ю. Явид[c], Ю. Н. Янковский[c]

[a]*Открытое акционерное общество "ИНТЕГРАЛ" – управляющая компания холдинга "ИНТЕГРАЛ", ул. Казинца, 121А, Минск, 220108 Республика Беларусь*

[b]*Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, ул. Петруся Бровки, 19, Минск, 220072 Республика Беларусь*

[c]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, Минск, 220050 Республика Беларусь*

*****E-mail: prosolovich@bsu.by*

Поступила в редакцию 03.04.2023 г.
После доработки 05.05.2023 г.
Принята к публикации 10.05.2023 г.

Представлены результаты исследований электрофизических параметров *p-i-n*-фотодиодов на основе кремния в зависимости от режимов их работы (величины внешнего смещения и температуры), изготовленных на пластинах монокристаллического кремния *p*-типа проводимости ориентации (100) с ρ = 1000 Ом см. Область p^+-типа (изотипный переход) создавалась имплантацией ионов бора, области n^+-типа – диффузией фосфора из газовой фазы. Установлено, что на вольт-амперных характеристиках при обратном смещении можно выделить три области изменения темнового тока в зависимости от приложенного напряжения: сублинейную, суперлинейную и линейную, обусловленные различными механизмами генерационно-рекомбинационных процессов в области обеднения *p-n*-перехода. Заметная зависимость величины барьерной емкости (на частоте 1 кГц) и размеров области обеднения от температуры наблюдается только при приложенных обратных напряжениях, не превышающих контактную разность потенциалов ($V \leq 1$ В).

Ключевые слова: p-i-n-фотодиод, барьерная емкость, темновой ток, генерационно-рекомбинационные процессы

DOI: 10.31857/S054412692370045X, **EDN:** JBLRNE

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные *p-i-n*-фотодиоды широко применяются в сетевых картах и коммутаторах волоконно-оптических системах связи для преобразования электромагнитных излучений в электрический сигнал. Простота конструкции, низкая стоимость и возможность изготовления прибора с оптимальными характеристиками обуславливают применение *p-i-n*-фотодиодов в аппаратуре космического назначения в качестве навигационных и сенсорных детекторов оптического и ИК диапазона, в системах *LIDAR* [1], а также в оптических межспутниковых каналах связи [2].

Введение *i*-слоя собственного полупроводника между *p*- и *n*-слоями примесного полупроводника позволяет существенно увеличить размер области пространственного заряда. Конструкция прибора позволяет достигнуть практически полного поглощения оптического излучения в *i*-слое и сокращения времени переноса зарядов из *i*-зоны в легированные области. Таким образом, основное преимущество *p-i-n*-фотодиодов заключается в быстром переключении, так как поглощение излучения происходит в *i*-слое, где за счет дрейфового переноса носители заряда имеют высокие скорости. Другим преимуществом является высокая квантовая эффективность, поскольку толщина *i*-слоя обычно больше обратного коэффициента поглощения, и все фотоны поглощаются в *i*-слое. Кремниевые *p-i-n*-фотодиоды обладают квантовой эффективностью выше 80–90% в интервале длин волн 400–1100 нм, хорошей чувствительностью (0.5 А/Вт) и малым временем нарастания импульса (несколько наносекунд). Квантовая эффективность определяется, прежде всего, величиной темнового тока, связанной с концентрацией свободных носителей заряда, которые генерируются в объеме кремния в отсутствие внешнего светового возбуждения, например, в результате термогенерации. Генерационными центрами являются различные технологические (фоновые)

примеси и другие структурные дефекты (например, дислокации, микродефекты, вакансионные скопления и скопления междоузельных атомов, дефектно-примесные комплексы). В работе проведен анализ изменения электрофизических параметров *p-i-n*-фотодиодов на основе кремния с вертикальной структурой и охранным кольцом в зависимости от режимов их работы (величины внешнего смещения и температуры).

2. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Приборы изготавливались на пластинах монокристаллического кремния *p*-типа проводимости ориентации (100) с ρ = 1000 Ом см, выращенных методом бестигельной зонной плавки. Область p^+-типа анода (изотипный переход) создавалась имплантацией ионов B^+ во всю поверхность непланарной стороны пластины, области n^+-типа катода и охранного кольца – диффузией P из газовой фазы в планарную сторону пластины. Измерения вольт-амперных и вольт-фарадных характеристик (соответственно далее в тексте ВАХ и ВФХ) производились на измерителе параметров полупроводниковых приборов *Agilent B1500A* с зондовой станцией *Cascade Summit 11000B-AP* в диапазоне температур –30...70°C с шагом 10°C. Определение локальных дефектов в приповерхностной фоточувствительной области осуществлялось с помощью растрового электронного микроскопа "*HITACHI*" типа *S*-4800 (РЭМ) согласно методике [3] в сканирующем режиме и в режиме наведенного тока с энергиями пучка электронов 20 и 30 кэВ, соответственно. Спектры релаксационной спектроскопии глубоких уровней (*DLTS*) измерялись при длительности импульса заполнения 0.01 с и окне скорости эмиссии 19 $с^{-1}$. Спектры измерялись при обратном смещении –5 В в режимах заполнения ловушек основными и неосновными носителями заряда. В первом случае напряжение заполнения было 0 В, а во-втором – 2 В.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведены ВАХ темновых токов фоточувствительной области и охранного кольца исходного фотодиода при 20°C. Видно, что обратный темновой ток (I_R) возрастает с увеличением обратного смещения, при этом зависимости для фоточувствительной области и для охранного кольца качественно похожи. Для *p-n*-перехода на основе кремния при 20°C основной вклад в обратный темновой ток вносит дрейфовая составляющая, обусловленная генерационно-рекомбинационными процессами в области обеднения [4]. Следует отметить, что на ВАХ при обратном смещении как фоточувствительной области, так и

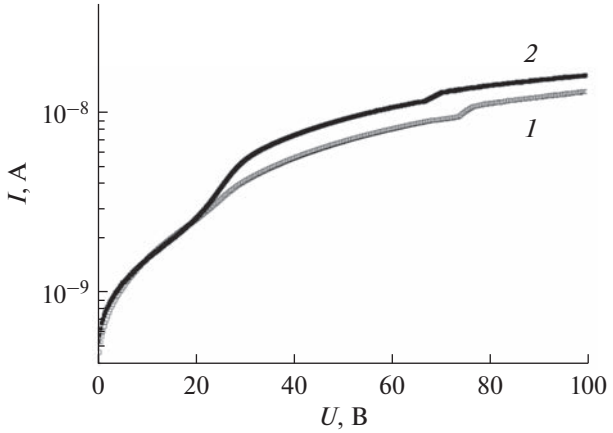


Рис. 1. Обратные ВАХ фоточувствительной области (кривая *1*) и охранного кольца (кривая *2*) *p-i-n*-фотодиода при температуре 20°C.

охранного кольца, наблюдаются ступеньки вблизи $V_1 \approx 25$ В и $V_2 \approx 70$ В. Это связано, вероятно, с термической генерацией носителей заряда с глубоких уровней. Данный факт так же позволяет сделать предположение о неоднородном распределении технологических примесей с глубокими уровнями по объему кристалла. Ранее качественно подобные ВАХ наблюдались нами при исследовании диодов генераторов шума, сформированных на сильнолегированных подложках монокристаллического кремния (ρ = 0.005 Ом см) [5]. Наличие ступенек на вольт-амперных характеристиках было связано с неоднородным распределением примесей по объему подложки.

Для обратной ВАХ *p-n*-перехода, в области пространственного заряда которого преобладает генерация электронно-дырочных пар, присуща степенная зависимостью тока от приложенного напряжения $I_R \sim V^n$ [4]. На рис. 2 приведена ВАХ темнового тока в двойном логарифмическом масштабе, которая может быть разбита на три участка: I – сублинейный, $n \sim 0.5$. Такая зависимость характерна для резкого ассиметричного *p-n*-перехода, для которого рост I_R с напряжением связан с ростом области обеднения (W) по степенному закону с $n = 0.5$ [4]. В широкозонных полупроводниках с низкой концентрацией собственных носителей заряда n_i (таких, как Si) и большой концентрацией генерационно-рекомбинационных центров (низкое значение τ_e) при комнатной температуре преобладает генерационный ток (J_{gen}). При заданной температуре J_{gen} пропорционален ширине обедненного слоя, который в свою очередь зависит от приложенного обратного смещения V [4].

$$J_{gen} = \int_0^W q|U|\,dx \approx q|U|W = \frac{qn_iW}{\tau_e}, \qquad (1)$$

$$J_{\text{gen}} \sim \frac{1}{\tau_e}; \quad J_{\text{gen}} \sim W \sim (V_{bi} + V)^{1/2}. \qquad (2)$$

Таким образом, следует ожидать для резкого *p-n*-перехода степенную зависимость генерационного тока от приложенного напряжения с показателем степени $n = 0.5$. Из исследований температурных зависимостей I_R (рис. 3) установлено, что генерация носителей заряда на участке I (при приложенных напряжения от 0 до 10 В) происходит с энергетического уровня 0.20 эВ.

При напряжениях от 10 до 25 В (участок II) обратный ток также возрастает с ростом V и n становится больше 0.5 ($n \sim 2$). Такая суперлинейная зависимость, вероятно, обусловлена высокой концентрацией рекомбинационно-генерационных центров и их неоднородным распределением по объему кристалла [6].

На участке III при $V \sim 35$–70 В (рис. 2) ток прямо пропорционален V ($n \sim 1$). На данном участке ток экспоненциально зависит от температуры, генерация носителей заряда при данных напряжениях смещения происходит с энергетического уровня 0.26 эВ. Из исследований ВАХ и температурных зависимостей обратного тока можно заключить, что процессы формирования темнового тока обусловлены термической генерацией носителей заряда с глубоких уровней и, вероятно, неоднородным распределением технологических (фоновых) примесей и/или микродефектов по объему кристалла. Исходя из различного энергетического положения глубоких уровней на участке I и на участке III следует, что в генерационно-рекомбинационных процессах участвуют различные виды дефектов структуры. Однако, данные эффекты могут быть обусловлены и особенностями изменения размеров области обеднения при приложении внешнего смещения.

Из данных ВФХ следует, что барьерная емкость ($C_б$) исследуемого прибора уменьшается с увеличением обратного напряжения (рис. 4). Согласно [4] зависимость емкости от приложенного обратного смещения имеет вид $1/C^2 \sim V$ для резкого асимметричного *p-n*-перехода и $1/C^3 \sim V$ для плавного *p-n*-перехода.

Проведенные теоретические расчеты зависимости толщины области обеднения (W) от приложенного напряжения в соответствии с [4] и сравнение их с экспериментальными результатами из измерений барьерной емкости $C_б$ и обратного тока I_R показали (рис. 5), что переход резкий асимметричный.

Из рис. 5 также следует, что на участке II, несмотря на то, что $I_R \sim V^2$, величина обратной емкости $1/C \sim W$ по-прежнему продолжает расти по закону с $n = 0.5$. Следовательно, рост величины обратного тока происходит не только за счет увеличения толщины W, но и за счет включения нового механизма генерации внутри области обеднения,

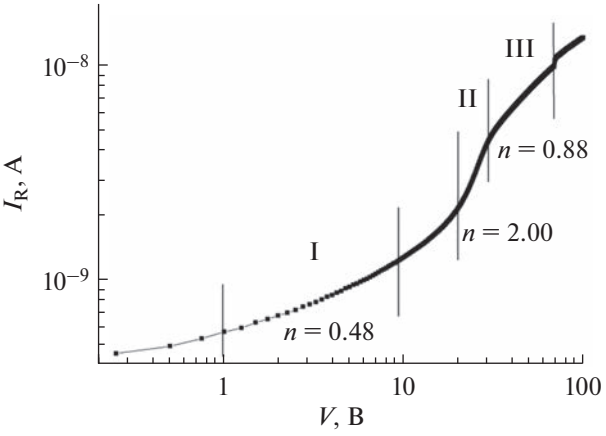


Рис. 2. ВАХ темновых токов *p-i-n*-фотодиода в двойном логарифмическом масштабе при $T = 20$°C.

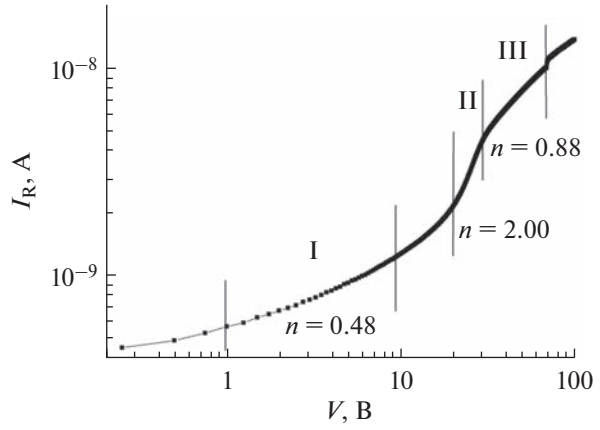


Рис. 3. Температурные зависимости обратного тока *p-i-n*-фотодиода при различных значениях напряжения смещения, В: 1 – 10, 2 – 20, 3 – 40.

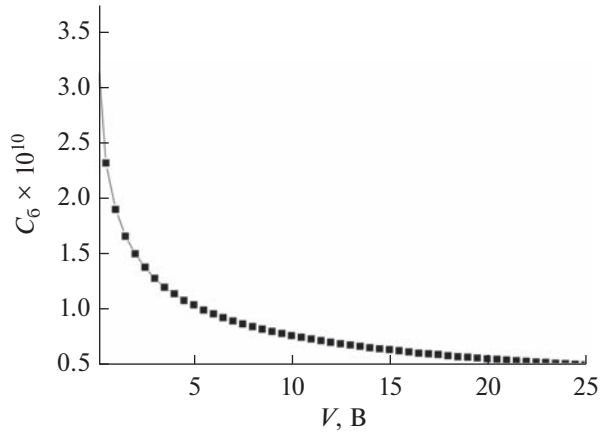


Рис. 4. Зависимость барьерной емкости *p-i-n*-фотодиода от приложенного обратного напряжения. $T =$ = 20°C, $F = 1$ кГц.

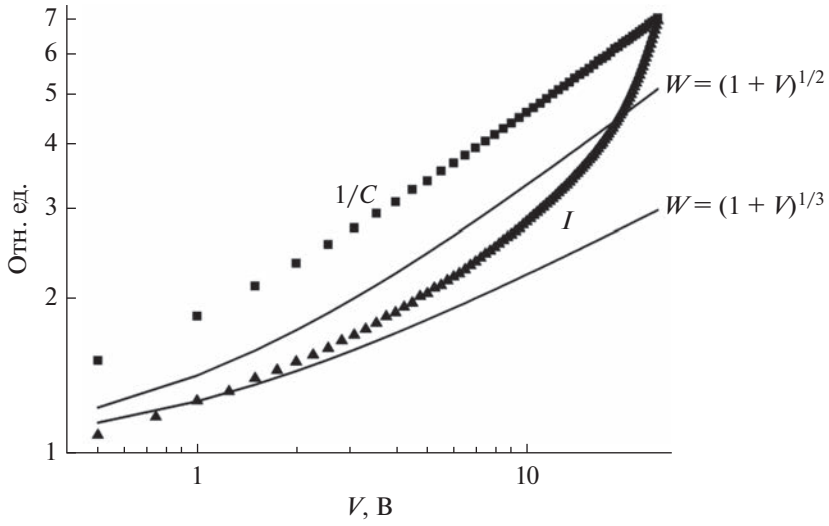


Рис. 5. Расчетные зависимости толщины области обеднения W от приложенного напряжения и их сравнение с экспериментальными данными $1/C_б$ и I_R.

что подтверждает высказанное выше предположение о неравномерном распределении глубоких рекомбинационных центров по объему области обеднения. При напряжениях более 8 В для обратного тока появляется дополнительный канал утечки, т.е. включается новый механизм увеличения I_R, не связанный с увеличением W от V.

Высокие значения n ($n > 0.5$) наблюдались нами ранее при анализе ВАХ биполярных транзисторов [7] и могут быть связаны с целым рядом причин, обусловленных ограничениями применения статистики Холла-Шокли-Рида, в рамках которой получены выражения (1) и (2). Среди этих причин прежде всего следует выделить высокую концентрацию рекомбинационно-генерационных центров и их неоднородное распределение. Кроме того, эти центры могут входить в состав протяженных дефектов или областей скоплений дефектов. Высокие значения n (от 0.5 и выше) наблюдались ранее в приборах, изготовленных по стандартной технологии с применением для формирования легированных областей ионной имплантации, и характерны для генерационной составляющей обратного тока диодов с наличием дислокаций или других структурных дефекты в области p-n-перехода [8]. Такие дефекты заметно увеличивают токи утечки p-n-перехода. Особенно губительно для приборов сочетание дислокаций и примесей металлов с большими коэффициентами диффузии. В кремниевых переходах при декорировании дислокаций металлическими примесями наблюдалось увеличение токов утечки вплоть до короткого замыкания p-n-перехода [8, 9].

В настоящее время существует лишь качественное объяснение результатов экспериментов, в которых увеличение токов утечки связывается с образованием по дислокациям “мостиков” повышенной проводимости через область пространственного заряда p-n-перехода. Оценки [8, 9] дают сопротивления этих “мостиков” от 20 МОм до нескольких Ом. Эта интерпретация опирается на известный факт стекания примеси к дислокациям. Наиболее распространенное объяснение влияния дислокаций на токи утечки основывается на исследованиях, в которых показано, что дислокация в кремнии n-типа ведет себя как цепочка акцепторов, а в p-кремнии – как цепочка доноров. Поэтому из условий электронейтральности дислокация должна образовывать вокруг себя трубку повышенной концентрации основных носителей заряда [9].

Однако, как показали исследования методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), увеличение обратных токов рассматриваемого p-i-n-фотодиода не может быть связано с утечками через p-n-переход вследствие шунтирования его структурными дефектами типа дислокаций, скоплений на них примесей и т.п. На всех изображениях РЭМ (рис. 6) в фоточувствительных областях фотодиода не наблюдалось контрастов, свидетельствующих о наличии размерных дефектов, являющихся локальными генерационно-рекомбинационными центрами (ГРЦ) вблизи металлургической границы p-n-перехода. Таким образом, анализ полученных результатов позволяет заключить, что скопления ГРЦ находятся внутри области обеднения p-i-n-фотодиода на некотором расстоянии от p-n-перехода, причем распределены в ней неравномерно. Такими дефектами могут быть скопления микродефектов, формирующиеся вследствие флуктуаций температуры, возникающих как в результате вращения кристалла в процессе выращивания в асимметричном тепловом поле, так и при

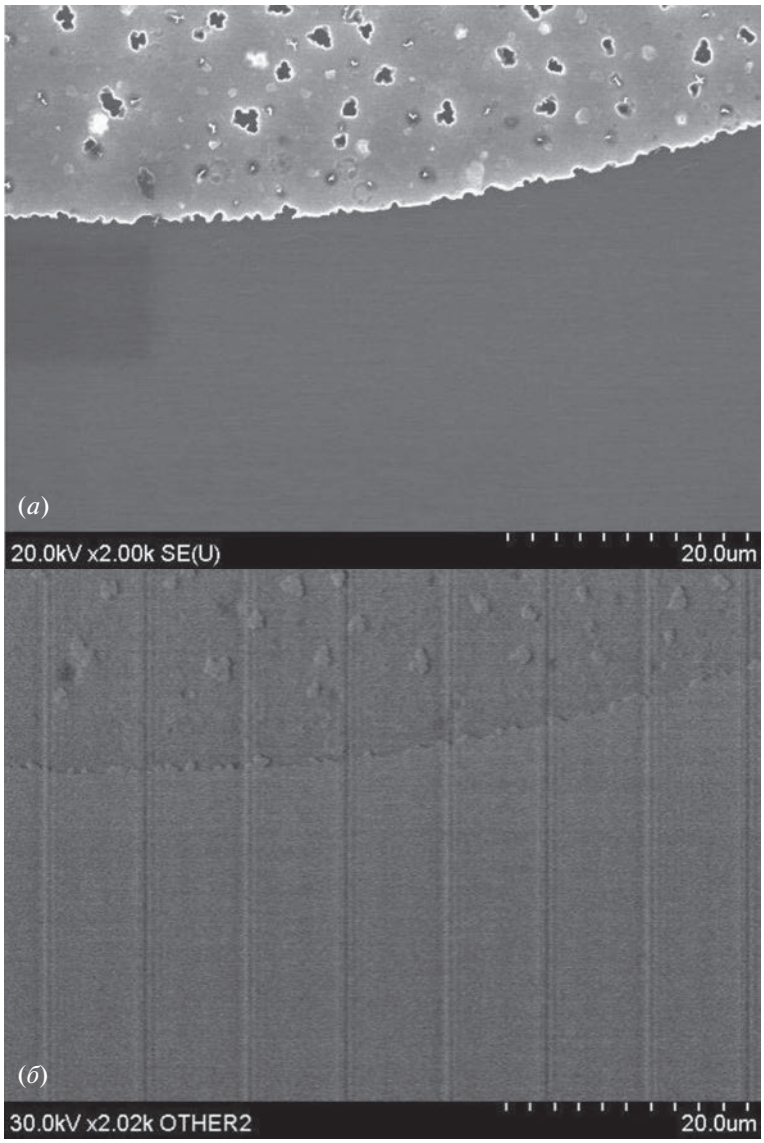


Рис. 6. Изображения приповерхностной фоточувствительной области *p-i-n*-фотодиода полученные РЭМ в режиме сканирования (*а*) и в режиме наведенного тока (*б*).

