

УДК 621.315.592

ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ КРИСТАЛІВ Si p-ТИПУ З НАПИЛЕНИМИ ПЛІВКАМИ Al, ПІДДАНИХ ПРУЖНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ

Б. Павлик¹, М. Кушлик¹, Р. Дідик¹, Й. Шикоряк¹,
Д. Слободзян¹, А. Грипа¹, Р. Лис¹, Б. Кулик²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
м. Львів, вул. Тарнавського, 107, kushlykmarik@gmail.com

²Науково-технічний і навчальний центр низькотемпературних досліджень,
м. Львів, вул. Драгоманова, 50

З'ясовано, що напилення плівки Al зумовлює деформацію приповерхневого шару кремнію. Виявлено ефект гетерування дефектів з об'єму зразка, деформованого приповерхневим шаром, унаслідок пружної одновісної деформації кристала. Отримана залежність зміни опору цих зразків від розміру пружної деформації підтверджує гетерування дефектів у приповерхневому деформованому шарі. Виконано теоретичні розрахунки максимальної глибини захоплення цих дефектів на основі енергії взаємодії деформованого шару та дислокацій.

Ключові слова: кремній, пружна деформація, дислокації, дефекти невідповідності, гетерування дефектів.

Концепція деформації кремнію ґрунтується, головню, на зміні рівноваги кристалічної ґратки кремнію та дії зовнішніх напружень. Через модифікування кристалічної ґратки змінюються електронні властивості електронно-зонної структури кремнію. Зміна рухливості носіїв заряду, їхнього перерізу захоплення, концентрації дефектів тощо веде до зміни загальної електропровідності та значно залежить від сили, напряму і типу деформації кристала.

Механічні напруження в кремнієвій підкладці також можуть бути зумовлені напруженням на ній металевої або діелектричної плівки. Механічні напруження в площині стику плівки і підкладки виникають через невідповідність параметрів їхніх ґраток [1], наприклад, невідповідність параметрів кристалічних ґраток кремнію й алюмінію є близько 25 %. Це означає, що приповерхневий шар кристала кремнію перебуває під впливом двоосьового стиску. Під впливом двоосьової деформації носії заряду мають найменший опір у напруженому шарі і, зазвичай, на 50–70 % більшу рухливість [2].

Під час формування плівки на поверхні напівпровідника виникають ділянки механічних напружень, у яких можуть локалізуватися різнотипні дефекти. Також ця ділянка напружень може зумовлювати генерування дислокацій, наприклад, у разі наступної пластичної деформації [3].

Наша мета – дослідження впливу деформаційних полів, утворених унаслідок наплення плівки металу, на електрофізичні характеристики одновісно пружно деформованих кристалів кремнію *p*-типу.

Досліджували зразки, вирізані з монокристалічного диска кремнію *p*-типу марки КДБ 1-10. Після стандартної процедури різання, шліфування та хімічного полірування на площину (111) та зворотну у вакуумному кріостаті за тиску 10^{-3} Па наносили Al контакти у вигляді плівок (товщиною ~ 90 нм) у такий спосіб, що краї поверхні перебували під плівкою, а центральна частина була вільною.

Електропровідність вимірювали у вакуумній деформаційній установці за кімнатної температури та тиску залишкових газів 10^{-2} Па. Зовнішню деформацію проводили циклами в області пружної деформації вздовж напрямку [112] силою тиску до 40 МПа та швидкостями деформації 8 і 32 мкм/хв. Цикл одновісної деформації охоплює стадії стискання, розтискання та витримання зразків між цими стадіями за кімнатної температури на час від кількох хвилин до години.

Після закінчення вимірювання механостимульованої зміни електропровідності проводили стравлювання алюмінієвої плівки, селективне травлення та структурні дослідження поверхні (111) зразків за допомогою оптичного, електронного й атомно-силового мікроскопів.

Кристалічна ґратка кремнію має структуру алмазу з кубічною симетрією та параметром ґратки $a_0=0,357$ нм. У разі контакту приповерхневого шару монокристалічного кремнію з матеріалом, у якого період ґратки відрізняється від періоду ґратки кремнію, у приконтактній ділянці утворюються шари з проміжними значеннями параметрів ґраток. У підсумку поява таких невідповідностей породжує в монокристалі механічні напруження та деформаційний потенціал. Симетрія кристалічних шарів знижується, і необхідно вводити два параметри ґратки. Постійні ґратки в площині (111) позначимо a_{\parallel} , у перпендикулярному до площини (111) напрямі – a_{\perp} . Для обчислення припускаємо, що zdeформований шар складається з декількох шарів із різними, проте близькими до параметра ґратки товщинами. Припускаємо, що деформації в кожному шарі однорідні по всій його товщині h_i .