высокотемпературных технологических обработках при изготовлении приборов. Существует три типа микродефектов, образующихся в бездислокационных монокристаллах, выращенных методом бестигельной зонной плавки, различающихся размерами, структурой и условиями возникновения [10, 11]. *A*-дефекты представляют собой призматические дислокационные петли междоузельного типа и их скопления размерами 0.5–5.0 мкм. *B*-дефекты являются кластерами междоузельных атомов, их размеры не превышают 0.005–0.05 мкм. *C*-дефекты – являются скоплениями точечных дефектов междоузельного типа размером ~4.10 нм. Наличие дефектов структуры в бездислокационных монокристаллах кремния определяет физические свойства этих кристаллов и качество приборных структур на основе кремния.

Дефекты структуры, как сказано выше, могут образовываться как в процессе выращивания кристаллов (ростовые микродефекты), так и в процессе изготовления полупроводниковых приборов (постростовые микродефекты). В процессе изготовления прибора кристалл на ряде этапов подвергается высокой термической обработке (диффузия, постимплантационный отжиг и т.п.). При термообработке в кристаллах кремния протекают сложные процессы генерации и рекомбинации собственных точечных дефектов и взаимодействия их с различного вида как примесными, так и собственными структурными дефектами. В общем виде к ним относятся следующие: высокотемпературная генерация и рекомбинация точечных дефектов в кристаллической решетке кристалла; эмиссия и встраивание точечных дефектов в

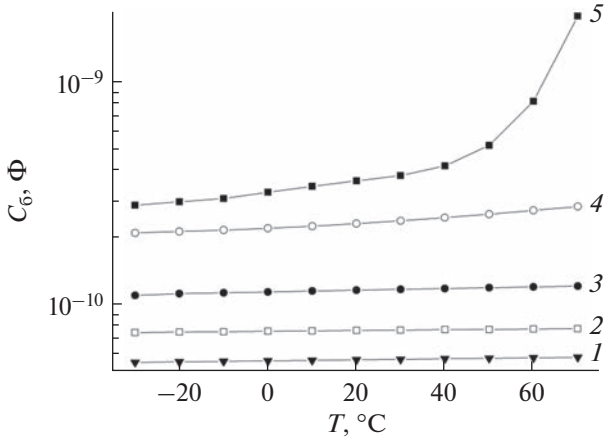


Рис. 7. Температурные зависимости барьерной емкости на частоте $F = 1$ кГц при различных значениях напряжения смещения, В: *1* – 20; *2* – 10; *3* – 5; *4* – 0.5; *5* – 0.

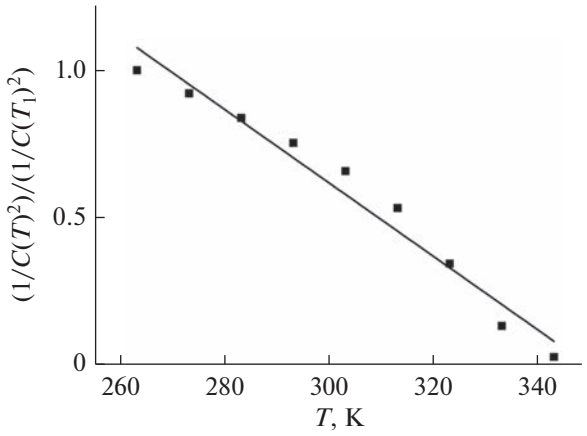


Рис. 8. Температурная зависимость относительной величины обратного квадрата барьерной емкости *p-i-n*-фотодиода. $V = 0$ В, $F = 1$ кГц. Температура $T_1 = 263$ K.

структуру микродефектов; генерация и рекомбинация точечных дефектов на поверхности кристалла, обуславливающие возникновение диффузионных потоков объем – поверхность и наоборот; образование различных преципитатов за счет взаимодействия точечных дефектов между собой и с примесными атомами [12]. В результате происходит рост микродефектов и трансформация исходной дефектной структуры, которая проходит ряд последовательных стадий от совокупности вакансионных и междоузельных микродефектов до крупных дефектов. Так как распределение ростовых микродефектов в объеме кристалла неоднородно, то одновременно возможно образование и рост дефектов в различных участках активной области прибора (области обеднения). Отсутствие размерных дефектов, являющихся локальными рекомбинационными центрами вблизи металлургической границы *p-n*-перехода, вероятно обусловлено геттерирующим действием примеси фосфора, вводимой в кристалл для формирования *p-n*-перехода методом диффузии из газовой фазы в планарную сторону пластины [13, 14].

Исследования температурной зависимости барьерной емкости при различных напряжениях смещения (на частоте 1 кГц) показали (рис. 7), что заметная зависимость $C_б$ наблюдается только при напряжениях, не превышающих контактную разность потенциалов ($V \le 1$ В). В случае резкого несимметричного перехода [4]

$$C_б \equiv \frac{dQ_c}{dV} = \frac{\varepsilon_s}{W} = \sqrt{\frac{q\varepsilon_s N_B}{2}}\left(V_{bi} \pm V - \frac{2kT}{q}\right)^{-1/2} = \frac{\varepsilon_S}{\sqrt{2}L_D}(\beta V_{bi} \pm \beta V - 2)^{-1/2}, \quad (3)$$

а $W \sim (V_{bi} + V)^{1/2}$, где V – приложенное напряжение. В свою очередь

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_S V_{bi}}{qN_B}}, \quad (4)$$

где $N_B = N_D$ или N_A в слаболегированной части *p-n*-перехода, а контактная разность потенциалов

$$qV_{bi} = E_g - (qV_n + qV_p) = kT\ln\left(\frac{n_{n0}p_{p0}}{n_i^2}\right) \approx kT\ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right), \quad (5)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны; qV_n и qV_p – положение уровня Ферми в запрещенной зоне относительно дна зоны проводимости в полупроводнике *n*-типа и относительно потолка валентной зоны в полупроводнике *p*-типа; n_{n0} и p_{p0} – равновесные концентрации электронов и дырок в полупроводнике *n*-типа и дырок в полупроводнике *p*-типа, соответственно; N_D и N_A – концентрации доноров и акцепторов; n_i – собственная концентрация носителей заряда в полупроводнике.

В выражение для $C_б$ (3) входят два параметра, зависящие от температуры: относительная диэлектрическая проницаемость ε и высота потенциального барьера qV_{bi}. При повышении температуры ε увеличивается, а qV_{bi} уменьшается [15]. Поскольку ε входит в числитель формулы для $C_б$, а qV_{bi} в знаменатель, то при повышении температуры барьерная емкость возрастает. Однако, в формулу (3) кроме того входит величина $V_{bi} + V$ (сумма запирающего напряжения и высоты потенциального барьера). Следовательно, при напряжениях смещения $V \le V_{bi}$ зависимость W от температуры определяется температурной зависимостью V_{bi}. Проведенное моделирование по формулам (3)–(5)

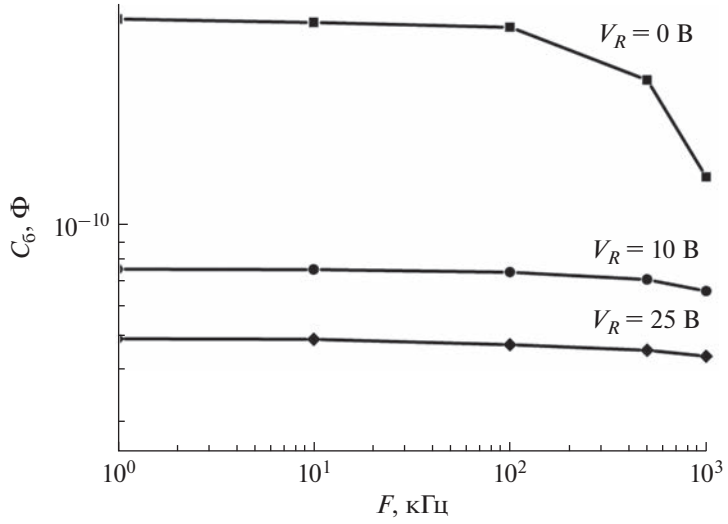


Рис. 9. Зависимости барьерной емкости *p-i-n*-фотодиода от частоты измерений при $T = 20$°C при различных напряжениях смещения.

показало, что при увеличении температуры контактная разность потенциалов и толщина обедненного слоя уменьшаются, а барьерная емкость увеличивается. При этом выполняется соотношение $1/C^2 \sim W^2 \sim V_{bi}$ (рис. 8).

Исследования частотной зависимости $C_б$ *p-i-n*-фотодиода показали (рис. 9), что барьерная емкость существенно зависит от частоты измерений тогда, когда размеры W полностью определяются величиной V_{bi}, т.е. при $V \le V_{bi}$. Если размеры W определяются внешним приложенным обратным смещением ($V \gg V_{bi}$), то $C_б$ практически не зависит от частоты. Уменьшение $C_б$ при частотах более 100 кГц для напряжения смещения $V \le V_{bi}$, учитывая амплитуду сканирующего сигнала (25 мВ), вероятно связано с возрастанием влияния диффузионной емкости.

Следует отметить, что из измерений *DLTS* новых видов дефектов обнаружено не было, спектры имеют типичный вид для кремния *p*-типа. При анализе полученных результатов следует учитывать, что исследования *DLTS* производились при напряжениях смещения, не превышающих 10 В, т.е. исследования соответствовали области I темновой вольт-амперной характеристики *p-i-n*-фотодиода. Данный факт согласуется с результатами исследований методом растровой электронной микроскопии, из которых следует, что в фоточувствительных областях фотодиода вблизи металлургической границы *p-n*-перехода не наблюдалось наличия размерных дефектов (типа дислокаций), являющихся локальными генерационно-рекомбинационными центрами. Наблюдаемые особенности вольт-амперных характеристик обусловлены структурными дефектами, расположенными в глубине обедненной области *p-i-n*-фотодиода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что для *p-i-n*-фотодиодов на темновых ВАХ при обратном смещении можно выделить три области изменения тока в зависимости от приложенного напряжения: сублинейную (0–8 В), суперлинейную (10–25 В) и линейную (более 25 В). При напряжениях смещения свыше 8 В ток начинает возрастать по суперлинейному закону, однако размеры области обеднения по-прежнему продолжают расти по сублинейному закону. Это обусловлено появлением при данных напряжениях дополнительного канала для генерационного тока, обусловленного высокой концентрацией ГРЦ в области обеднения и их неоднородным распределением по объему кристалла. Такими дефектами структуры являются как ростовые микродефекты, образующиеся в процессе выращивания монокристаллов, так и постростовые микродефекты, которые формируются в процессе изготовления полупроводниковых приборов. На частоте измерений ВФХ 1 кГц заметная зависимость величины барьерной емкости и размеров области обеднения от температуры для *p-i-n*-фотодиодов наблюдается только при приложенных обратных напряжениях, не превышающих контактную разность потенциалов ($V \le 1$ В). Показано, что барьерная емкость *p-i-n*-фотодиодов практически не зависит от частоты измерений, если размеры области обеднения определяются внешним приложенным обратным смещением ($V \gg V_{bi}$). На частотах более 100 кГц при $V \le V_{bi}$ наблюдается уменьшение $C_б$, обусловленное проявлением возрастающего влияния диффузионной емкости.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них конфликт интересов отсутствует.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *João Pereira do Carmo, Moebius B., Pfennigbauer M., Bond R., Bakalski I., Foster M., Bellis S., Humphries M., Fisackerly R., Houdou B.* Imaging lidars for space applications // Novel Optical Systems Design and Optimization. XI. 2008. V. 7061. P. 70610J-01–70610J-12.
2. *De Carlo P. M., Roberto L., Marano G., L'Abbate M., Oricchio D., Venditti P.* Intersatellite link for earth observation satellites constellation // SPACEOPS, Roma, Italy. 2006. P. 19–23.
3. *Солодуха В.А., Шведов С.В., Петлицкий А.Н., Петлицкая Т.В., Чигирь Г.Г., Пилипенко В.А., Филипеня В.А., Жигулин Д.В., Уситименко Д.С.* Анализ дефектов интегральных схем с использованием растрового электронного микроскопа в режиме наведенного тока // Современные информационные и электронные технологии: сборник трудов 19-ой Международной научно-практической конференции, Одесса, 28 мая–01 июня 2018 г. Одесса, 2018. С. 48–49.
4. *Sze S.M., Lee M.K.* Semiconductor Devices: Physics and Technology. Pub. 3. John Wiley & Sons Singapore Pte. Limited. 2012. 582 p.
5. *Буслюк В.В., Оджаев В.Б., Панфиленко А.К., Петлицкий А.Н., Просолович В.С., Филипеня В.А., Янковский Ю.Н.* Электрофизические параметры диодов генераторов широкополосного шума // Микроэлектроника. 2020. Т. 49. № 4. С. 315–320.
6. *Liefting R., Wijburg R.C.M., Custer J.C., Wallinga H.* Improved device performance by multistep or carbon co-implants. IEEE Trans. Electron Devices // 1994. V. ED-41. P. 50–55.
7. *Оджаев В.Б., Панфиленко А.К., Петлицкий А.Н., Просолович В.С., Шведов С.В., Филипеня В.А., Явид В.Ю., Янковский Ю.Н.* Исследование влияния технологических примесей на вольт-амперные характеристики биполярного *n-p-n*-транзистора // Весці Нацыянальнай Акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-тэхнічных навук. 2018. Т. 63. № 2. С. 244–249.
8. *Сорокин Ю.Г.* Влияние дислокаций на электрические параметры *p-n*-переходов // Тр. Всес. Электротехнического института. 1980. № 90. С. 91–101.
9. *Plantinga G.H.* Effect of dislocation on the transistors parameters fabricated by shallow diffusied // IEEE Trans. Electron Devices. 1969. V. 16. № 4. P. 394–400.
10. *Рейви К.* Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии / Под ред. С.Н. Горина. М.: Мир, 1984. 472 с.
11. *Мильвидский М.Г., Освенский В.Б.* Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1984. 256 с.
12. *Таланин В.И., Таланин И.Е.* Применение диффузионной модели образования ростовых микродефектов для описания дефектообразования в термообработанных монокристаллах кремния // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. Вып. 2. С. 247–251.
13. *Климанов Е.А.* О механизмах геттерирования генерационно-рекомбинационных центров в кремнии при диффузии фосфора и бора // Успехи прикладной физики. 2015. Т. 3. № 2. С. 121–125.
14. *Hugo S.A., Hiesmair H., Weber E.R.* Gettering of metallic impurities in photovoltaic silicon // Applied Physics A. 1997. V. 64. № 2. P. 127–137.
15. *Берман Л.С.* Варикапы. М.–Л.: "Энергия", 1965. 40 с.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 315–321

ПРИБОРЫ

УДК 621.382.002

МНОГОУРОВНЕВЫЕ МЕМРИСТИВНЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

© 2023 г. Н. А. Тулина[a], *, А. Н. Россоленко[a], И. Ю. Борисенко[b], А. А. Иванов[c]

[a] *Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка, Россия*

[b] *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

[c] *Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, Россия*

**E-mail: tulina@issp.ac.ru*

Поступила в редакцию 14.03.2023 г.
После доработки 03.05.2023 г.
Принята к публикации 15.05.2023 г.

Представлены импульсные исследования переходных процессов в эффекте резистивных переключениях в планарных гетероконтактах на основе сильно коррелированных электронных систем на примере мемристивных переходов на основе $YBa_2Cu_3O_{7-d}$. Показано, что процесс переключений асимметричен относительно переключения в низкорезистивные и высокорезистивные метастабильные состояния, времена переключений регулируются уровнем напряжения и могут быть меньше микросекунд, с другой стороны релаксационные процессы достигают десятка секунд. Возможность регулировать времена переключений характеризуют пластичность этих устройств в качестве элементов памяти для нейроморфных приложений в спайковых нейросетях.

Ключевые слова: интерфейсные структуры, гетероструктуры, мемристор, резистивные переключения, пленки, вакансии

DOI: 10.31857/S0544126923700382, **EDN:** WDVNXM

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из ключевых элементов для создания нейроморфных вычислительных систем является мемристор – резистор с памятью, сочетающий в себе функции обработки и хранения информации [1–5]. Принцип работы мемристора основан на его обратимом резистивном переключении (РП) под действием электрического поля и хранении возникающего резистивного состояния после снятия напряжения. Эффект РП был обнаружен в мемристорах в структурах типа металл–диэлектрик–металл (МДМ) на основе ряда соединений в основном оксидных. Сегодня считается, что эффект РП объясняется образованием и разрушением нитевидных хорошо проводящих каналов (conductive filaments) либо металлических мостиков (conductive bridges), формирование и разрушение которых происходит при электромиграции вакансий кислорода [1–5]. Особый интерес представляет проблема исследования переключений электронной природы. В последних выпусках международной технологической дорожной карты для полупроводников (ITRS) говорится о новом классе памяти "Mott Memory", где работает новый механизм резистивных переключений на основе сильно коррелированных электронных систем (СКЭС) моттовский природы (Mott ReRAM) [6]. Несмотря на то, что в мемристивных структурах на основе СКЭС: $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ (BSCCO), $YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO), $Ba_{0.6}K_{0.4}BiO_3$ (KBBO), $Nd_{1.86}Ce_{0.14}CuO_4$ (NCCO) – продемонстрирован биполярный эффект резистивных переключений (БЭРП) [7, 8], возможность задания промежуточных состояний (пластичность) не была исследована. Особый интерес представляют изменения резистивного состояния мемристора по биологически правдоподобным алгоритмам [9], например LTP (долговременная способность к потенцированию), STDP (spike-timing-dependent plasticity) пластичность, зависящая от времени прихода импульсов или эффекта LIF (leaky integrate and fire) [10]. В биологических нейронных сетях обучение достигается через способность синапсов изменять вес, которым определяется эффективность связи нейронов (это свойство называется синаптической пластичностью). В данной связи основной целью настоящей работы было изучение пластичности мемристоров на основе YBCO, как типичном представителе СКЭС. Изучалась возможность регулирования резистивных метастабильных состояний мемристивных планарных структур на основе YBCO эпитаксиальных пленок по определенным протоколам импульсных исследований.

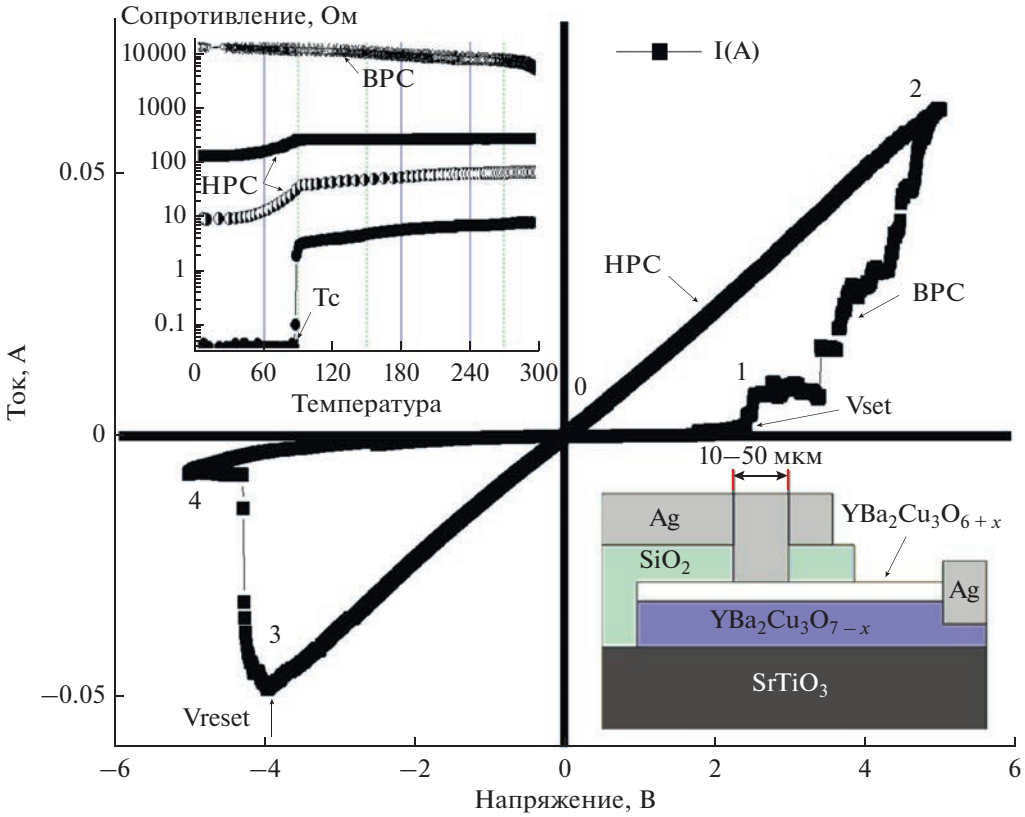


Рис. 1. Пример ВАХ гетероструктур планарного типа $Ag/YBa_2Cu_3O_{6+\delta}/YBa_2Cu_3O_{7-\delta}/STO$, выполненных методом фотолитографии. Развертка напряжения была по направлениям ветвей: 0-1-2-0-3-4-0. В правом нижнем углу показана схема структуры, сформированной литографией. В левом верхнем углу показана температурная зависимость сопротивления метастабильных фаз и резистивный переход пленки YBCO в сверхпроводящее состояние при Tc.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Пленки $YBa_2Cu_3O_7$ были получены методом импульсного лазерного напыления. В качестве подложек использовались монокристаллические пластины $SrTiO_3$ (STO) размерами 5 × 10 мм^2. Процедура получения пленок, создания гетероструктур ***планарного типа*** описана в работах [11, 12]. Мезаскопические гетероструктуры, были двух типов: первые – высокомные микроконтактного типа и вторые – создавались методом фотолитографии. Первые демонстрировали мемристивные свойства при ограничивающих токах порядка 6 мА, вторые – 10–20 мА. Микроконтактные переходы получали подведением металлической иглы в микроманипуляторе к поверхности “as grown” пленок, либо напыляли серебро через маску. Сформированная литографией структура $Ag/YBCO_6/YBCO_7/STO$, имела контактное окно 100 × 100 мкм^2 (схема на рис. 1) ($YBCO_6$ – диэлектрическая фаза, $YBCO_7$ – металлическая фаза). Полученные гетеропереходы исследовались на предмет обнаружения резистивных переключений, измерялись вольт-амперные характеристики (ВАХ), температурная зависимость сопротивления структур. Изменяя внешние параметры: частоту, величину напряжения электрического поля, прикладываемое к гетероконтакту, реализуются разные метастабильные состояния. Исследовались динамические эффекты, определялись времена переходов из одного метастабильного состояния в другое. Мы непосредственно исследовали изменение электродинамических свойств в процессе воздействия переменного электрического поля синусоидальной формы и импульсного режима, измеряя ВАХ и записывая осциллограммы тока и напряжения на гетероконтакте частотах 0.001–100000 Гц и температурные зависимости сопротивления метастабильных фаз; а также осциллограммы напряжения и тока на гетеропереходе при прохождении импульсов от 250 нс до 10 с. Для определения мемрезистивных свойств микроконтактных структур: таких как стабильность резистивного состояния (retention), выносливость по отношению к циклическим переключениям (endurance), пластичность зависящая от времени прихода импульсов SDTP (Spike-Timing-Dependent Plasticity), был использован (Memristor characterization platform) стенд Arc One [13, 14].

На рис. 1–6 показаны основные результаты работы. Рис. 1–2 демонстрируют примеры вольт-

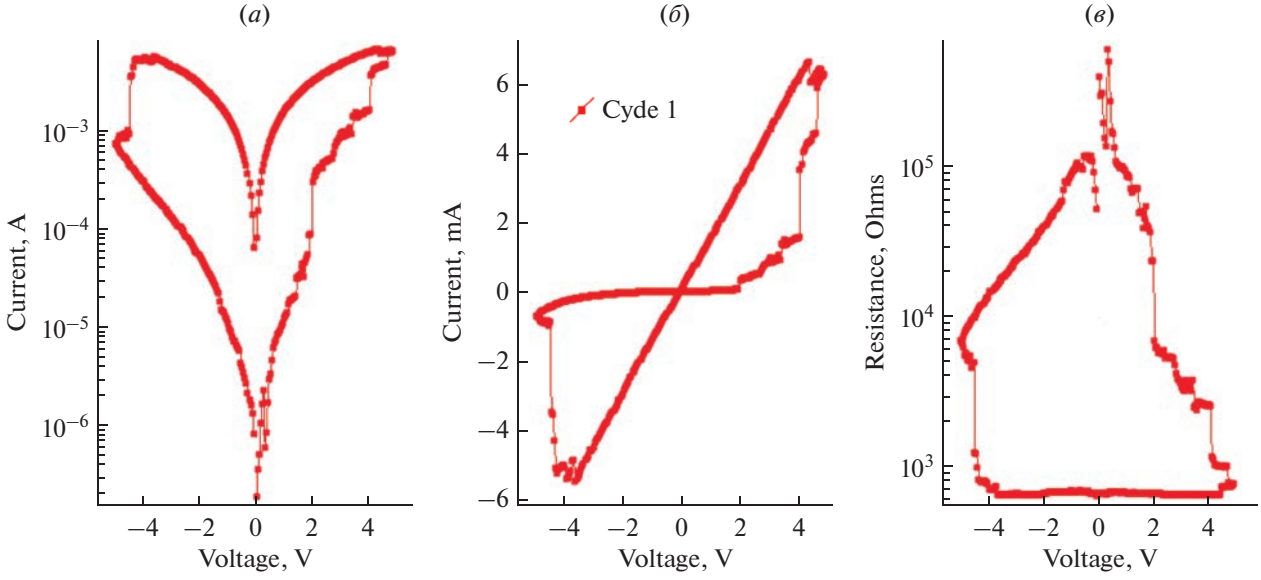


Рис. 2. Пример ВАХ микроконтактных гетероструктур $Ag/YBa_2Cu_3O_{6+\delta}/YBa_2Cu_3O_{7-\delta}/STO$.

амперных характеристикс с РП структур, полученных фотолитографией и микроконтактного типа. Изученные гетероструктуры стабильно демонстрируют эффект резистивного переключения порядка 100 циклов с отношением сопротивлений $R_{ВРС}/R_{НРС} \sim 5–1000$ при условии ограничения тока. При увеличении тока выше определенного предела структуры деградировали.

На рис. 1 показан пример ВАХ гетероструктур планарного типа $Ag/YBa_2Cu_3O_{6+\delta}/YBa_2Cu_3O_{7-\delta}/STO$, выполненных методом фотолитографии. Развертка напряжения была по направлениям ветвей: 0-1-2-0-3-4-0. В правом нижнем углу показана схема структуры, сформированной литографией. В левом верхнем углу показана температурная зависимость сопротивления метастабильных фаз и резистивный переход пленки YBCO в сверхпроводящее состояние при Tc.

Для эффекта переключений важной составляющей является высокорезистивное состояние (ВРС): ветвь ВАХ 4-0-1, Высокоомная ветвь ВАХ контактов имеет диодный характер. Формирование низкорезистивного состояния (НРС) происходит при напряжении Vset ветвь ВАХ 1-2. Низкорезистивное состояние ветвь ВАХ 2-0-3 Формирование высокорезистивного состояния происходит при напряжении V reset на ветви 3-4.

На рис. 2 представлена ВАХ высокомных гетероструктур микроконтактного типа $Ag/YBa_2Cu_3O_{6+\delta}/YBa_2Cu_3O_{7-\delta}/STO$, полученных на стенде Arc One.

На таких структурах были выполнены исследования при разных протоколах подачи импульсных сигналов с целю получения метастабильных многоуровневых состояний.

Протокол N1 (рис. 3, 4). Образец приведен в низкоомное состояние установочным 10-секундным импульсом с амплитудой 2 вольта, затем на него подаются серии измерительных импульсов амплитудой –2 вольта различной длительности. Образец при этом достигает одно из метастабильных высокоомных состояний.

Как видно из рис. 3, 4, требуется больше 4 импульсов длительностью 5 мс, чтобы получит первое метасабильноев высорезистивное состояние. Импульсом в 5 с структура полностью переходит из НРС в ВРС.

Протокол N2 (рис. 5) На образец подавалась последовательность из двух меандров – импульсы +, –, +, – без зазора, с амплитудой +4 и –4 вольта. После нескольких серий импульсов одной длительности проводилось измерение для перехода ВРС-НРС сопротивления на втором положительном импульсе (время 0 – переход от первого отрицательного импульса ко второму положительному).

Протокол N3 (рис. 6) На образец подавалась последовательность из двух меандров – импульсы +, –, +, – без зазора, с амплитудой +4 и –4 вольта. После нескольких серий импульсов одной длительности проводилось измерение для перехода НРС-ВРС сопротивления на втором отрицательном импульсе (время 0 – переход от второго положительного импульса ко второму отрицательному).

Как следует из данных представленных на рис. 5, 6 в импульсном режиме при переходах из НРС в ВРС наблюдаются задержки от 1 мс до десятка микросекунд.

Совокупность полученных данных позволяет сделать следующие выводы: сопротивление мемри-

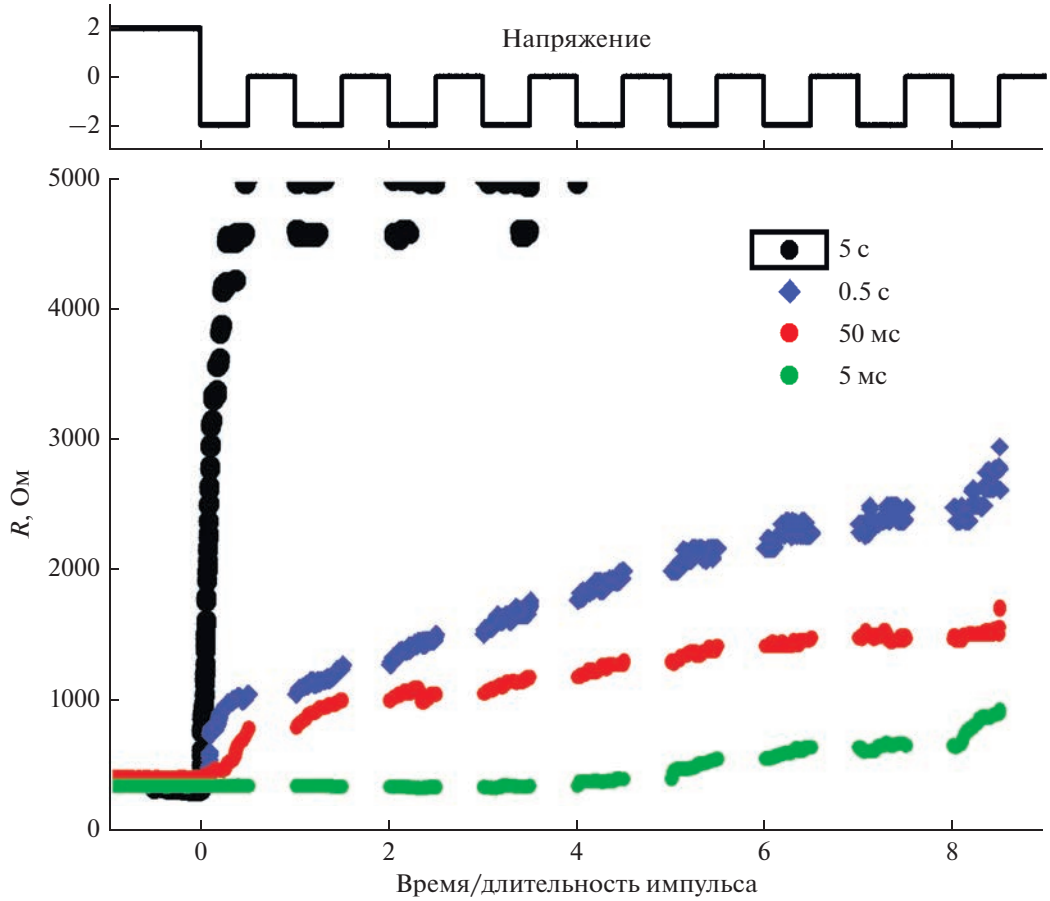


Рис. 3. Зависимость сопротивления метастабильных резистивных состояний от времени, нормированного на длительность импульса амплитуды 2 В при переходе от низкорезистиванного состояния (НРС) к высокорезистивному состоянию (ВРС).

стора на основе YBCO есть функция параметров: амплитуды, длительности и числа имнульсов.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, в работе установлены следующие факты:

1. Переключения носят ***пороговый*** характер. Наблюдается асимметрия и диодный характер ВАХ.

2. Время переключений зависят от амплитуды, длительности и числа импульсов.

3. В импульсном режиме наблюдаются три характерных времени задержки РП (рис. 6): $\Delta t_1 = 0.001$ с, $\Delta t_2 = 0.01$ с, $\Delta t_3 = 0.03$ с.

В наших предыдущих работах [11, 12, 15] показано, что ключевым фактором обратимого и воспроизводимого эффекта резистивных переключений в исследованных гетероструктурах является ВРС состояние, которое является полупроводниковым с локализованными носителями (вакансии кислорода). Высокоомная ветвь ВАХ контактов имеет диодный характер и аппроксимируется поведением двух противоположно направленных диодов [11, 16]. Пространственная неоднородность носителей приводит к полевому влиянию на потенциальный барьер в интерфейсе гетероструктур, демонстрирующих БЭРП. Полевой характер переключений косвенно подтверждается тем наблюдением, что в гетероструктурах с электродом микроконтатного типа переключения дают больший эффект отношения $R_{ВРС}/R_{НРС}$, так как в таких структурах может достигаться большая напряженность электрического поля. Переключения начинаются с некоторого порогового напряжения, величина эффекта зависит от площади верхнего контакта, от толщины слоя диэлектрика. Результаты данной работы доказывают, что медленный процесс порядка секунд формирует низкорезиствное состояние и видимо определяется электродиффузией кислорода (с последующим фазовым расслоением), которая проходит полный обратимый цикл при низких частотах. Известно, что интерфейс является деградированной по кислороду частью кристалла. Влияние деградации по кислороду на свойства YBCO исследовалось методами оже

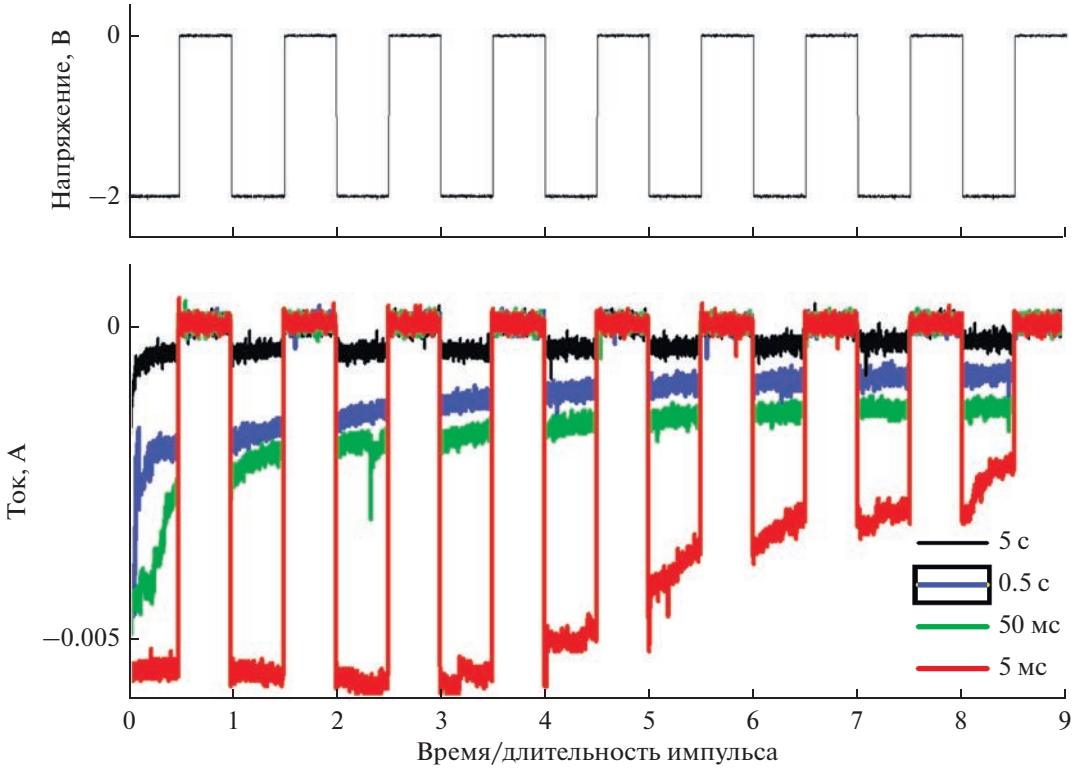


Рис. 4. Зависимость тока в мемристивной структуре от времени, нормированного на длительность импульсов амплитуды 2 В при переходе от НРС к ВРС.

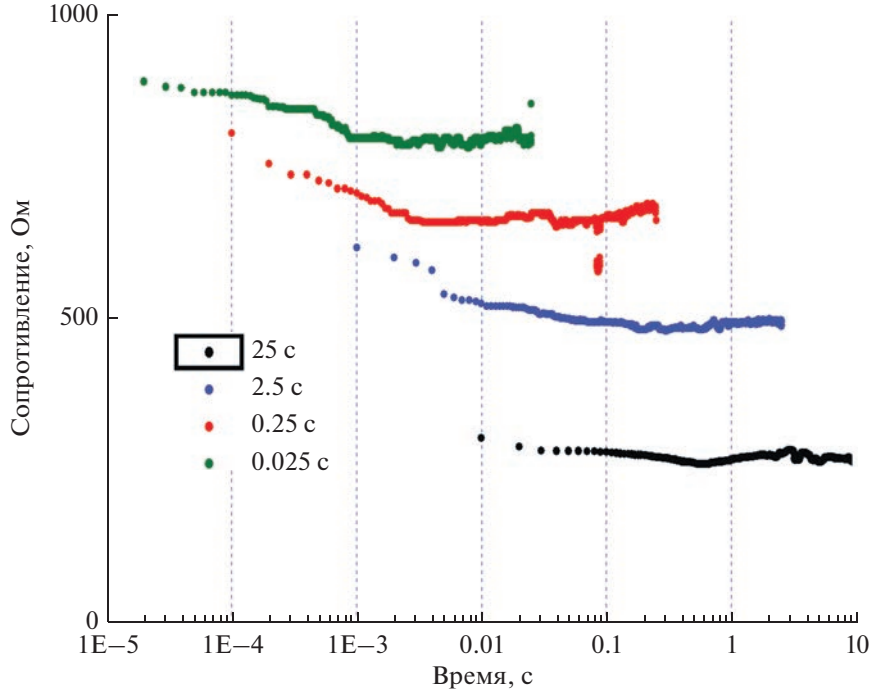


Рис. 5. Изменение сопротивления от времени во время положительного импульса (переход ВРС-НРС) при разных длительностях импульсов (Протокол2).

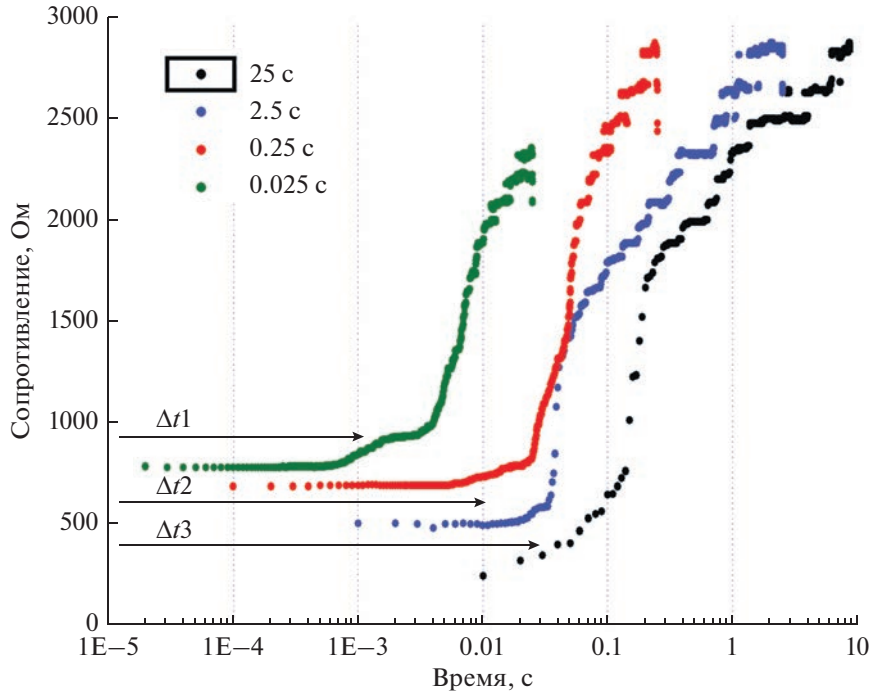


Рис. 6. Изменение сопротивления от времени при импульсных нагрузках разной длительности (переход НРС-ВРС) (Протокол3). Стрелками обозначены времена задержки перехода НРС-ВРС.

спектроскопии [9, 10] и было установлено, что толщина этого слоя равна примерно 30 Å. В результате поверхностный слой имеет пониженное по сравнению с объемом число носителей, то есть находится на стороне изолятора на фазовой диаграмме. И это есть макроскопическое фазовое расслоение по терминологии работы [17]. Приведенные в работе [18] результаты рентген-дифракционных исследований эпитаксиальных ориентированных пленок YBCO доказывают, что такое фазовое расслоение присутствует в исследуемых в данной работе пленках. В этом случае может осуществиться сценарий по модели Oka Nagaosi [19], в которой предполагается, что причина БЭРП в природе моттовского перехода на интерфейсе нормальный металл – СКЭС, где формируется двумерная структура: металл/зонный изолятор/металл/моттовский изолятор/СКЭС. Достижение критической напряженности электрического поля при развертке напряжения на структуре являться началом двух процессов: а) на краю контакта начинает формироваться (либо распадаться при обратной полярности электрического поля) домен с повышенной плотностью носителей (диэлектрический пробой), б) параллельно, при изменении конфигурации электрического поля идет медленный процесс электродиффузии подвижных ионов, формируются туннельные каналы на барьере. И от того насколько долго пройдет этот, будет зависеть конечное состояние структуры. В нашей предыдущей работе показано, что такой перколяционный канал образуется через цепочку разупорядоченных по кислороду доменов [18]. Анизотропия резистивных свойств с ориентированных пленок YBCO также оказывает сильное влияние на временные параметры ВАХ гетероструктур, демонстрирующих БЭРП, время переключения ВРС → НРС и НРС → ВРС существенно зависит от геометрических размеров структуры, анизотропии ее резистивных свойств, от величины приложенного напряжения. В работах [20, 21] было показано, что учет анизотропии резистивных и диффузионных свойств материала мемрезистивных гетероструктур приводит к радикальному изменению конфигурации электрического поля и формы проводящего канала в РП гетероконтактах планарного типа. Анизотропия материала создает значительные задержки на переходных характеристиках НРС → ВРС, которые могут быть связаны с формированием вокруг контакта протяженной области, в которой концентрация “подвижных” ионов кислорода имеет максимально возможное значение, в данном случае скорость переключения задается медленным преимущественно диффузионным переносом ионов на периферии этой области, а не их быстрым дрейфом в зоне контакта; возникает щелевая структура, которая определяет воспроизводимость РП [22]. Найденные времена задержки переходов НРС-ВРС характеризуют пластичность мемристивных свойств исследованных структур и по классификации работы [9] могут ин-

терпретироваться как эффекты LTP и использоваться в созданиии спайковых нейросетей (SNN).