Відповідно до теорії пружності [4], механічне напруження в однорідній кристалічній плівці з початковою сталістю ґратки a_i і товщиною h_i визначене виразом

$$\tau_{\perp i} = \frac{h_{\perp i} (E_{\perp i} (a_{\parallel i} - a_{\perp 0}))}{((1 - \nu_{\perp i}) a_{\perp 0}}, \quad (1)$$

де E_i і ν_i – модуль Юнга і коефіцієнт Пуассона, відповідно, для *i*-го шару. Відносна деформація в кожному з шарів визначена тензором, у якому $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$, а інші величини такі:

$$\varepsilon_{11,22} = \frac{E_2 h_2}{E_1 h_1} \cdot \frac{1 - \nu_2}{1 - \nu_1} \cdot \frac{a_{i+1} - a_i}{a_i a_{i+1} + a_i};$$

$$\varepsilon_{11,22} = \frac{2\nu_1}{1 - \nu_1} \frac{E_2 h_2}{E_1 h_1} \cdot \frac{1 - \nu_2}{1 - \nu_1} \cdot \frac{a_{i+1} - a_i}{a_i a_{i+1} + a_i}, \quad (2)$$

де h_1, h_2 – середні значення товщин; a_i, a_{i+1} – середні значення параметрів ґраток; E_1, E_2 – модулі Юнга; ν_1, ν_2 – коефіцієнти Пуассона для деформовано шару підкладки та напиленої плівки, відповідно.

Загальна енергія гетероструктури $W = 1/2 \int \sum \tau_i \varepsilon_i dV$. Ця енергія має три складові: енергію деформацій невідповідності, енергію взаємодії деформацій невідповідності і дислокацій невідповідності, а також енергію дислокацій невідповідності. Якщо задані такі початкові умови утворення епітаксialного шару, за яких дислокації невідповідності не утворюються (температура підкладки ~ 350 °С, відсутність зовнішніх напружень), то загальна енергія визначена виразом

$$W = \frac{\tau S h_1 (2\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33})}{2x}, \quad (3)$$

де S – площа напиленої плівки; x – положення координати, напрямленої вглиб кристала.

Для крайових дислокацій, що були в об'ємі кристала до початку епітаксialного напилювання, енергія

$$W_d = \frac{Gb^2}{4\pi} \langle l \rangle \ln \frac{x}{r_0}, \quad (4)$$

де G – модуль зсуву; b – модуль вектора Бюргера; $\langle l \rangle$ – середня довжина дислокацій, r_0 – радіус ядра дислокації. У разі епітаксialного осадження алюміній дифундує в кристал на глибину кількох параметрів ґратки, унаслідок чого, згідно з розрахунками, виконаними за законом Вегарда, стала ґратки шару кремнію з алюмінієм дорівнює 5.39 Å.

У випадку прикладання до кристала зовнішнього механічного навантаження енергія приповерхневого контактного шару змінюється на

$$\Delta W = \pm \frac{F \cdot L}{S' \cdot E}, \quad (5)$$

де F – сила, прикладена до кристала; L – вихідна довжина кристала; S' – площа кристала, до якої прикладають силу. Знак “+” означає, що зовнішня деформація і механічне поле під підкладкою одночасно стискають або розтискають кристалічну ґратку, знак “-” – що зовнішнє навантаження має протилежну дію до приповерхневого деформаційного поля.

Крайова дислокація, відповідно, може вигинатись та переміщатись у напрямі, перпендикулярному до напрямку зовнішньої деформації. Також у цьому разі змінюється концентрація дислокаційних виходів на поверхню (N см⁻²), а отже, й енергія дислокації змінюється прямо пропорційно до N .

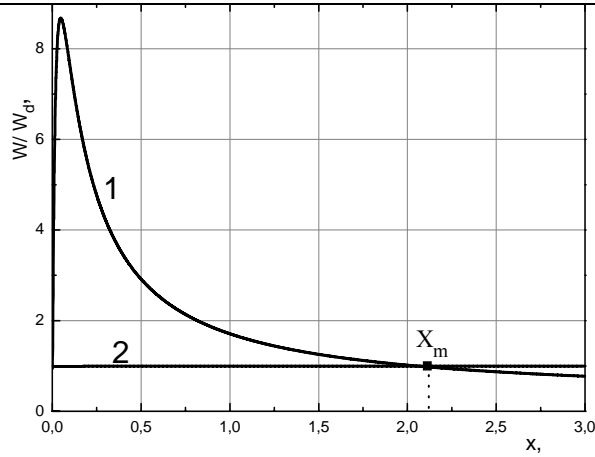


Рис. 1. Залежність енергій деформованого шару (1) товщиною $10 \cdot a_0$ та дислокацій (2) від координати точки в кристалі.

Графік залежності відношення енергій деформованого шару до енергії дислокації від координати під час зовнішнього механічного навантаження зображений на рис. 1.