Таким образом, мемристивные свойства YBCO структур определяют как моттовский характер этого класса соединений, который проявляется в существовании фазового расслоения на металлические и диэлектрические домены на границе фазового перехода металл – диэлектрик при определенном уровне допирования кислородом поверхностного слоя, так и с ионном транспортом кислорода к вакансиям, при этом модулируются барьерные свойства структур, образуются туннельные каналы [22].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя определенные протоколы импульсных испытаний. в работе исследованы и наблюдены эффекты LTP пластичности мемристивных структур на основе эпитаксиальных пленок $YBa_2Cu_3O_7$. Многоуровневый характер и возможность регулировать времена переключений характеризуют пластичность этих устройств в качестве элементов памяти для нейроморфных приложений в спайковых нейросетях.

Работа поддержана в части государственных заданий Института Физики твердого тела РАН, Института проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yang J. Joshua, Dmitri B. Strukov, Duncan R. Stewart.* Memristive devices for computing // Nature Materials. 2013. V. 8. P. 13.
2. *Wang C., Wu H., Gao B. et al.* // Conduction mechanisms, dynamics and stability in ReRAMs: Microelectron. Eng., 2018. V. 187–188. P. 121.
3. *Li Y., Wang Z., Midya R., Xia Q., Yang J.J.* Review of memristor devices in neuromorphic computing: materials sciences and device challenges // J. Phys. D. 2018. V. 51. P. 503002.
4. *Pérez-Tomás A.* Functional oxides: functional oxides for photoneuromorphic engineering: toward a solar brain // Adv. Mater. Interfaces. 2019. V. 6. P. 1970096.
5. *Mikhaylov A., Pimashkin A., Pigareva Y. et al.* CMOS-Integrated systems for biosensors and neuroprosthetics. Front Neurosciens. 2020. V. 14. P. 358.
6. *Websites of the International Technology Roadmap for SemicHPCductors and the Semiconductor Technology Roadmap*, https://www.semiconductors.org/wp-cHPCtent/uploads/2018/06/0_2015-ITRS-2.0-Executive-Report
7. *Tulina N.A., Ivanov A.A.* Memristive Properties of Oxide-based High-Temperature Superconductors // J. Supercond Nov. Magn. 2020. V. 33. P. 2279–2286.
8. *Тулина А.Н., Россоленко И.М., Шмытько А.А. и др.* Функциональные свойства анизотропных перовскитных соединений в мемристорных структурах для применения вэлектронике // Наноиндустрия. 2019. Т. 89. С. 237–240.
9. *Andy Thomas.* Memristor-based neural networks // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. P. 093001–093013.
10. *Stoliar P., Tranchant J., Corraze B. et al.* A Leaky-Integrate-and-Fire Neuron Analog Realized with a Mott Insulator // Adv. Funct. Mater. 2017. V. 27. P. 1604740.
11. *Tulina N.A., Rossolenko A.N., Ivanov A.A. et al.* $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}/Nd_{2-x}Ce_xO_y$boundary and resistive switchings in mesoscopic structures on base of epitaxial $Nd_{1.86}Ce_{0.14}CuO_{4-y}$ films. // Physica C: Superconductivity and its applications. 2016. V. 527. P. 41–45.
12. *Tulina N.A., Rossolenko A.N., Shmytko I.M. et al.* Properties of percolation channels in planar memristive structures based on epitaxial films of a $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ high temperature superconductor // Supercond. Sci. Technol. 2019. V. 32. P. 015003.
13. *Berdan R., Serb A., Khiat A. et al.* A controller-based system for interfacing selectorless RRAM crossbar arrays // IEEE Transactions on Electron Devices. 2015. V. 6. P. 2190.
14. *Serb A., Khiat A., Prodromakis T.* An RRAM Biasing Parameter Optimizer // IEEE Transactions HPC Electron Devices. 2015. V. 62. P. 3685–3691.
15. *Tulina N.A., Ivanov A.A., Rossolenko et al.* X-ray photoelectron spectroscopy studies of electronic structure of $Nd_{2-x}CexCuO_{4-y}$ and $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ epitaxial film surfaces and resistive switchings in high temperature superconductor-based heterostructures // Mater. Lett. 2017. V. 203. P. 97.
16. *Acha C.* Dynamical behaviour of the resistive switching in ceramic YBCO/metal interfaces // J. Phys. D: Appl. Phys. 2011. V. 44. P. 345301.
17. *Moreo A., Yunoki S., Dagotto E.* Phase separation scenario for manganese oxides and related materials // Science. 1999. V. 283. P. 2034–2040.
18. *Tulina N.A., Borisenko I.Yu., Shmytko I.M. et al.* The Study of Switching Dynamics in Planar Memristive Structures Based on Epitaxial Films of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ High-Temperature Superconductor // J. Superconductivity and Novel Magnetism. 2020. V. 33. P. 3695–3704.
19. *Oka T., Nagaosa N.* Interfaces of Correlated Electron Systems // Phys. Rev. Let. 2005. V. 95. P. 266403-4.
20. *Tulina N.A., Borisenko I.Yu.* Frequency Dependence of the Resistive Switching Effect in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$/Ag film Heterocontacts // Physics Letters A. 2008. V. 372. P. 918–923.
21. *Sirotkin V.V., Tulina N.A., Rossolenko A.N., Borisenko I.Yu.* Numerical Simulation of Resistive Switching in Heterostructures Based on Anisotropic Oxide Compounds // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2016. V. 80. P. 497–499.
22. *Tulina N.A., Shmytko I.M., Ivanov A.A. et al.* Memristive Properties of Manganite-Based Planar Structures // Russian Microelectronics. 2022. V. 51. № 5. P. 349–357.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 322–328

СЕНСОРЫ

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕНСОРНЫХ СВОЙСТВ УПОРЯДОЧЕННЫХ МАССИВОВ НАНОСТЕРЖНЕЙ ZnO ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ

© 2023 г. М. В. Евстафьева[a], *, М. А. Князев[a], В. И. Корепанов[a], А. Н. Редькин[a], Д. В. Рощупкин[a], Е. Е. Якимов[a]

[a]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, ул. Академика Осипьяна, 6, Черноголовка, 142432 Россия*

*****E-mail: ryzhova@iptm.ru*

Поступила в редакцию 04.04.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Оксид цинка – один из наиболее перспективных материалов, применяемых для создания приборов ультрафиолетового (УФ) диапазона. В настоящей статье исследованы сенсорные свойства упорядоченных массивов наностержней ZnO, выращенных методом химического осаждения из газовой фазы. Дана оценка их возможного применения в качестве индикатора УФ-излучения для контроля дозы УФ-излучения, как от естественных, так и от искусственных источников света. Данные рентгеновской дифракции, спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) и катодолюминесценции (КЛ) демонстрируют высокое качество наностержней. На основе массива наностержней ZnO был изготовлен прототип датчика, основанный на изменении проводимости ZnO под действием УФ-излучения. Сопоставление отклика такого датчика с показаниями УФ-радиометра показало высокую корреляцию.

Ключевые слова: массивы наностержней ZnO, широкозонный полупроводник, сенсорные свойства, УФ детекторы, фоточувствительность

DOI: 10.31857/S0544126923700436, **EDN:** HZVUIQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Ультрафиолетовое излучение является фактором, учет которого необходим для решения ряда задач промышленного, медицинского и экологического характера. В связи с этим растет интерес к датчикам УФ-излучения. УФ спектр солнечного света принято разделять на три диапазона: УФ-А (315–400 нм), УФ-В (280–315 нм) и УФ-С (100–280 нм) [1]. Когда солнечный свет проходит сквозь атмосферу, УФ-С лучи поглощаются атмосферой практически полностью, УФ-В лучи поглощаются озоном, парами воды, кислородом и углекислым газом примерно на 90%. На УФ-А лучи атмосфера влияет в меньшей степени. Поэтому ультрафиолетовое излучение, достигающее поверхности Земли, в основном состоит из УФ-А лучей и незначительного количества УФ-В.

Оксид цинка, как широкозонный полупроводник (ширина запрещенной зоны составляет 3.34 эВ при комнатной температуре [2]) с прямым межзонным переходом, вызывает повышенный интерес в связи с большим потенциалом для использования в качестве УФ и газовых сенсоров, светоизлучающих диодов, УФ лазеров и т.д. Воздействие УФ облучения оказывает сильное влияние на электропроводность оксида цинка. Это позволяет использовать пленки и наностержни ZnO в качестве резистивно-чувствительных материалов для УФ детекторов в УФ-А диапазоне с длинами волн 320–400 нм [3–5].

Массивы одномерных наноструктур оксида цинка, по сравнению с пленками, имеют большую площадь рабочей поверхности, а также более совершенную кристаллическую структуру, что обуславливает высокую чувствительность и быстродействие [6, 7].

В рамках настоящей работы было исследовано влияние ультрафиолетового излучения на сенсорные характеристики оксида цинка. Была исследована возможность применения массивов упорядоченных наностержней оксида цинка в качестве индикатора ультрафиолетового излучения для контроля дозы УФ-излучения, как от естественных, так и от искусственных источников света.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Массивы упорядоченных наностержней оксида цинка были получены методом газофазного синтеза. Синтез проводили в проточном двухзон-

ном кварцевом реакторе. Лодочку с гранулированным цинком высокой чистоты (99.99%) помещали в первую зону (зона испарения), а во вторую зону (зона роста) – подложки. В качестве подложек использовались Si (100), плавленый кварц и стеклянные пластины. Синтез проводили при пониженном давлении в условиях непрерывной откачки. Давление в реакторе поддерживали на уровне 10^3 Па. Процесс проводили при температурах 610 и 550°C в зонах испарения и роста, соответственно. Во время процесса цинк испарялся в первой зоне, пары цинка поступали во вторую более холодную зону, где они частично конденсировались, образуя однородный массив нанокапель цинка на подложках. Главной особенностью данного процесса является то, что в отличие от обычного газофазного процесса "пар-жидкость-кристалл" (ПЖК), в котором в качестве катализатора используется благородный металл (чаще золото), катализатор не требуется, а процесс является самокаталитическим. Далее, когда смесь кислорода и аргона (15% O_2) попадала в зону роста, происходило взаимодействие кислорода с жидким цинком. Образовавшийся оксид растворяется в капле цинка, образуя пересыщенный раствор, из которого твердый ZnO кристаллизуется на границе раздела металл/подложка. В результате реакции цинка с кислородом на подложке происходил направленный рост нанокристаллов оксида цинка под каплями цинка. Газовая смесь подавалась в реактор со скоростью 4.4 л/ч. Синтез проводили в течение 20–30 мин при расходе цинка 12–15 г/ч.

Для исследования формы и морфологии поверхности наноструктур проводили электронно-микроскопическое исследование с помощью растрового электронного микроскопа ZEISS EVO 50. Выбранные для исследования образцы представляли собой стеклянные подложки размером 5 × 20 мм, покрытые с одной стороны поликристаллической пленкой с вертикально ориентированными наностержнями на поверхности. Толщина пленки составляла 8–10 мкм. Примерно такой же была высота наностержней. Средний диаметр отдельных наностержней равнялся примерно 0.15–0.25 мкм. Плотность наностержней в массиве по данным растровой электронной микроскопии составляла примерно 4×10^8 см$^{-2}$.

Кристалличность массива наностержней ZnO исследовали методом рентгеновской дифрактометрии в схеме двухкристального рентгеновского дифрактометра на лабораторном источнике рентгеновского излучения BRUKER D8 Discover с вращающимся медным анодом (излучение $CuK_{\alpha 1} = 1.54$ Å).

КР спектры образцов исследовали на микроскопе Bruker Sentera micro-RAMAN при возбуждении твердотельным лазером с длиной волны 532 нм.

Спектры катодолюминесценции регистрировали в растровом электронном микроскопе JSM 6490 с системой для катодолюминесценции MonoCL3, включающей собирающее зеркало, монохроматор и фотоумножитель фирмы Hamamatsu со спектральным диапазоном 185–850 нм. Спектры регистрировали при возбуждении импульсным пучком электронов с различной энергией от 10 до 30 кэВ и максимальным током 2 нА. Возбуждающий пучок был направлен перпендикулярно поверхности образца.

Измерение электрофизических характеристик массивов наностержней ZnO проводили следующим образом. Образцы отжигали при температуре 550°C на воздухе в течение 3 ч, затем выдерживали в темноте в течение нескольких часов. В качестве контактов использовали индиевые контакты на кварцевой пластине, которые представляли собой две параллельные полоски металла шириной 3 мм и расстоянием между ними 10 мм, к которым образец прижимался с помощью пружины. Согласно литературным данным, индий образует омические контакты с оксидом цинка [8]. Кроме того, благодаря исключительной мягкости и пластичности, индий идеально подходит для прижимных контактов. Особенностью данной конструкции является то, что измеряемый ток между контактами проходит по поликристаллической пленке (подслою) ZnO в латеральном направлении, а чувствительные к УФ свету наностержни ZnO расположены вертикально сверху и контактируют с этой пленкой только с одной стороны.

С помощью источника питания (APS-1333 от АКТАКОМ) на образец подавали напряжение 10 В. Ток измеряли с помощью мультиметра (АМ 1109 от АКТАКОМ) и регистрировали с помощью компьютерной программы через каждые 5 с. Для оценки сенсорных характеристик изучалась кинетика изменения электропроводности образцов от времени при периодическом включении и выключении УФ облучения лампой ЛУФ-4 с максимумом излучения около 370 нм и плотностью светового потока на расстоянии 10 см равной 4 Вт/м^2. Время включения и выключения УФ лампы составляло 10 мин.

Для оценки энергетической освещенности ультрафиолетового излучения в УФ-А диапазоне использовали УФ-радиометр "ТКА-ПКМ" (12). Оценку интенсивности ультрафиолетового освещения солнца проводили путем сравнения изменения электропроводности в течение 1 и 10 ч, и показаний УФ радиометра в УФ-А области спектра. Чем выше солнце над горизонтом, тем выше интенсивность УФ-излучения. Таким образом, УФ-излучение различается как в течение дня, так и в течение года, а максимальные уровни будут отмечаться тогда, когда солнце находится в зените, т.е. примерно в полдень в течение летних месяцев.

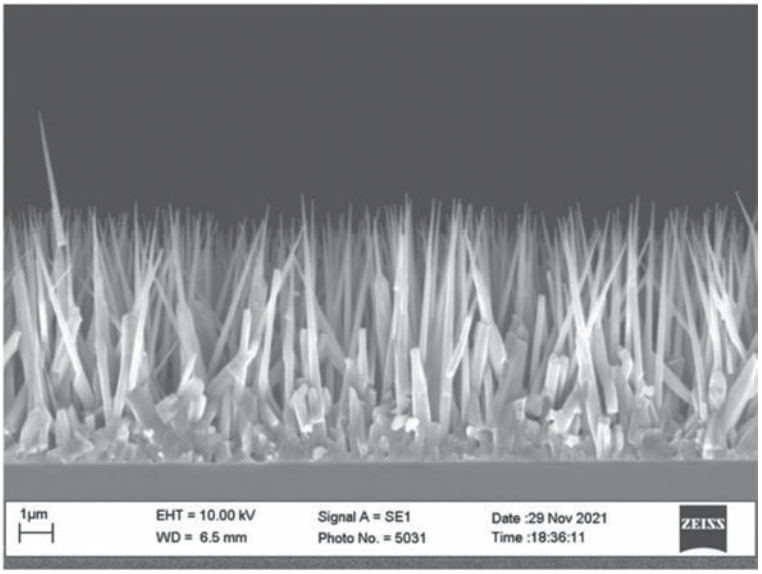


Рис. 1. Типичное РЭМ-изображение поперечного скола массива наностержней ZnO длиной около 10 мкм.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Типичное электронно-микроскопическое изображение (РЭМ) поперечного скола полученных массивов наностержней оксида цинка приведено на рис. 1. Видно, что наностержни ориентированы перпендикулярно подложке.

На дифрактограммах упорядоченных массивов наностержней ZnO видны только рефлексы (002) и (004) (рис. 2), что подтверждает направление роста вдоль кристаллографической оси *c*. Ширина на полувысоте указанных пиков составляет величину 0.12°–0.15° (см. вставку на рис. 2). Это свидетельствует о том, что наностержни имеют идеальную кристаллическую структуру и хорошо ориентированы.

Высокое кристаллическое качество наностержней ZnO подтверждается также спектрами комбинационного рассеяния (КР) света и катодолюминесценции. На рис. 3 приведен спектр КР массива наностержней ZnO. Из литературных данных известно, что низкочастотная мода E_2(low) в основном связана с неполярными колебаниями более тяжелой подрешетки атомов Zn, а высокочастотная мода E_2(high) в основном связана со смещением более легких атомов кислорода. Моды A_1 и E_1 разделены на продольную (LO) и поперечную (TO) оптические компоненты. За исключением мод LO, все активные фононные КР моды четко идентифицируются в измеренном спектре. Полная ширина на половине высоты и положение пиков E_2(low) и E_2(high) сопоставимы со значениями для объемных монокристаллов ZnO [9].

В спектре фотолюминесценции (ФЛ) массива наностержней ZnO (рис. 4) доминирует узкая полоса экситонного излучения в коротковолновой части спектра с максимумом ~384 нм. Присутствует также небольшая широкая полоса люминесценции с максимумом ~500 нм в видимом диапазоне. Излучение в видимом диапазоне обычно связывают с вакансиями цинка, кислорода и другими точечными дефектами [10]. Низкая интенсивность видимого излучения (примерно на 3–4 порядка меньше, чем УФ) свидетельствует о высоком структурном качестве полученных нанокристаллов и низком содержании точечных дефектов.

В данной работе была исследована возможность применения массивов упорядоченных наностержней оксида цинка в качестве индикатора ультрафиолетового излучения для контроля дозы УФ-излучения, как от естественных, так и от искусственных источников света.

Для оценки сенсорных характеристик изучалась кинетика изменения электропроводности образцов от времени при облучении УФ-излучением в течение 10 мин и помещении образцов в темноту на 10 мин. С таким периодом измерения проводились в течение 90 мин. Предварительно образцы отжигали на воздухе при $T = 600$°C в течение 3 ч. Как показано в работе [11], последующий отжиг может существенно улучшить характеристики фотодетекторов. Ранее нами было показано, что отжиг на воздухе приводит к уменьшению на 3 порядка как темнового тока, так и тока при облучении [12]. Однако темновой ток уменьшается существенно больше. За счет этого чувствительность к УФ свету после отжига возрастает в 2–3 раза. Известно, что нелегированный ZnO является полупроводником *n*-типа. Считается, что электронная проводимость обусловлена наличием вакансий кислорода и междоузельного Zn. Отжиг широкозонных полупроводников приводит к пере-

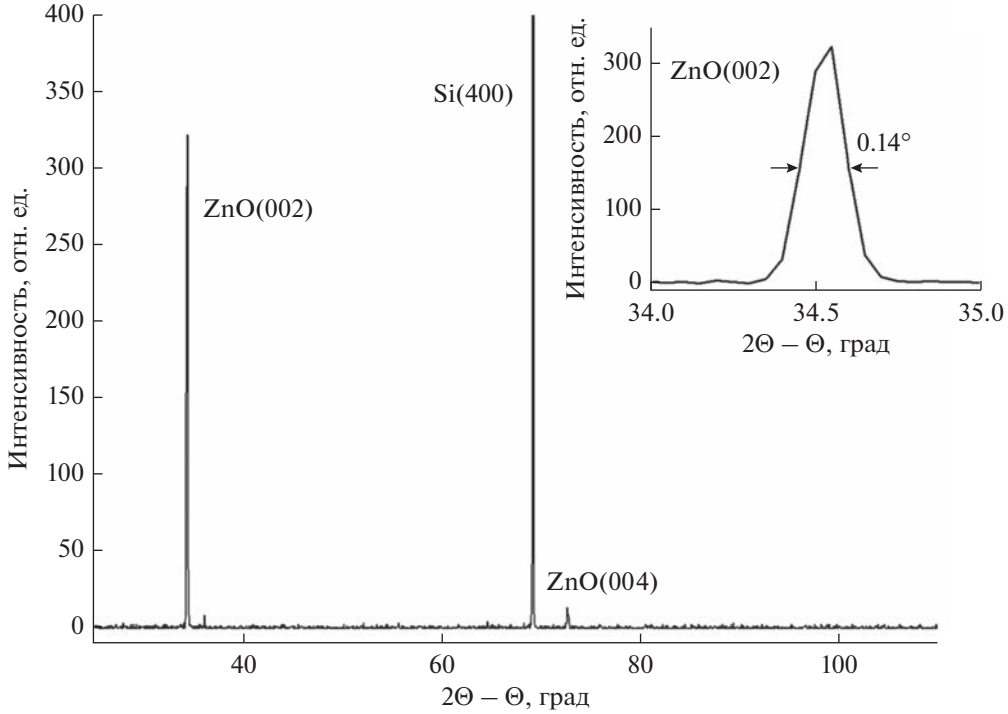


Рис. 2. Дифрактограмма упорядоченного массива наностержней ZnO, выращенного на стеклянной подложке. На вставке – пик рефлекса (002) в увеличенном масштабе.

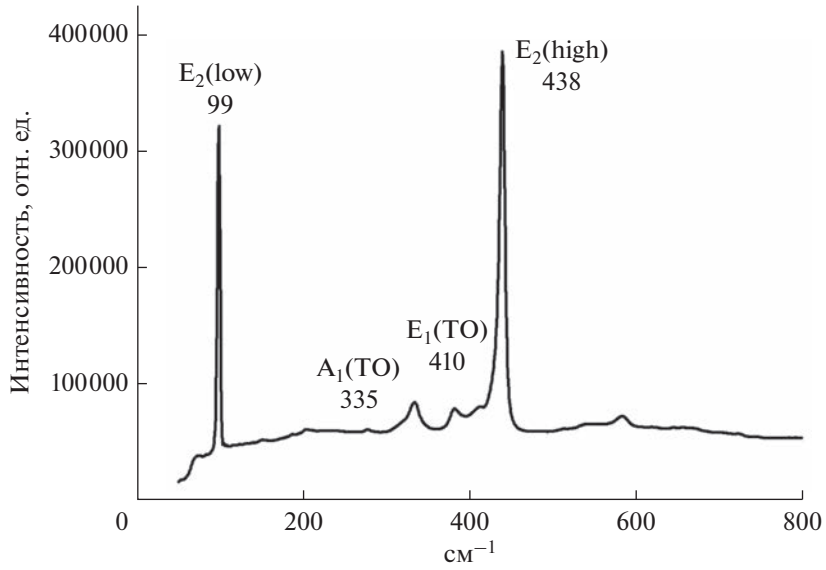


Рис. 3. Спектр КР массива упорядоченных наностержней ZnO на стеклянной подложке.

распределению собственных дефектов, в результате чего меняются свойства материалов [13]. Перед измерением временной зависимости электропроводности при облучении УФ-излучением, образцы были выдержаны в темноте в течение нескольких часов. На рис. 5 приведено сравнение временных зависимостей электропроводности массива наностержней на поликристаллическом подслое при периодическом облучении УФ лампой (кривая *1*) и естественным солнечным светом (кривая *2*). Время отклика и восстановления определялось как время достижения величины тока равной 90% от предельного значения [14]. При облучении массива наностержней ZnO УФ лампой, эти значе-

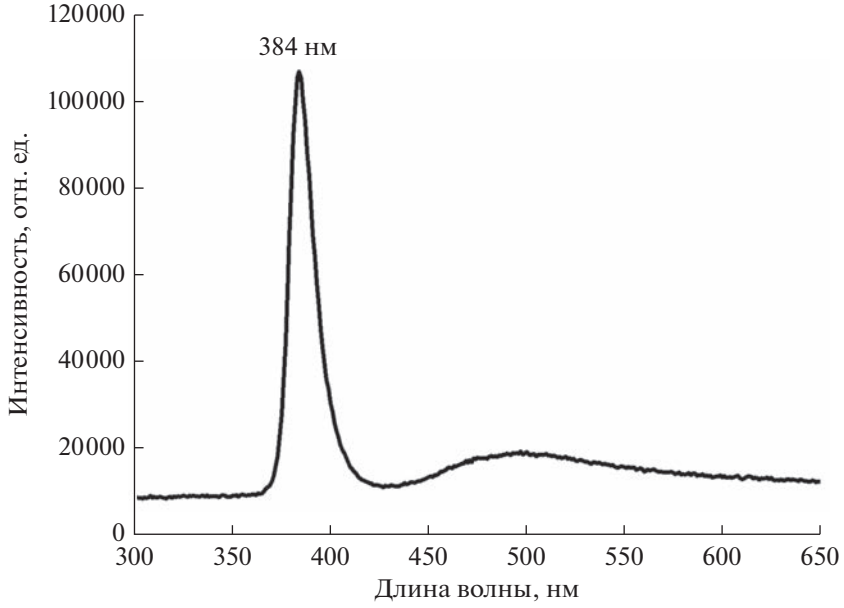


Рис. 4. Спектр ФЛ массива наностержней ZnO.

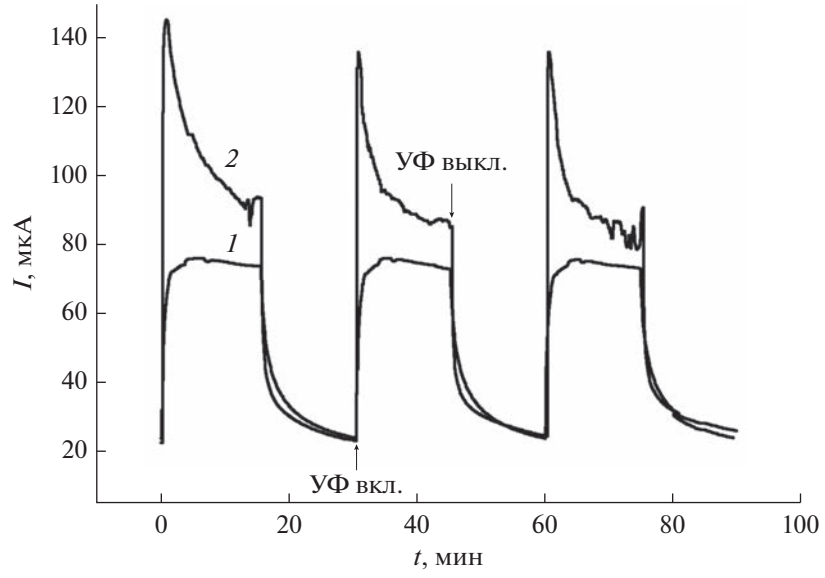


Рис. 5. Кинетика изменения электропроводности массива наностержней оксида цинка от времени при периодическом облучении УФ лампой (кривая *1*) и солнечным излучением (кривая *2*).

ния составляли 0.25 и 4.5 мин, соответственно. Время отклика и восстановления при облучении солнечным светом составляло 0.15 и 4.52 мин, соответственно.

Рассмотрим возможные механизмы процессов, происходящих в образцах. Как известно из литературных данных, в сухой атмосфере фоточувствительность ZnO главным образом определяется адсорбцией и десорбцией молекул кислорода на поверхности [7, 15]. В темноте молекулы кислорода адсорбируются на поверхности оксида цинка, в результате чего уменьшается плотность носителей заряда в наностержнях из-за захвата свободных электронов молекулами кислорода, а также уменьшается концентрация оставшихся носителей заряда из-за образования обедненной области вблизи поверхности. Этот процесс приводит к изгибу энергетической зоны около поверхности. Из-за большого поверхностно-объемного отношения, адсорбция кислорода значительно уменьшает проводимость наностержней. Под воздействи-

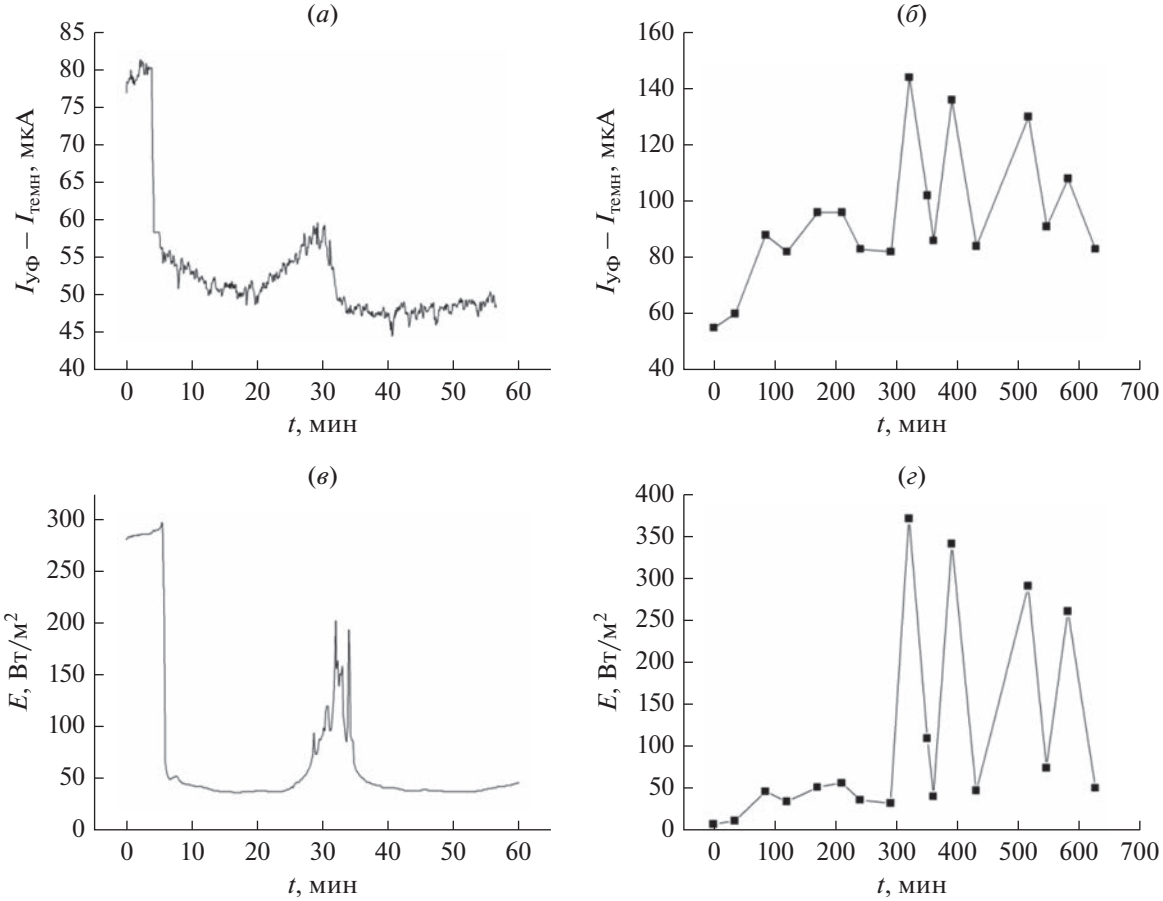


Рис. 6. Изменение электропроводности от времени облучении сенсора солнечным излучением: *а*) в течение 1 ч, *б*) в течение 10 ч; изменение энергетической освещенности в диапазоне УФ-А спектра солнечного света: *в*) в течение 1 ч, *г*) в течение 10 ч.

ем УФ-излучения происходит генерация электронно-дырочных пар. Образовавшиеся дырки мигрируют к поверхности и захватываются молекулами кислорода $\left(O_2^-\right)$ с образованием нейтральных молекул, которые десорбируются с поверхности наностержней. Через некоторое время после начала облучения, плотность дырок становится намного меньше плотности электронов в нанопроволоках. Обедненная область практически полностью исчезает, и изгиб энергетической зоны уменьшается. При выключении облучения протекает обратный процесс рекомбинации с адсорбцией молекул кислорода на поверхности.

На графиках зависимостей электропроводности от времени при облучении УФ-излучением (рис. 5) первоначально наблюдается резкий рост фототока, затем медленный спад. В работах [16, 17] данное явление связывают с высокой влажностью окружающей среды. Во влажной атмосфере на фоточувствительность помимо молекул кислорода влияет адсорбция молекул воды на поверхности. В темноте молекулы воды частично замещают адсорбированный и ионизированный кислород. Адсорбированная на поверхности вода представляет собой периодическую структуру из двух молекул воды, одна из которых диссоциирует. Диссоциированные молекулы воды (OH^-) имеют более прочную химическую связь с поверхностью оксида цинка, а недиссоциированные молекулы воды и кислорода – физическую. Диссоциированные молекулы воды захватывают электроны и дырки, генерируемые УФ-излучением, уменьшая плотность носителей и создавая обедненный слой, что приводит к постепенному затуханию тока.

Оценку интенсивности ультрафиолетового освещения солнца проводили путем измерения временной электропроводности массива упорядоченных наностержней ZnO в течение 1 и 10 ч. Одновременно для сравнения и оценки изменения интенсивности использовали показания радиометра. В темноте показания радиометра равны нулю, поэтому в зависимостях сделали поправку фототока на величину темнового тока ($I_{уф} - I_{темн}$). Данные зависимости приведены на рис. 6. Из графиков видно, что при облачной погоде происхо-

дит изменение фототока и энергетической освещенности в УФ-А диапазоне солнечного излучения. Когда облако закрывает солнце, наблюдается резкое уменьшение энергетической освещенности в УФ-А диапазоне и фототока.

Показания радиометра определенным образом коррелируют с изменением электропроводности образца. Коэффициент корреляции *r*-Пирсона для данных графиков составляет 0.90 и 0.93 для измерений в течение 1 и 10 ч, соответственно. Такие значения свидетельствуют о высокой степени корреляции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Массивы наностержней оксида цинка, выращенные методом газофазного осаждения, обладают высокой степенью кристалличности (по данным спектроскопии КР и катодолюминесценции) и выраженной кристаллографической ориентацией (по данным рентгеновской дифракции). На их основе был изготовлен прототип датчика, основанный на изменении проводимости ZnO под действием УФ-излучения. Сопоставление отклика такого датчика с показаниями УФ-радиометра показывает высокую корреляцию. Таким образом, можно сделать вывод о том, что массивы упорядоченных наностержней оксида цинка можно использовать в качестве датчика ультрафиолетового излучения.

Работа выполнена в рамках госзадания № 075-01304-23-00.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Altmeyer P., Hoffmann K., Stücker M., Freitag M.* Skin Cancer and UV Radiation. Springer; 1997.
2. *Özgür Ü., Alivov Y.I., Liu C., Teke A., Reshchikov M.A., Doğan S. et al.* A comprehensive review of ZnO materials and devices // J. Applied Physics. 2005. P. 041301. https://doi.org/10.1063/1.1992666
3. *Yi F., Liao Q., Yan X., Bai Z., Wang Z., Chen X. et al.* Simple fabrication of a ZnO nanorod array UV detector with a high performance // Physica E Low Dimens Syst Nanostruct. 2014. V. 61. P. 180–184.
4. *Rodwihok C., Choopun S., Ruankham P., Gardchareon A., Phadungdhitidhada S., Wongratanaphisan D.* UV sensing properties of ZnO nanowires/nanorods // Applied Surface Science. 2019. P. 159–165. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.11.056
5. *Sang L., Liao M., Sumiya M.* A comprehensive review of semiconductor ultraviolet photodetectors: from thin film to one-dimensional nanostructures // Sensors. 2013. V. 13. P. 10482–10518.
6. *Wei A., Pan L., Huang W.* Recent progress in the ZnO nanostructure-based sensors // Materials Science and Engineering: B. 2011. P. 1409–1421. https://doi.org/10.1016/j.mseb.2011.09.005
7. *Kushwaha A., Aslam M.* Defect induced high photocurrent in solution grown vertically aligned ZnO nanowire array films // J. Applied Physics. 2012. P. 054316. https://doi.org/10.1063/1.4749808
8. *Reddy N.K., Ahsanulhaq Q., Kim J.H., Devika M., Hahn Y.B.* Selection of non-alloyed ohmic contacts for ZnO nanostructure based devices // Nanotechnology. 2007. V. 18. P. 445710.
9. *Serrano J., Manjón F.J., Romero A.H., Widulle F., Lauck R., Cardona M.* Dispersive phonon linewidths: the E2 phonons of ZnO // Phys Rev Lett. 2003. V. 90. P. 055510.
10. *McCluskey M.D.* Defects in ZnO. Defects in Advanced Electronic Materials and Novel Low Dimensional Structures. 2018. P. 1–25. https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102053-1.00001-6
11. *Shasti M., Dariani R.S.* Study of growth time and post annealing effect on the performance of ZnO nanorods ultraviolet photodetector // J. Applied Physics. 2017. P. 064503. https://doi.org/10.1063/1.4975674
12. *Redkin A.N., Yakimov E.E., Evstafieva M.V., Yakimov E.B.* Grown and characterization of ZnO aligned nanorod arrays for sensor applications // Energies. 2021. V. 14. P. 3750.
13. *Hullavarad S., Hullavarad N., Look D., Claflin B.* Persistent Photoconductivity Studies in Nanostructured ZnO UV Sensors. Nanoscale Research Letters. 2009. https://doi.org/10.1007/s11671-009-9414-7
14. *Al-Asadi A.S., Henley L.A., Ghosh S., Quetz A., Dubenko I., Pradhan N. et al.* Fabrication and characterization of ultraviolet photosensors from ZnO nanowires prepared using chemical bath deposition method // J. Appl. Phys. 2016. V. 119. P. 084306.
15. *Barbagiovanni E.G., Strano V., Franzò G., Crupi I., Mirabella S.* Photoluminescence transient study of surface defects in ZnO nanorods grown by chemical bath deposition // Applied Physics Letters. 2015. P. 093108. https://doi.org/10.1063/1.4914067
16. *Li Y., Della Valle F., Simonnet M., Yamada I., Delaunay J.-J.* Competitive surface effects of oxygen and water on UV photoresponse of ZnO nanowires // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 94. P. 023110.
17. *Li Y., Della Valle F., Simonnet M., Yamada I., Delaunay J.-J.* High-performance UV detector made of ultra-long ZnO bridging nanowires // Nanotechnology. 2009. V. 20. P. 045501.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 329–335

ТЕХНОЛОГИИ

УДК 621.793.1

ВЛИЯНИЕ МОЩНОСТИ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ НА ОСАЖДЕНИЕ ПЛЕНОК ITO ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

© 2023 г. А. В. Саенко[a], *, З. Е. Вакулов[a], В. С. Климин[a], Г. Е. Билык[a], С. П. Малюков[a]

[a] *Институт нанотехнологий электроники и приборостроения, Южный федеральный университет, ул. Шевченко, 2, Таганрог, 347928 Россия*

**E-mail: avsaenko@sfedu.ru*

Поступила в редакцию 16.03.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Методом магнетронного распыления в режиме средних частот (MF) получены пленки ITO на стеклянных подложках при комнатной температуре в бескислородной среде. Проведено исследование влияния мощности магнетронного распыления на электрофизические свойства и морфологию поверхности пленок ITO. Показано, что скорость осаждения пленки ITO линейно зависит от мощности магнетронного распыления в режиме MF. Получено, что пленки ITO имеют преимущественно нанокристаллическую структуру при мощности магнетронного распыления больше 100 Вт. Увеличение мощности распыления приводит к возрастанию шероховатости поверхности от 13.5 до 24.6 нм и размера зерен от 11.7 до 27.5 нм в пленке ITO. Минимальное удельное сопротивление пленок ITO составило 6.82×10^{-4} Ом см при концентрации и подвижности носителей заряда 2.48×10^{20} см$^{-3}$ и 36.8 см^2/В с, которое соответствует оптимальной мощности магнетронного распыления 200 Вт. Полученные результаты соответствуют высокому уровню значений поверхностного сопротивления для пленок ITO (34.1 Ом/□), которые могут использоваться при формировании прозрачных проводящих электродов в солнечных элементах и мемристорах, как на стеклянной, так и на гибкой подложках.

Ключевые слова: пленка ITO, магнетронное распыление, мощность, шероховатость поверхности, удельное сопротивление

DOI: 10.31857/S0544126923700394, **EDN:** IAWXYW

1. ВВЕДЕНИЕ

Прозрачные проводящие оксидные пленки с высоким оптическим пропусканием (более 80%) в видимом диапазоне длин волн и низким удельным электрическим сопротивлением (порядка 10^{-4} Ом см) широко применяются в качестве электродов в различных устройствах, таких как солнечные элементы, мемристоры, светоизлучающие диоды, газовые датчики и жидкокристаллические дисплеи [1–3]. Легированный оловом оксид индия (In_2O_3:Sn, ITO) обладает уникальным сочетанием высокой проводимости, оптической прозрачности и является широкозонным вырожденным полупроводником n-типа с высокой концентрацией и подвижностью носителей заряда. Высокая проводимость пленок ITO достигается увеличением концентрации легирующей примеси, которая ограничивается растворимостью примеси в основном материале (порядка 10^{21} см$^{-3}$), при сохранении достаточно высокой подвижности носителей заряда. Подвижность носителей, в свою очередь, зависит от размера зерен, шероховатости поверхности и наличия дефектов в пленке [1].

Для формирования пленок ITO применяются такие методы, как импульсное лазерное осаждение, осаждение из газовой фазы, термическое или магнетронное распыление и золь-гель метод. Метод магнетронного распыления имеет ряд преимуществ, таких как высокая скоростью осаждения, долговременная стабильность процесса, возможность точного управления параметрами растущей пленки и отсутствие высоких температур подложки [3–6]. Проблема управления электрофизическими и структурными свойствами пленок ITO при магнетронном распылении по-прежнему остается актуальной из-за большого количества влияющих параметров осаждения, в частности мощности распыления, давления газа и температуры подложки [5].

В настоящее время существенно возрастает интерес к низкотемпературному распылению на стеклянную или полимерную (полиэтилентерефталат) подложки при комнатной температуре в бескислородной среде для снижения теплового

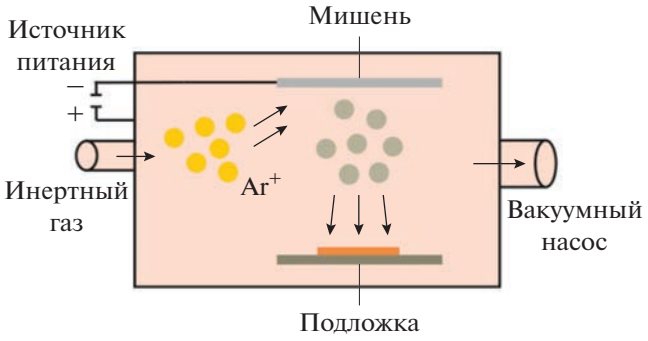


Рис. 1. Схема установки магнетронного распыления в режиме MF.

воздействия и окисления поверхности материала подложки [2, 7–9].

Электрофизические свойства пленок в основном определяются их структурой и морфологией поверхности. Улучшение однородности и структуры пленки возможно за счет использования магнетронного распыления в режиме средних частот (MF), что связано с энергетическим воздействием на растущую пленку [10]. Модуляция рабочего напряжения вызывает изменение параметров плазмы магнетронного разряда. Импульсное питание увеличивает концентрацию плазмы и температуру электронов в области подложки, при этом поток ускоренных частиц, бомбардирующих подложку, возрастает, и, тем самым, создаются условия для получения качественных проводящих пленок ITO при низких температурах подложки. Частота импульсов в режиме MF обычно находится в диапазоне 1–100 кГц. Коэффициент заполнения, который определяется как длительность отрицательного импульса, разделенная на период, составляет обычно менее 65–70%, что препятствует дугообразованию на поверхности катода даже при длительной работе магнетрона [2, 11].

В данной работе исследовалось влияние мощности магнетронного распыления в режиме средних частот (MF) при комнатной температуре в бескислородной среде на электрофизические свойства и морфологию поверхности пленок ITO для применения в солнечных элементах и мемристорах, в том числе на гибкой подложке.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Пленки ITO были получены на стеклянных подложках при работе магнетрона в импульсном режиме со средней частотой 100 кГц и коэффициентом заполнения 43% (режим MF) при комнатной температуре (20°C) в бескислородной среде на установке VSE-PVD-DESK-PRO (ООО “АкадемВак”). Использование MF режима позволяет минимизировать искрение и дугообразование на катоде-мишени, что приводит к улучшению стабильности процесса и однородности пленки [10, 11]. Схема установки магнетронного распыления в режиме MF представлена на рис. 1.

Стеклянные подложки перед осаждением очищались с помощью изопропанола и дистиллированной воды в ультразвуковой ванне в течении 10 мин. Распыляемая мишень представляла собой сплав 90% In_2O_3 и 10% SnO_2 (чистота 99.95%) и имела диаметр 76.2 мм и толщину 6 мм. Расстояние между мишенью и подложкой составляло около 70 мм. Перед напылением вакуумная камера откачивалась до 2×10^{-4} мбар, а затем заполнялась газообразным аргоном высокой чистоты (99.998%). Ми-

Таблица 1. Параметры магнетронного распыления в режиме MF

Параметр	Величина
Мощность	100–250 Вт
Время осаждения	2–6 мин
Остаточное давление	2×10^{-4} мбар
Мишень	ITO с 90% In_2O_3 и 10% SnO_2
Диаметр мишени	76.2 мм
Температура	20°C
Подложка	Стекло
Расстояние между мишенью и подложкой	70 мм
Давление аргона	2×10^{-3} мбар

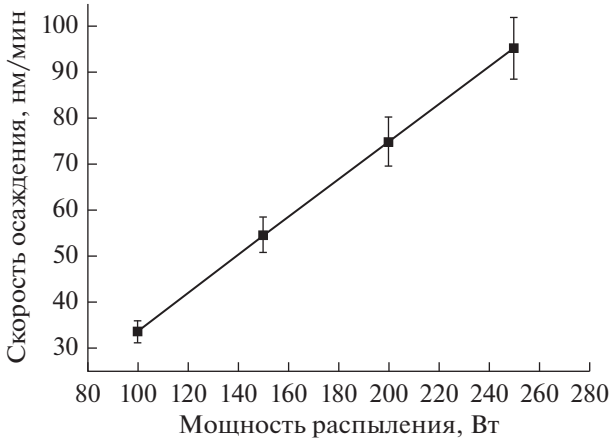


Рис. 2. Зависимость скорости осаждения пленки ITO от мощности магнетронного распыления в MF режиме.

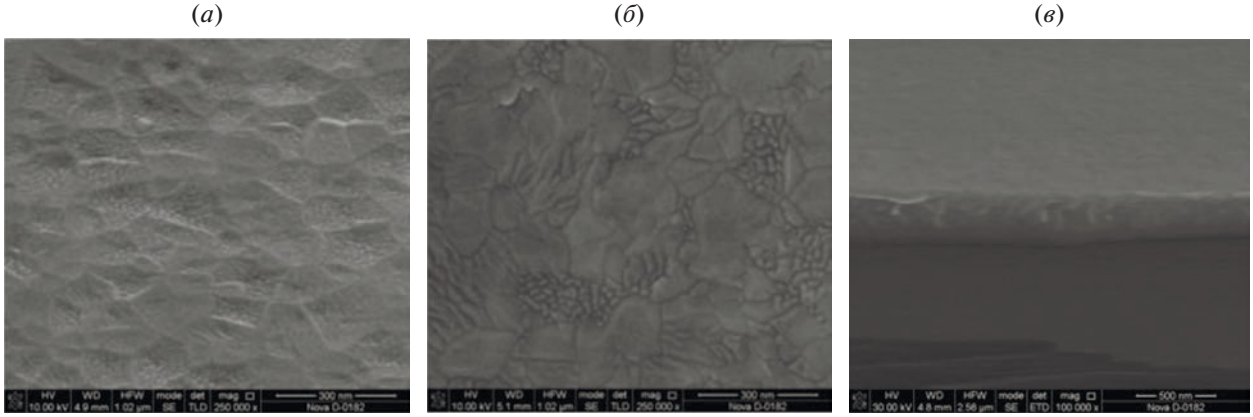


Рис. 3. РЭМ-изображения пленок ITO: поверхность пленки при мощности распыления 100 и 250 Вт (*а*), поперечный скол пленки толщиной 207 нм (*б*).

шень предварительно распылялась в течение не менее 5 мин для удаления загрязнений с ее поверхности. Мощность распыления варьировалась от 100 до 200 Вт, а рабочее давление аргона составляло 2×10^{-3} мбар (табл. 1). Время осаждения варьировалось от 2 до 6 мин, при котором толщина экспериментальных образцов пленок ITO составляла порядка 200 нм.

Измерение толщины пленок ITO осуществлялось с помощью профилометра Alpha-Step D-100 (KLA-Tencor), который позволяет проводить сканирование поверхности образца в двух направлениях для анализа высоты ступеньки. Электрофизические параметры пленок ITO измерялись системой ЭДС Холла Ecopia HMS-3000 (Ecopia Co.), которая позволяет использовать четырехзондовый метод для определения удельного сопротивления, концентрации и подвижности носителей заряда. Шероховатость поверхности исследовалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) в полуконтактном режиме на нанолаборатории NTEGRA (НТ-МДТ). Обработка АСМ-изображений проводилась с помощью программного комплекса Nova Image Analysis. Структура пленок исследовалась с помощью растрового электронного микроскопа Nova Nanolab 600 (FEI Company) и методом рентгеновской дифракции на установке ДРОН-3 (АО “Буревестник”).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Из рис. 2 видно, что скорость осаждения пленки ITO линейно зависит от мощности магнетронного распыления в MF режиме. С увеличением мощности скорость осаждения возрастает с 33.5 до 95.1 нм/мин, что связано с увеличением кинетической энергии бомбардирующих мишень ионов аргона и, как следствие, возрастанием количества выбитых атомов из мишени, переход их в газовую фазу (распыление) и осаждение на подложку [12].

На рис. 3 показано, что пленки ITO имеют сравнительно гладкую поверхность и характери-

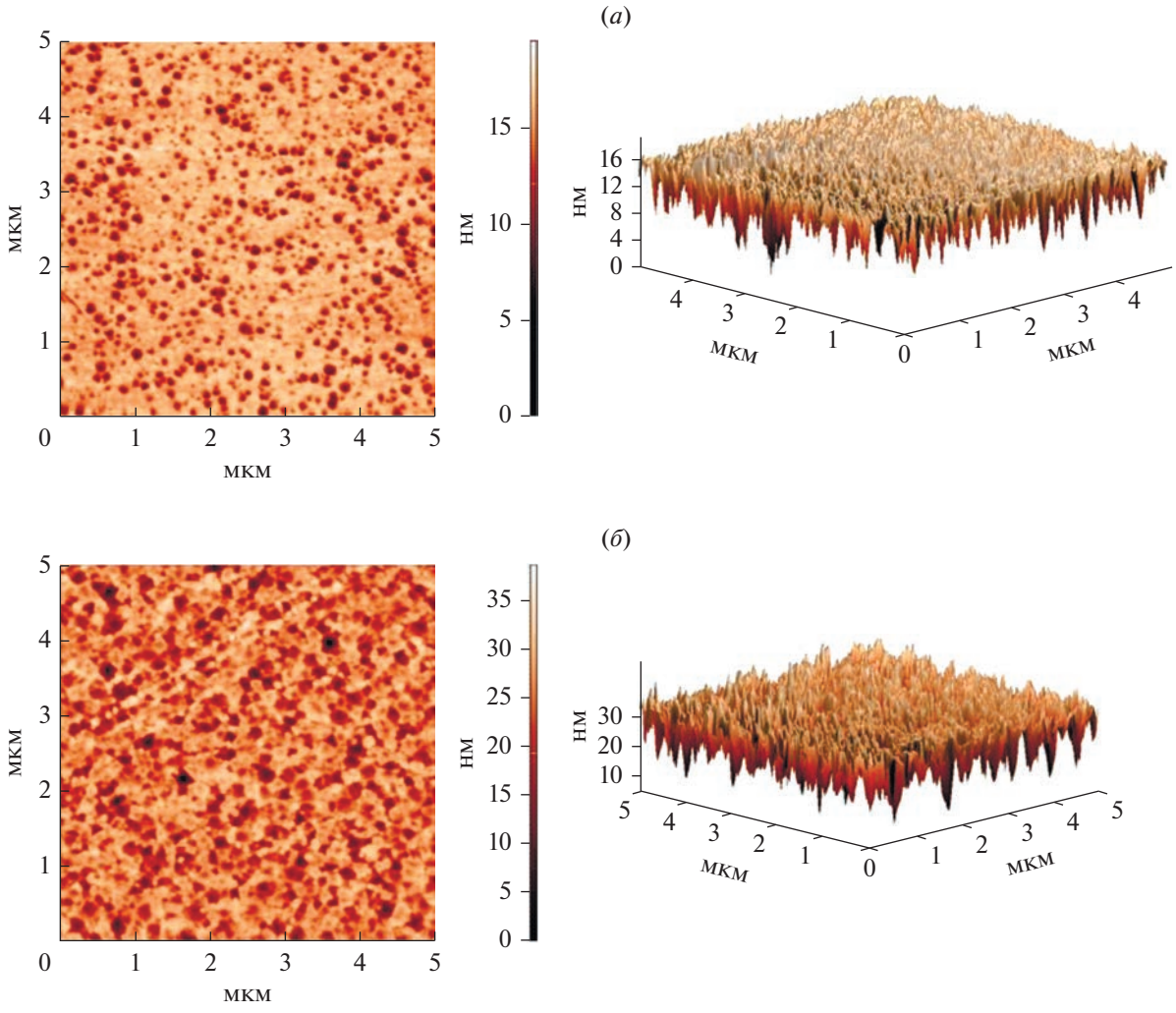


Рис. 4. АСМ-изображения поверхности пленок ITO, нанесенных при мощности распыления 100 Вт (*а*) и 250 Вт (*б*).

зуются резкой границей со стеклянной подложкой. Установлено, что при всех используемых в работе мощностях магнетронного распыления на поперечном сколе пленок ITO проявляется столбчатая структура. Подобная морфология часто наблюдается при низкотемпературном осаждении пленок оксидов [3, 13], что является следствием малой подвижности осаждаемых частиц на поверхности подложки.

Анализ АСМ-изображений (рис. 4) показал, что пленки ITO на стеклянных подложках, полученные в MF режиме при комнатной температуре в бескислородной среде, имеют преимущественно нанокристаллическую структуру, что согласуется с работами [3, 7, 12]. Пленки ITO, полученные при мощности 100 Вт, являются более гладкими с преобладанием аморфной фазы, шероховатостью поверхности 13.5 нм (5 × 5 мкм) и размерами зерен 11.7 нм, а пленки ITO, полученные при мощности 250 Вт, являются более зернистыми с размером зерен 27.5 нм и шероховатостью поверхности 24.6 нм (5 × 5 мкм). Увеличение мощности магнетронного распыления придает осаждаемым атомам кинетическую энергию, необходимую для их перемещения по поверхности растущей пленки, поэтому формируется нанокристаллическая фаза с более отчетливыми границами зерен [4].

На рис. 5 представлены результаты рентгенодифракционного анализа пленок ITO, полученных на стеклянных подложках при комнатной температуре. При исследованиях использовалась длина волны рентгеновского излучения CuKα = 1.54051 Å. Получено, что при мощности 100 Вт формируется почти аморфная структура пленки ITO, в то время как при мощности 150–250 Вт структура становится нанокристаллической с характерным пиком на значениях угла 30° для плоскости (222), что соответствует кубической структуре In_2O_3. Полученные результаты согласуются с работами [2, 4, 14], где кристаллическая структура наблюдалась для пле-

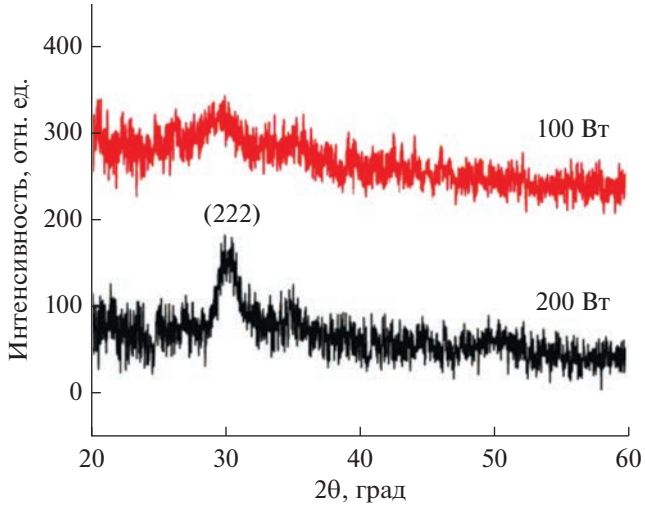


Рис. 5. Дифрактограммы рентгеновского рассеяния пленок ITO на стеклянной подложке.

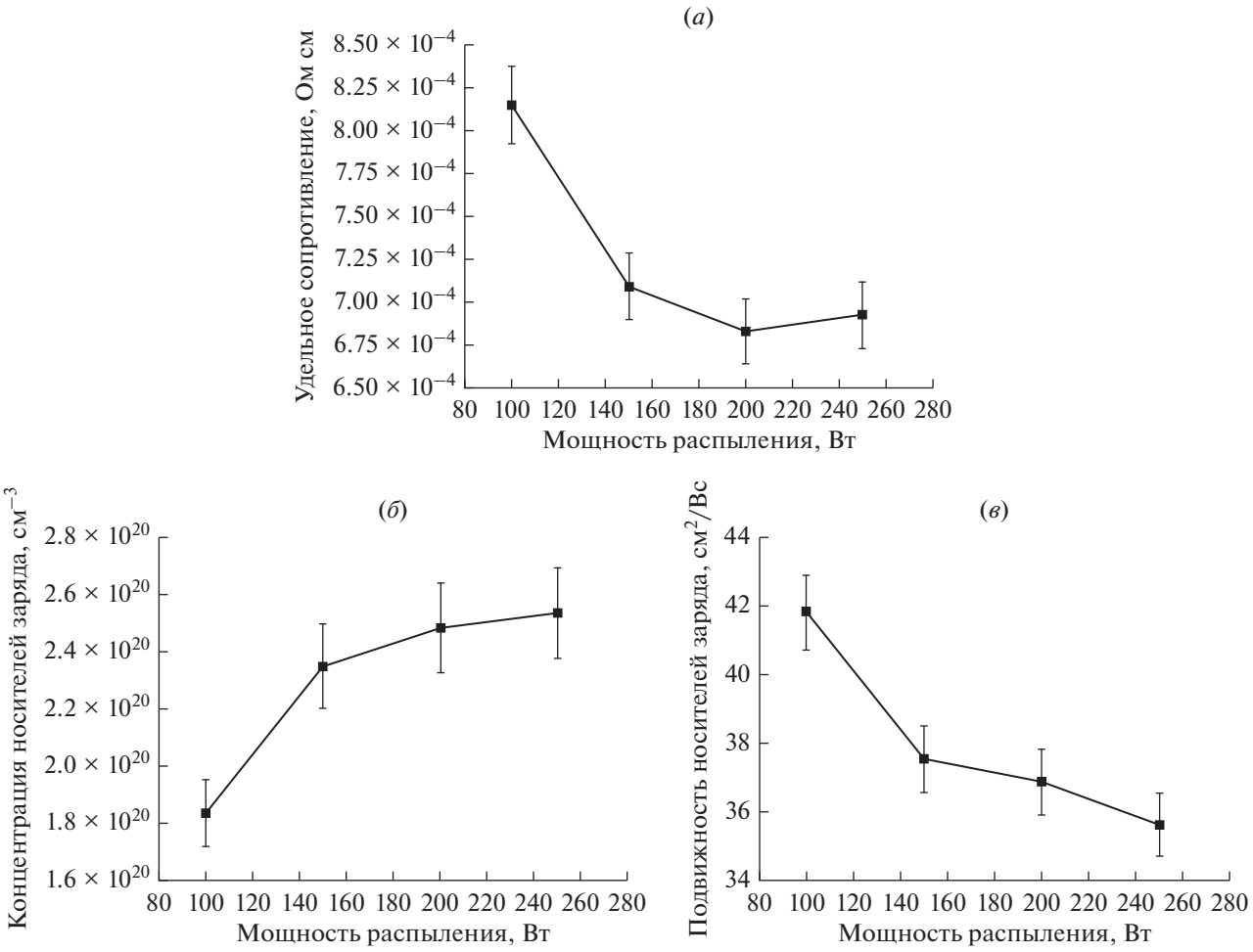


Рис. 6. Зависимости удельного сопротивления (*а*), концентрации (*б*) и подвижности (*в*) носителей заряда в пленках ITO от мощности распыления.

нок ITO, полученных методом магнетронного осаждения на стеклянных подложках при комнатной температуре, т.е. при температуре ниже кристаллизации аморфной пленки ITO (160–180°C), в том числе и за счет увеличения толщины пленки выше критического значения около 100–200 нм.

На рис. 6 представлены зависимости удельного сопротивления, концентрации и подвижности носителей заряда в пленках ITO на стеклянных подложках от мощности магнетронного распыления.

Полученные пленки ITO на стеклянных подложках имеют n-тип проводимости. При возрастании мощности магнетронного распыления со 100 до 200 Вт удельное сопротивление пленок ITO уменьшалось с 8.15×10^{-4} до 6.82×10^{-4} Ом см, а затем незначительно увеличивалось до $6.91 \times \times 10^{-4}$ Ом см. Минимальная величина поверхностного сопротивления составила 34.1 Ом/□ при мощности распыления 200 Вт, что соответствует высокому уровню значений (10–50 Ом/□) [6, 7, 9].

Концентрация носителей заряда в пленке ITO возрастала с 1.83×10^{20} до 2.54×10^{20} см$^{-3}$ при увеличении мощности распыления, что связано с изменением механизма осаждения атомов при возрастании их кинетической энергии, позволяющей им перемещаться на поверхности подложки. В результате чего кристалличность пленок ITO улучшается, что подтверждается ростом размера зерен от 11.7 до 27.5 нм и наличием пика на значениях угла 30° для плоскости (222). Увеличение концентрации также можно объяснить увеличением кислородных вакансий и замещением ионов In^{3+} в узлах кристаллической решетки In_2O_3 ионами Sn^{4+}, уменьшая их наличие в междоузлиях или на границах зерен [7, 12–15].

Подвижность носителей заряда, в свою очередь, снижалась с 41.8до 35.6 см^2/В с за счет увеличения шероховатости поверхности, вследствие различных механизмов рассеяния электронов на поверхностных дефектах и границах зерен [4, 12].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом магнетронного распыления в режиме средних частот (MF) получены пленки ITO на стеклянных подложках при комнатной температуре в бескислородной среде. Проведено исследование влияния мощности магнетронного распыления на электрофизические свойства и морфологию поверхности пленок ITO. Показано, что скорость осаждения пленки ITO линейно зависит от мощности магнетронного распыления в режиме MF. Получено, что пленки ITO имеют преимущественно нанокристаллическую структуру при мощности магнетронного распыления больше 100 Вт. Увеличение мощности распыления приводит к возрастанию шероховатости поверхности от 13.5 до 24.6 нм, размера зерен от 11.7 до 27.5 нм и появлению ярко выраженного пика для плоскости (222) пленки ITO. Минимальное удельное сопротивление пленок ITO составило 6.82×10^{-4} Ом см при оптимальной мощности магнетронного распыления 200 Вт (размер зерен 21.3 нм и шероховатость поверхности 17.7 нм). Концентрация и подвижность носителей заряда составили 2.48×10^{20} см$^{-3}$ и 36.8 см^2/В с. Полученные результаты соответствуют высокому уровню значений поверхностного сопротивления для пленок ITO (34.1 Ом/□), которые могут использоваться при формировании прозрачных проводящих электродов в солнечных элементах и мемристорах, как на стеклянной, так и на гибкой подложках.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00827, https://rscf.ru/project/23-29-00827/ в Южном федеральном университете.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Amador Perez-Tomas.* Functional Oxides for Photoneuromorphic Engineering: Toward a Solar Brain // Adv. Mater. Interfaces. 2019. V. 6. P. 1900471.
2. *Jago Txintxurreta, Eva G-Berasategui, Rocio Ortiz, Oihane Hernandez, Lucia Mendizábal, Javier Barriga.* Indium Tin Oxide Thin Film Deposition by Magnetron Sputtering at Room Temperature for the Manufacturing of Efficient Transparent Heaters // Coatings. 2021. V. 11. P. 92.
3. *Marikkannan M., Subramanian M., Mayandi J., Tanemura M., Vishnukanthan V., Pearce J.M.* Effect of ambient combinations of argon, oxygen, and hydrogen on the properties of DC magnetron sputtered indium tin oxide films // AIP Advances. 2015. V. 5. P. 017128.
4. *Abdelaziz Tchenka, Abdelali Agdad, Mohamed Cheikh Samba Vall, Salma Kaotar Hnawi, Abdelfattah Narjis, Lahcen Nkhaili, Elalami Ibnouelghazi, Elmaati Ech-Chamikh.* Effect of RF Sputtering Power and Deposition Time on Optical and Electrical Properties of Indium Tin Oxide Thin Film // Advances in Materials Science and Engineering. 2021. P. 1–14.
5. *Goncharov E.V., Sayenko A.V., Malyukov S.P., Palii A.V.* Formation of ITO Thin Films by MF Magnetron Sputtering for Solar Cells Application // Proceedings of ITNT 2021 – 7th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology, 2021.
6. *Amalraj Peter Amalathas, Maan M. Alkaisi.* Effects of film thickness and sputtering power on properties of ITO thin films deposited by RF magnetron sputtering without oxygen // J. Mater Sci.: Mater Electron, 2016. V. 27. P. 11064–11071.
7. *Chih-hao Yang, Shih-chin Lee, Tien-chai Lin, Suzcheng Chen.* Electrical and optical properties of indium tin oxide films prepared on plastic substrates by radio frequency magnetron sputtering // Thin Solid Films. 2008. V. 516. P. 1984–1991.
8. *Jae-Ho Kim, Hae-Jun Seok, Hyeong-Jin Seo, Tae-Yeon Seong, Jin Hyuck Heo, Sang-Hyuk Lim, Kyung-Jun Ahnd, Han-Ki Kim.* Flexible ITO films with atomi-

cally flat surfaces for high performance flexible perovskite solar cells // Nanoscale. 2018. V. 10. P. 20587–20598.

9. *Hyung-Jin Choi, Soon-Gil Yoon, Ju-Ho Lee, Jeong-Yong Lee*. Crystallized Indium-Tin Oxide (ITO) Thin Films Grown at Low Temperature onto Flexible Polymer Substrates // ECS J. Solid State Science and Technology. 2012. V. 1(5). P. 106–109.
10. *Kelly P.J., Henderson P.S., Arnell R.D., Roche G.A., Carter D.* Reactive pulsed magnetron sputtering process for alumina films // J. Vacuum Science and Technology A. 2000. V. 18. № 6. P. 2890–2896.
11. *Bradley J.W., Karkari S.K., Vetushka A.* A study of the transient plasma potential in a pulsed bipolar dc magnetron discharge // Plasma Sources Sci. Technol. 2004. V. 13. P. 189–198.
12. *Miaoju Chuang*. ITO Films Prepared by Long-throw Magnetron Sputtering without Oxygen Partial Pressure // J. Mater. Sci. Technol. 2010. V. 26(7). P. 577–583.
13. *Guillen C., Herrero J.* Polycrystalline growth and recrystallization processes in sputtered ITO thin films // Thin Solid Films. 2006. V. 510. P. 260–264.
14. *Kudryashov D., Gudovskikh A., Zelentsov K.* Low temperature growth of ITO transparent conductive oxide layers in oxygen-free environment by RF magnetron sputtering // J. Physics: Conference Series. 2013. V. 461. P. 012021.
15. *Kosariana A., Shakiba M., Farshidi E.* Role of Sputtering Power on the Microstructural and Electro-Optical Properties of ITO Thin Films Deposited Using DC Sputtering Technique // IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering. 2018. V. 13. P. 27–31.

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, 2023, том 52, № 4, с. 336–344

ТЕХНОЛОГИИ

МЕХАНИЗМЫ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ПЛЕНКАХ, СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ АТОМНО-СЛОЕВОГО ОСАЖДЕНИЯ

© 2023 г. А. В. Фадеев[a], *, А. В. Мяконьких[a], Е. А. Смирнова[a], С. Г. Симакин[b], К. В. Руденко[a]

[a]*Физико-технологический институт им. К.А. Валиева Российской академии наук, Нахимовский пр-т, 36/1, Москва, 117218 Россия*

[b]*Ярославский Филиал Физико-технологического института им. К.А. Валиева Российской академии наук, Ярославль, 150007 Россия*

*****E-mail: alexvfadeev@gmail.com*

Поступила в редакцию 20.03.2023 г.
После доработки 20.04.2023 г.
Принята к публикации 22.04.2023 г.

Экспериментально и теоретически изучено распределение примеси углерода по глубине в пленках оксида гафния, полученных методом плазмостимулированного атомно-слоевого осаждения. Предложена аналитическая модель, описывающая зависимость профиля концентрации примеси углерода в пленке. Модель учитывает, что причиной образования примеси углерода в растущей пленке может быть неполное протекание реакции окисления металлорганического прекурсора. Диффузионное перераспределение примеси определяется механизмами, учитывающими наличие углерода в состояниях разной природы: нерастворимом состоянии (карбиды, карбонаты), высокоподвижном состоянии (CO, CO_2) и неустойчивом состоянии, время жизни которого больше времени роста пленки. Показана возможность контроля примеси углерода как в глубоких, так и в приповерхностных слоях. Предсказания модели были подтверждены экспериментально с помощью масс-спектрометрии вторичных ионов в пленках, полученных методом атомно-слоевого осаждения. Для проверки теории были разработаны специальные структуры оксида гафния, состоящие из нескольких слоев, в которых изменялось время воздействия плазмой на образец при одинаковой дозировке металорганического прекурсора. На подложку наносился слой с наименьшим временем воздействия плазмой, затем такое же количество циклов на следующем слое проходило, при условии увеличения времени экспозиции в n раз. Это позволило углубить переходные зоны и тем самым защитить их от воздействия атмосферы.

Ключевые слова: атомно-слоевое осаждение, примесь углерода, гафния, масс-спектрометрия вторичных ионов

DOI: 10.31857/S0544126923700412, **EDN:** IAEJRT

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время метод атомно-слоевого осаждения (ALD) широко используется в микроэлектронике [1–7]. Метод позволяет формировать ультратонкие пленки с точным контролем толщины как на плоских, так и на трехмерных поверхностях. Один идеальный ALD цикл состоит из четырех этапов. На первом этапе в камеру реактора поступает первый прекурсор (как правило, металлоорганический) в количестве, необходимом для заполнения всех имеющихся функциональных групп на поверхности экспонируемого образца. Затем камеру реактора продувают для удаления из нее молекул прекурсора, не связанные химически с поверхностью (вторая стадия). В результате монослой первого прекурсора остается на поверхности в химически адсорбированном состоянии. На третьем этапе в камеру реактора поступает второй прекурсор и протекает гетерогенная реакция между прекурсорами (термическое ALD) или происходит плазменная обработка для активирования поверхности перед следующим применением первого прекурсора (плазменно-стимулированное ALD – PEALD). Побочные продукты реакции удаляются путем продувки камеры инертным газом на четвертом этапе. В результате образуется один монослой осаждаемого материала. Обычно толщина получаемого монослоя составляет 0.5–1 Å.

Однако из-за стохастического характера кинетики химических реакций, а также стерического эффекта не все функциональные группы хемосорбированного первого прекурсора реагируют со вторым прекурсором в ходе ALD-цикла [8],

приводя к загрязнению растущих пленок примесями из лигандов металлоорганических молекул. Загрязнение пленки примесями также может происходить из-за термического разложения прекурсора [9] при высоких температурах. А в случае PEALD возможно появление примесей в растущей пленке за счет диссоциации молекул прекурсора в плазме и последующего переосаждения их на поверхность [10]. Наличие примеси углерода в пленках, осажденных методом ALD с металлоорганическими прекурсорами, наблюдалось во многих работах [2–7, 11–17].

Состав пленок может играть решающую роль в их электрофизических характеристиках, в том числе в токе утечки, что важно для микроэлектроники, так как углеродные включения могут группироваться и влиять на фазовый состав пленки [18].

В пленках Al_2O_3, выращенных методом ALD, как и в оксидах других металлов, в объеме присутствует постоянная концентрация примеси углерода, определяемая параметрами процесса формирования пленки, при этом концентрации углерода увеличивается в нескольких (~10–20) приповерхностных монослоях [6, 7, 16, 17, 19–23]. В нашей предыдущей работе [24] указанный эффект был промоделирован и предложена модификация стандартного ALD процесса, позволяющая снизить приповерхностную концентрацию углеродных примесей в выращенной пленке за счет увеличения времени подачи кислородсодержащего прекурсора на последних ALD циклах.

Существует ряд материалов, для которых в многочисленных работах наблюдалась обратная ситуация, когда концентрация углерода у поверхности пленки, выращенной методом ALD, уменьшалась. Так, для пленок оксида гафния в ряде работ [2–5, 23, 25–28] наблюдалось уменьшение концентрации примеси углерода вблизи поверхности, но в [6, 7, 19–23] напротив, приповерхностная концентрация примеси углерода увеличивалась. Эти противоречивые результаты явно не коррелируют ни с типом кислородсодержащего прекурсора (газообразный O_2, O_3 или O_2 плазма), ни с температурой образца в процессе его создания, ни с толщиной выращенной пленки и требуют дальнейшего изучения. Ключ к пониманию указанного явления можно найти, принимая во внимание переходные нестабильные комплексы, которые могут образовываться в пленках ALD в процессе роста [23, 29]. Так согласно [28], концентрация примеси водорода в пленках была ниже концентрации примеси углерода, что может быть связано с диссоциацией некоторых лигандов прекурсора гафния (TEMAH). В результате потери водорода часть лигандов теряет подвижность и не может быть легко десорбирована с поверхности, особенно при низких температурах. Распад нестабильных комплексов может привести к уменьшению концентрации углерода вблизи поверхности.

Целью настоящей работы является верификация ранее предложенной модели, а также ее корректировка для объяснения, наблюдаемого в ряде работ, уменьшения приповерхностной концентрации примеси углерода в выращенных методом ALD пленках.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Для проверки модели были изготовлены образцы пленок HfO_2 на кремниевых подложках методом плазмостимулированного атомно-слоевого осаждения. Процесс осаждения осуществлялся в ALD реакторе FlexAl (Oxford Instruments Plasma Technology). Температура стола в камере во время осажления составляла 300°C, сама камера и газопроводы нагревались до 120°C, что задавало температуру газа в объеме реактора. Металлоорганическим прекурсором служил тетраэтилметиламиногафний (TEMAH), нагретый до 70°C и подаваемый в камеру потоком газа-носителя Ar объемом 250 sccm. Варьируя время дозирования второго прекурсора в разных слоях пленки, мы получили образцы для проверки изложенной теории. Основные параметры ALD цикла представлены в табл. 1.

Одной из проблем анализа образцов, который в нашем случае приходилось проводить с перерывом в вакууме во время перемещении образцов в камеру ВИМС, является возможность загрязнения поверхности углеродом из атмосферы. Для предотвращения указанного эффекта была предложена следующая схема эксперимента: на поверхности кремниевой пластины в результате 100–150 ALD циклов при одном значении воздействия плазмой формировался слой материала, затем дозировка изменялась и наносился новый слой. Это позволило углубить переходные зоны под слой материала и защитить их от воздействия атмосферы. Распределение примесей по глубине исследовали методом масс-спектрометрии вторичных ионов. Характерной особенностью распределений, полученных в нашем эксперименте, была зависимость угла наклона концентрационного профиля углерода в объеме выращенных слоев от времени подачи кислород содержащего прекурсора.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ

В [24] на примере Al_2O_3 нами была предложена модель, позволяющая объяснить накопление углеродных примесей вблизи поверхности пленки, выращенной методом ALD. Согласно модели, из-за неполноты протекания реакций кислородсодержащего прекурсора с поверхностными CH_3 группами, в пленке остается определенная кон-

Таблица 1. Параметры ALD процесса

Параметр	Величина
Температура газа	$T_g = 120°C$
Температура подложки	$T_s = 300°C$
Давление O_2	$P_O = 15$ mTorr
Время подачи TEMAH (I прекурсор)	$t_{TEMAH} = 1$ s
Время продувки после I прекурсора	$t_{p_TEMAH} = 3$ s
Время подачи O_2 плазмы (II прекурсор)	$t_O = 1.5–15$ s
Время продувки после II прекурсора	$t_{p_O} = 8$ s
Время технологического отжига (время до разгрузки камеры) $T_s = 300°C$	$t_{etch} = 180$ s

центрация примеси углерода. Эта примесь может образовывать устойчивые комплексы в нерастворимом состоянии (карбиды, карбонаты). В тоже время, при взаимодействии с диффундировавшим в пленку кислородом, создавать легкоподвижные состояния (CO, CO_2). В результате углерод покидаал пленку за время, значительно меньшее времени подачи прекурсора, что связано с низким энергетическим барьером и направленным к поверхности характером его миграции.

Для объяснения снижения концентрации углерода у поверхности, наблюдаемого, например, в оксиде гафния [23, 25–27], в модель были введены нестабильные углеродные комплексы, образующиеся на каждом ALD цикле в ходе подачи первого прекурсора (TEMAH). В дальнейшем эти комплексы распадались, образуя продукты, покидающие выращенную пленку посредством диффузии. Предполагается, что уход углерода из распадающихся нестабильных комплексов происходит в течении ограниченного времени нахождения образца в камере ALD реактора (t_c). Пренебрегая реакциями рассматриваемого состояния углерода, описание его ухода можно рассмотреть независимо от описания ALD циклов. При этих предположениях профиль концентрации углерода в зависимости от глубины ($z = 0$ соответствует поверхности), образованный распавшимеся неустойчивыми комплексами, будет описываться уравнением диффузии:

$$\frac{\partial n_{uc}}{\partial \tau} = D_{ac}\frac{\partial^2 n_{uc}}{\partial z^2}; \quad n_{uc}(z,0) = n0_{uc}; \quad n_{uc}(0, t < t_c) = 0. \tag{1}$$

Координата глубины здесь и далее измеряется в толщинах монослоя $z = x/a$, время τ в единицах продолжительности одного ALD цикла (t_0): $\tau = t/t_0$, n_{uc} – концентрация углеродных состояний, образующихся после распада нестабильных комплексов, D_{uc} – коэффициент диффузии.

Решение уравнения (1):

$$n_{uc}(z,t) = n0_{uc}\,erf\left(\frac{z}{2\sqrt{D_{uc}t}}\right), \tag{2}$$

где $erf(x)$ – функция ошибок. Как показывают результаты экспериментов, спад концентрации углерода происходит только в нескольких приповерхностных слоях, что позволяет описывать диффузию как в полубесконечном образце.

На рис. 1 представлены зависимости концентрации углерода, остающегося после распада неустойчивых комплексов в пленке, при различных значениях коэффициента диффузии. Коэффициенты диффузии на рисунке соответствуют значениям, полученным далее при верификации экспериментальных данных. Таким образом, образование и последующий распад нестабильных комплексов позволяет объяснить уменьшение концентрации углерода в приповерхностных слоях выращенной методом ALD пленки.

Перейдем к описанию процессов происходящих во время ALD циклов, пренебрегая на данном этапе наличием нестабильных комплексов ($t_{распада} > t_{ALD\ цикла}$). Рассмотрим диффузию избыточного кислорода при подаче кислородсодержащего прекурсора (плазменная стадия цикла ALD), пренебрегая его взаимодействием с углеродом на начальной стадии. Решение уравнения диффузии для кислорода:

$$\frac{\partial \tilde{n}_o(z,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \tilde{n}_o(z,t)}{\partial z^2}, \quad \tilde{n}_o(0,t) = 1, \quad \tilde{n}_o(z,0) = 0, \tag{3}$$

имеет вид:

$$n_o(z,t) = 1 - erf\left(\frac{z}{2\sqrt{Dt}}\right). \tag{4}$$

Во время продувки (после подачи кислорода) кислородный профиль можно описать уравнением:

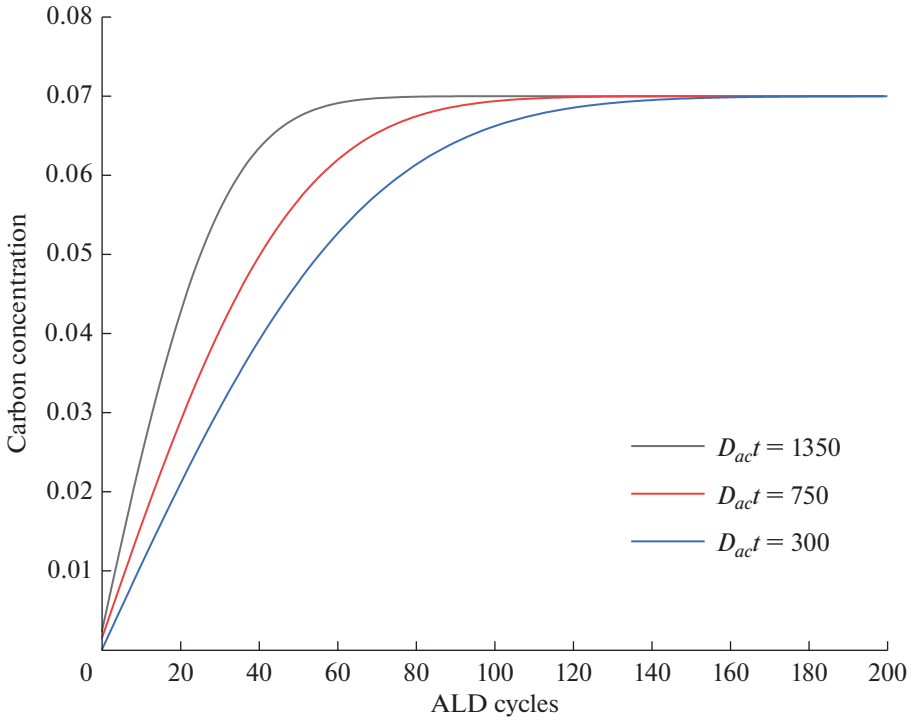


Рис. 1. Модельная зависимость концентрации углерода, оставшегося после разложения неустойчивых комплексов, при различных значениях коэффициента диффузии.

$$\frac{\partial n_o(z,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n_o(z,t)}{\partial z^2}, \quad \left.\frac{\partial n_o(z,t)}{\partial z}\right|_{z=0} = kn_o(0,t), \qquad (5)$$
$$n_o(z,0) = \tilde{n}_o(z,t_{\mathrm{O}}),$$

где k – коэффициент конвективного массообмена между поверхностью тела и окружающей средой, t_{O} – время подачи O_2 плазмы.

Решение уравнения (5) имеет вид:

$$n_o(z,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\int_0^\infty \tilde{n}_o(\xi,t_{\mathrm{O}})\left[\exp\left(-\frac{(z-\xi)^2}{4Dt}\right) + \right.$$
$$\left. + \exp\left(-\frac{(z+\xi)^2}{4Dt}\right) - 2k\int_0^\infty \exp\left(-\frac{(z+\xi+\eta)^2}{4Dt} - k\eta\right)d\eta\right]d\xi. \qquad (6)$$

Расчет показывает, что за время продувки накопленный в подложке кислород практически полностью покидает растущую пленку. Следовательно, каждый цикл ALD можно рассматривать независимо.

Как следует из экспериментальных зависимостей, границы пленка/подложка и поверхности оказывают влияние в достаточно узком диапазоне толщин выращенных пленок. Поэтому мы не будем учитывать эффекты, происходящие на этих границах. Систему кинетических уравнений, описывающую изменение концентрации углерода на плазменном этапе ALD цикла, можно записать в виде:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \tilde{n}_o}{\partial \tau} = D\dfrac{\partial^2 \tilde{n}_o}{\partial z^2} - \beta \tilde{n}_o \tilde{n}_{\mathrm{c1}} \\ \dfrac{\partial \tilde{n}_{\mathrm{c1}}}{\partial \tau} = -\beta \tilde{n}_o \tilde{n}_{\mathrm{c1}} - \alpha \tilde{n}_{\mathrm{c1}} \\ \dfrac{\partial \tilde{n}_{\mathrm{c2}}}{\partial \tau} = \alpha \tilde{n}_{\mathrm{c1}} \end{cases} \qquad (7)$$
$$\begin{cases} \tilde{n}_o(z,0) = 0, \quad \tilde{n}_o(0,\tau) = 1, \quad \tilde{n}_o(\infty,\tau) = 0 \\ \tilde{n}_{\mathrm{c1}}(z,0) = n_{\mathrm{O1}}(z) \\ \tilde{n}_{\mathrm{c2}}(z,0) = 0, \end{cases}$$

где D – коэффициент диффузии кислорода, n_{O} – концентрация кислорода, n_{c1} – концентрации оста-

точного углерода во время ALD цикла в виде CH_3 групп, n_{c2} – концентрации углерода в виде устойчивых, нерастворимых состояний (карбиды, карбонаты). α – скорость образования нерастворимого состояния углерода, β – скорость образования подвижного состояния углерода (CO, CO_2).

Для получения аналитического решения будем считать, что диффузия кислорода является наиболее быстрым процессом по сравнению с химической реакцией в пленке. Это подтверждается низкой энергией активации диффузии и малыми значениями констант скорости реакции с кислородом. Поэтому мы отделим диффузию кислорода от химических реакций с ним. В указанном приближении решение системы (7) будет иметь вид:

$$\begin{cases} \tilde{n}_o(z,t) = 1 - erf\left(\dfrac{z}{2\sqrt{Dt}}\right) \\ \tilde{n}_{c1} = n_c e^{-\alpha t} e^{-\beta\int_0^t n_O(\tau)d\tau} \\ \tilde{n}_{c2} = \alpha n_c \int_0^t e^{-\alpha t'} e^{-\beta\int_0^{t'} n_O(\tau)d\tau} dt'. \end{cases} \quad (8)$$

По завершении подачи кислородсодержащего прекурсора ($t > t_O$) весь кислород, физически адсорбированный поверхностью, удаляется на стадии после плазменной продувки ALD цикла. В этих условиях можно считать, что концентрация кислорода на поверхности равна нулю. Изменение концентрации углерода в пленке будет описываться системой уравнений (7) с начальными и граничными условиями, определяемыми плазменной стадией ALD цикла:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial n_o}{\partial \tau} = D\dfrac{\partial^2 n_o}{\partial z^2} - \beta n_o n_{c1} \\ \dfrac{\partial n_{c1}}{\partial \tau} = -\beta n_o n_{c1} - \alpha n_{c1} \\ \dfrac{\partial n_{c2}}{\partial \tau} = \alpha n_{c1} \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} n_o(z,0) = \tilde{n}_o(z,t_O), \quad n_o(0,\tau) = 0, \quad n_o(\infty,\tau) = 0 \\ n_{c1}(z,0) = \tilde{n}_{c1}(z,t_O) \\ n_{c2}(z,0) = \tilde{n}_{c2}(z,t_O). \end{cases}$$

Аналитическое решение системы в указанных ранее приближениях примет вид:

$$\begin{cases} n_O(z,t) = \dfrac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\int_0^\infty n_{o_b}(\xi)\left(e^{-\frac{(z-\xi)^2}{4Dt}} + e^{-\frac{(z+\xi)^2}{4Dt}} - 2k\int_0^\infty e^{-\frac{(z+\xi+\eta)^2}{4Dt} - k\eta} d\eta\right) d\xi \\ n_{c1} = n_c e^{-\alpha t_O} e^{-\beta\int_0^{t_O} n_O(\tau)d\tau} e^{-\alpha t} e^{-\beta\int_0^{t} n_O(\tau)d\tau} \\ n_{c2} = \alpha n_c e^{-\alpha t_O} e^{-\beta\int_0^{t_O} n_O(\tau)d\tau} \int_0^t e^{-\alpha t'} e^{-\beta\int_0^{t'} n_O(\tau)d\tau} dt' + \alpha n_c \int_0^{t_O} e^{-\alpha t'} e^{-\beta\int_0^{t'} n_O(\tau)d\tau} dt'. \end{cases} \quad (10)$$

На рис. 2 представлены зависимости концентрации примеси углерода от толщины выращенной пленки при различных временах действия кислородной плазмы. Как и ожидалось, увеличение экспозиции кислорода приводит к уменьшению концентрации примеси углерода в глубоких слоях выращенной пленки. В отличие от пленок Al_2O_3 [24] насыщение кривых концентрации примеси углерода для HfO_2 происходит на большей глубине, что связано с большим значением коэффициента диффузии и малой константой скорости реакции с кислородом.

Таким образом, построена модель, предсказывающая различные формы зависимости концентрации примеси углерода от глубины вблизи поверхности растущей пленки. Показано, как изменение времени подачи кислорода, скоростей квазихимических реакций и коэффициента диффузии кислорода влияет на концентрационный профиль примеси углерода.

4. ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ

Энергия активации диффузии кислорода в HfO_2, по данным работ разных авторов [30–33] варьируется от 0.36 до 2.2 эВ и зависит от диапазона температур осаждения и толщины пленки [31]. В наших расчетах для согласования с полученными экспериментальными данными энергия активации диффузии принята равной 0.9 эВ.

На рис. 3 (сплошные кривые) показаны профили ВИМС для углерода в трех различных пленках, полученных после 200 ALD циклов при продолжительности подачи плазмы кислорода t_O = 1.5, $t_O = 3$ и $t_O = 9$ с.

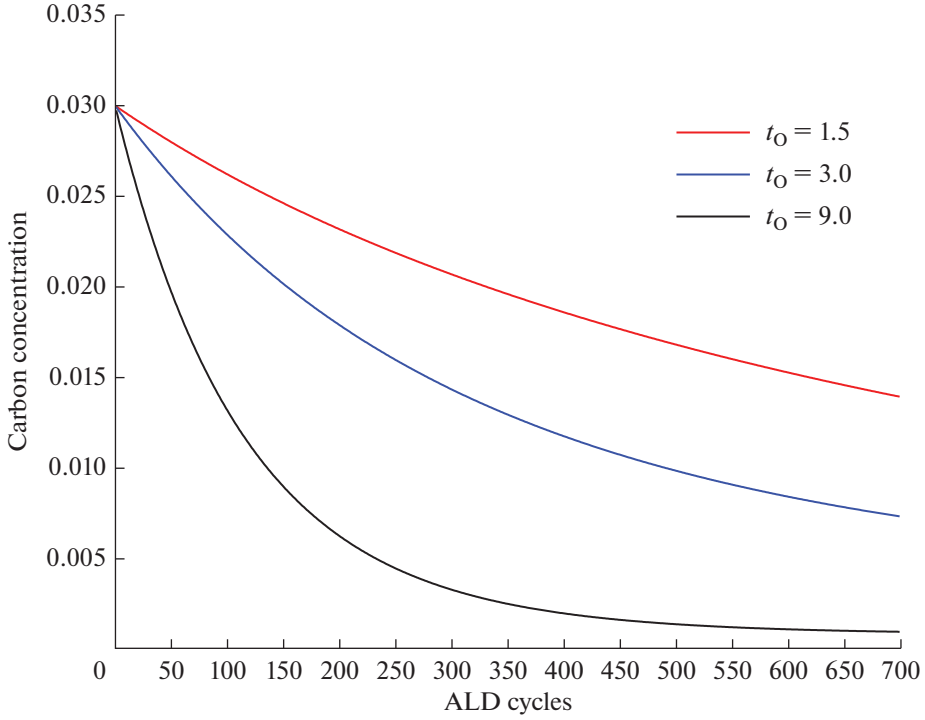


Рис. 2. Зависимость концентрации углерода от времени воздействия кислородной плазмой t_O.

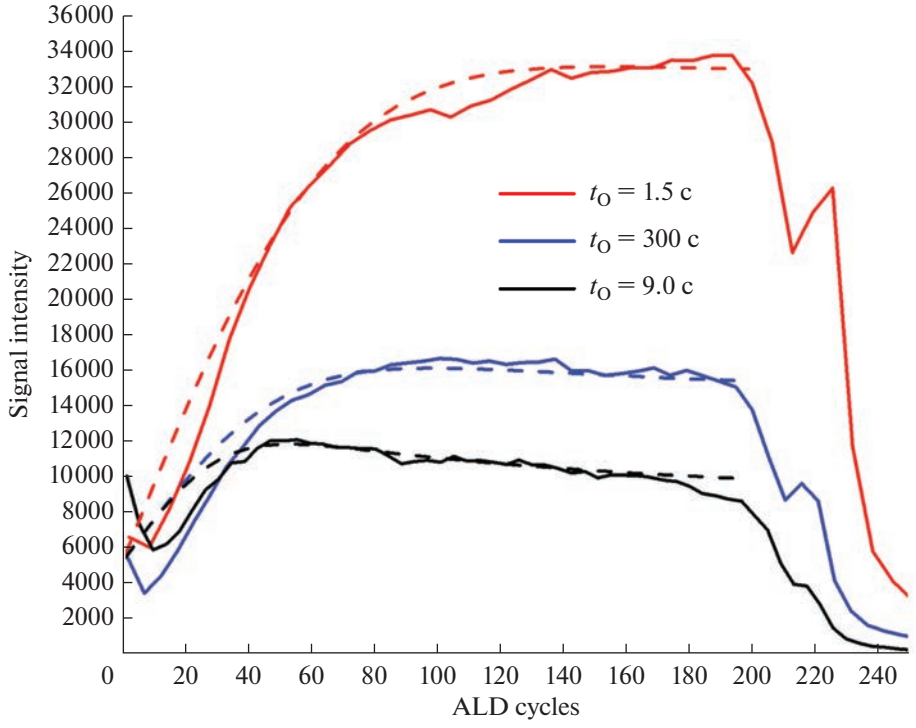


Рис. 3. Кривые масс-спектрометрии вторичных ионов для примеси углерода (сплошные линии) и расчетные кривые для примеси углерода (штриховые линии) при различном времени экспозиции в плазме кислорода.

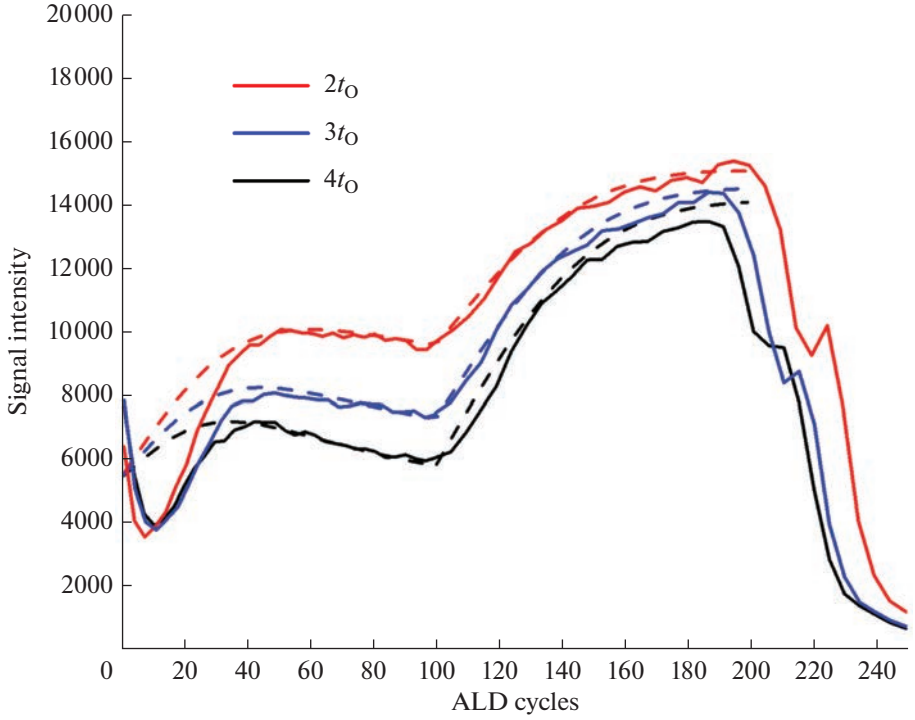


Рис. 4. Кривые масс-спектрометрии вторичных ионов для примеси углерода (сплошные линии) и расчетные кривые для примеси углерода (штриховые линии) в пленках, полученных после 100 ALD циклов с временем экспозиции в плазме кислорода t_O = 3 с, за которыми последовали еще 100 циклов с экспозицией равной $2t_O$, $3t_O$ и $4t_O$.

Для верефикации использовались следующие значения параметров уравнений (8), (10): α = = 0.00001, β = 0.00095, n_{c1} = 0.03 и n_{0ac} = 0.07. На рис. 3 можно наблюдать кривые, выходящие на насыщение с глубиной, при различных временах подачи кислорода. Результаты модели воспроизводят снижение концентрации углерода вблизи поверхности, а также углы наклона плато в насыщенной области при разных временах экспозиции в плазме кислорода. Коэффициенты диффузии углеродных компонентов, образующихся после распада неустойчивых комплексов (D_{uc}) были выбраны в соответствии с экспериментальными кривыми и составили: $D_{uc}\ t_c$ = 300, 750 и 1350 для t_O =1.5 с; 3 с и 9 с соответственно.

На рис. 4 представлены профили ВИМС для углеродных пленок, полученных после 100 ALD циклов с временем подачи кислородной плазмы равной t_O = 3 с, за которыми последовали еще 100 циклов с экспозицией равной $2t_O$, $3t_O$ и $4t_O$.

Из рис. 4 видно, что расчетные кривые хорошо описывают экспериментальные зависимости в области плато последних 100 ALD циклов. Модель предсказывает удаление углерода из более глубоких слоев пленки и удовлетворительно описывает кривые для первых 100 циклов. Таким образом, предложенная модель позволяет описать процессы, вызывающие загрязнение пленки, выращенной методом ALD, примесью углерода и предлагает способы (повышение температуры, увеличение времени подачи кислорода на протяжении всего цикла выращивания пленки или на последних ALD циклах) для снижения концентрации этой примеси.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен эксперимент по изучению влияния продолжительности подачи кислородсодержащего прекурсора на концентрацию примеси углерода в пленках диоксида гафния, выращенных методом плазменно-стимулированного ALD. Предложена аналитическая модель, описывающая накопление концентрации углерода в выращенных пленках, учитывающая, что причиной примеси появления углерода в растущей пленке может быть неполное протекание реакции окисления прекурсора на подложке. Механизмы ее перераспределения примеси в пленке должны учитывать наличие в пленке углерода в нерастворимом состоянии (карбиды, карбонаты), высокоподвижном состоянии (CO, CO_2) и неустойчивом состоянии, время жизни которого больше времени роста пленки. Модель описывает различное поведение примеси углерода в приповерхностных слоях выращенной пленки. Показана возможность контроля примеси углерода, как в глубоких, так и в

приповерхностных слоях пленки. Модель была верифицирована специально подготовленным экспериментом. В дизайне эксперимента реализован подход, позволяющий исключить общий недостаток подобных исследований, связанный с атмосферной контаминацией. Это достигается за счет формирования in situ дополнительного слоя, который позволяет сохранить сформированный в процессе ALD характер распределения примеси. Характерные особенности распределения примеси (спад концентрации у поверхности, характерное "плато" концентрации со слабым снижением примеси в глубине пленки, зависимость средней концентрации примеси от длительности шага окисления), наблюдающиеся в эксперименте, объяснены в рамках предложенной модели.

Исследование было поддержано программой № FFNN-2022-0019 Минобрнауки России для ФТИАН им. К.А. Валиева РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Atomic Layer Deposition of Nanostructured Materials. // Edited by Nicola Pinna and Mato Knez. Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA, Germany, 2012. 435 p.
2. *Uenuma M., Takahashi K., Sonehara S., Tominaga Y., Fujimoto Y., Ishikawa Y., Uraoka Y.* Influence of carbon impurities and oxygen vacancies in Al_2O_3 film on Al_2O_3/GaN MOS capacitor characteristics // AIP ADVANCES 2018. V. 8. P. 105103.
3. *Kinnunen S., Arstila K., Sajavaara T.* Al_2O_3 ALD films grown using TMA + rare isotope 2H216O and 1H218O precursors // Appl. Surf. Sci. 2021. V. 546. P. 148909.
4. *Vihervaara A., Hatanpää T., Mizohata K., Chundak M., Popov G., Ritala M.* A low-temperature thermal ALD process for nickel utilizing dichlorobis(triethylphosphine)nickel(II) and 1,4-bis(trimethylgermyl)-1,4-dihydropyrazine // Dalton Trans. 2022. V. 51. P. 10898.
5. *Chung H.K., Won S.O., Park Y., Kim J.-S., Park T.J., Kim S.K.* Atomic-layer deposition of TiO_2 thin films with a thermally stable $(CpMe_5)Ti(OMe)_3$ precursor // Appl. Surf. Sci. 2021. V. 550. P. 149381.
6. *Butcher K.S.A., Georgiev V., Georgieva D., Gergova R., Terziyska P., Binsted P.W.* Downstream Electric Field Effects during Film Deposition with a Radio Frequency Plasma and Observations of Carbon Reduction // Coatings. 2022. V. 12. P. 1581.
7. *Kia A.M., Speulmanns J., Bönhardt S., Emara J., Kühnel K., Haufe N., Weinreich W.* Spectroscopic analysis of ultra-thin TiN as a diffusion barrier for lithi.um-ion batteries by ToF-SIMS, XPS, and EELS // Appl. Surf. Sci. 2021. V. 564. P. 150457.
8. *Sultan S.M., Clark O.D., Masaud T.B., Fang Q., Gunn R., Hakim M.M.A., Sun K., Ashburn P., Chong H.M.H.* Remote plasma enhanced atomic layer deposition of ZnO for thin film electronic applications // Microelectronic Engineering. 2012. V. 97. P. 162–165.
9. *Alen P., Juppo M., Ritala M., Sajavaara T., Keinonen J., Leskela M.* Atomic Layer Deposition of Ta(Al)N(C) Thin Films Using Trimethylaluminum as a Reducing Agent // J. The Electrochemical Society. 2001. V. 148(10). P. G566–G571.
10. *Knoops H.C.M., Peuter K., Kessels W.M.M.* Redeposition in plasma-assisted atomic layer deposition: Silicon nitride film quality ruled by the gas residence time // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 107. P. 014102.
11. *Abdulagatov A.I., Ramazanov Sh.M., Dallaev R.S., Murliev E.K., Palchaev D.K., Rabadanov M.Kh., Abdulagatov I.M.* Atomic Layer Deposition of Aluminum Nitride Using Tris(diethylamido) aluminum and Hydrazine or Ammonia // RUSSIAN MICROELECTRONICS. 2018 V. 47. № 2. P. 118–130.
12. *Cho M., Kim J.H., Hwang C.S.* Effects of carbon residue in atomic layer deposited HfO_2 films on their time-dependent dielectric breakdown reliability // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. P. 182907.
13. *Kwon O.K., Kim J.H., Park H.S., Kanga S.W.* Atomic layer deposition of ruthenium thin films for copper glue layer // J. The Electrochemical Society. 2004. V. 151(2). P. G109–G112.
14. *Kinnunena S.A., Malma J., Arstila K., Lahtinenb M., Sajavaara T.* This is an electronic reprint of the original article. This reprint may differ from the original in pagination and typographic detail // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B. 2017. V. 406. P. 152–155.
15. *Hwan J.H., Kim H.Y., Lee S.C., Park K.J.-S., Jeon D., Chung T.-M., Kim C.G.* Growth of tantalum nitride film as a Cu diffusion barrier by plasma-enhanced atomic layer deposition from bis((2-(dimethylamino)ethyl)(methyl)amido)methyl(tert-butylimido)tantalum complex // Applied Surface Science. 2016. V. 362. P. 176–181.
16. *An K.-S., Cho W., Sung K., Lee S.S., Kim Y.* Preparation of Al_2O_3 Thin Films by Atomic Layer Deposition Using Dimethylaluminum Isopropoxide and Water and Their Reaction Mechanisms // Bull. Korean. Chem. Soc. 2003. V. 24(11). P. 1659–1663.
17. *Choi S.-W., Jang C.-M., Kim D.-Y., Ha J.-S.* Plasma Enhanced Atomic Layer Deposition of Al_2O_3 and TiN // J. Korean Physical Society. 2003. V. 42. P. S975–S979.
18. *Chesnokov Y.M., Miakonkikh A.V., Rogozhin A.E., Rudenko K.V., Vasiliev A.L.* Microstructure and electrical properties of thin HfO_2 deposited by plasma-enhanced atomic layer deposition // J. Materials Science. 2018. V. 53(10). P. 7214–7223. https://doi.org/10.1007/s10853-018-2099-5
19. *Yoo Y.W., Jeon W., Lee W., An C.H., Kim S.K., Hwang C.S.* Structure and Electrical Properties of Al-Doped HfO_2 and ZrO_2 Films Grown via Atomic Layer Deposition on Mo Electrodes // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. V. 6(24). P. 22474–22482.
20. *Choi M.-J., Park H.-H., Jeong D.S., Kim J.H., Kim J.S., Kim S.K.* Atomic layer deposition of HfO_2 thin films using H_2O_2 as oxidant // Applied Surface Science 2014. V. 301. P. 451–455.
21. *Parka I.-S., Leeb J., Yoonb S., K. J. Chungb, Leeb S., Parkb J., Kimb C.K., Ahn J.* Oxidant Effect on Resistance Switching Characteristics of HfO_2 film Grown Atomic Layer Deposition // ECS Transactions 1007. V. 11(7). P. 61–66.
22. *Hodson C.J., Singh N., Heil S., van Hemmen H., Kessels E.* Optimization of Plasma Enhanced Atomic Layer Deposition Processes for Oxides // Nitrides and Metals

in the Oxford Instruments FlexAL Reactor. 2007. https://doi.org/10.1149/1.2721476

23. *Lee S.Y., Kim H.K., Lee J.H., Yu I.-H., Leea J.-H., Hwang C.S.* Effects of O_3 and H_2O as oxygen sources on the atomic layer deposition of HfO_2 gate dielectrics at different deposition temperatures // J. Mater. Chem. C. 2014. V. 2. P. 2558–2568.
24. *Fadeev A.V., Rudenko K.V.* Possibility of Controlling the Impurity Concentration in the Near-Surface Layers of Films Grown by the ALD Method // Russian Microelectronics. 2019. V. 48(4). P. 220–228.
25. *Berdova M., Wiemer C., Lamperti A., Tallarida G., Cianci E., Lamagna L., Losa S., Rossini S., Somaschini R., Gioveni S., Fanciulli M., Franssila S.* Protective coatings of hafnium dioxide by atomic layer deposition for microelectromechanical systems applications // Appl. Surf. Sci. 2016. V. 368. P. 470–476.
26. *Perros A.P., Sippola P., Arduca E., Johansson L., Lipsanen H.* Low temperature and high quality atomic layer deposition HfO_2 coatings // IMAPS Nordic Conference on Microelectronics Packaging (NordPac). 2017. P. 182–185.
27. *Maesa J.W., Fedorenkoa Y., Delabieb A., Ragnarssonb L.-Å., Swertsa J., Nynsb L., Elshochtb S., Wangc C.G., Wilk G.* Impact of Hf-precursor choice on scaling and performance of high-k gate dielectrics // ECS Transactions. 2007. V. 11(4). P. 59–72.
28. *Liu X., Ramanathan S., Longdergan A., Srivastava A., Lee E., Seidel T.E., Barton J.T., Pang D., Gordon R.G.* ALD of Hafnium Oxide Thin Films from Tetrakis (ethylmethylamino) hafnium and Ozone // ECS J. Solid State Sci. Technol. 2005. V. 152(3). P. G213.
29. *Kim K.D., MPark H., Kim H.J., Kim Y.J., Moon T., Lee Y.H., Hyun S.D., Gwona T., Hwang C.S.* Ferroelectricity in undoped-HfO_2 thin films induced by deposition temperature control during atomic layer deposition // J. Mater. Chem. C. 2016. V. 4. P. 6864–6872.
30. *Vos M., Grande P.L., Venkatachalam D.K., Nandi S.K., Elliman R.G.* Oxygen Self-Diffusion in HfO_2 Studied by Electron Spectroscopy // PRL. 2014. V. 112. P. 175901.
31. *Zafar S., Jagannathan H., Edge L.F., Gupta D.* Measurement of oxygen diffusion in nanometer scale HfO_2 gate dielectric films // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 98. P. 152903.
32. *Xiao B., Watanabe S.* Non-negligible Metal Ions Diffusion in Amorphous Oxygen-Deficient Metal-Oxide Based Resistive Switches: A First Principle Study // The Japan Society of Applied Physics. 2014.
33. *Shen W., Kumari N., Gibson G., Jeon Y., Henze D., Silverthorn S., Bash C., Kumar S.* Effect of annealing on structural changes and oxygen diffusion in amorphous HfO_2 using classical molecular dynamics // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. P. 085113.