З рис. 1 бачимо, що криві енергій деформованого шару і дислокацій перетинаються в точці X_m – максимальній глибині захоплення дефектів приповерхневим шаром з крайових дислокацій, положення якої залежить від зовнішньої деформації та вихідних параметрів у разі осадження металевої плівки. Зі збільшенням товщини деформованого шару, що відповідає зміні умов напилювання плівки (температури підкладки, швидкості напилювання, часу відпалу після напилювання, та ін.), відбувається зсув положення точки X_m углиб кристала (рис. 2). Усі теоретичні залежності побудовані для бездефектних кристалів за концентрації дислокацій до 10^2 см^{-3} з епітаксialною плівкою Al.

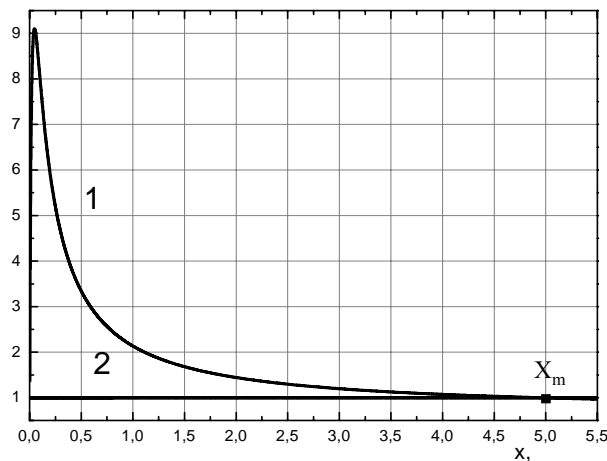


Рис. 2. Залежність енергій деформованого шару (1) товщиною $30 \cdot a_0$ та дислокацій (2) від координати точки в кристалі.

Експериментальні результати. Для зразків 1, 2 (1 – перед вимірюванням опору пружно деформований з силою тиску 55 МПа, а 2 не деформований до початку вимірювань) отримані залежності електроопору від тиску та часу зображені на рис. 3, 4.

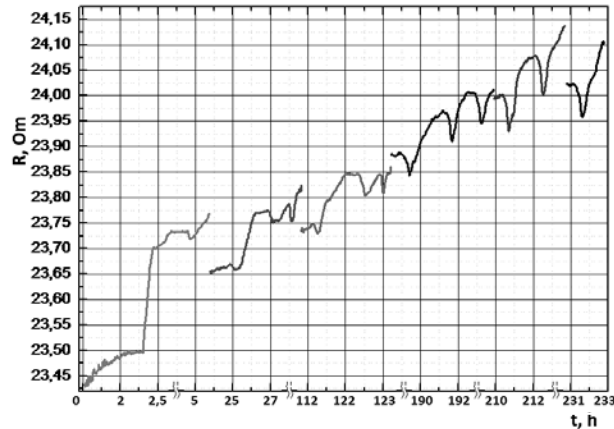


Рис. 3. Залежність опору від часу під час циклів стискання–розтискання, між циклами проводили відпал за кімнатної температури тривалістю: 1-й – 18,75 год; 2-й – 91,2 год; 3-й – 65,25 год; 4-й – 18,5 год; 5-й – 17,4 год; для зразка 1.

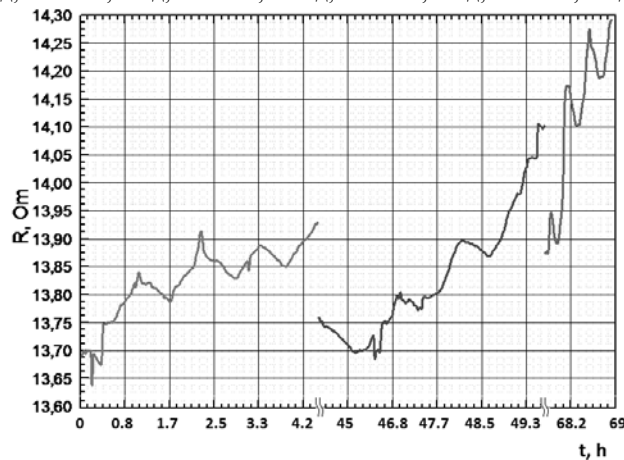


Рис. 4. Залежність залишкового опору від часу під час циклів стискання–розтискання, між циклами проводили відпал за кімнатної температури тривалістю: 1-й – 41 год; 2-й – 17,5 год; для зразка 2.

З цих залежностей бачимо, що:

- від циклу до циклу значення залишкового електроопору зразка збільшується (після декількох циклів зростання опору зменшується);
- у зразку, підданому попередній деформації, процеси, які зумовлюють поступове збільшення електроопору зразка, є уповільненими. Це інтенсивніше відбувається в зразку у разі витримування за кімнатної температури (тривалістю до години) після стадії розтискання зразка, ніж після стадії стискання;

- витримка зразка за кімнатної температури добу і довше приводить до часткового відновлення його провідності.

У ході структурного дослідження мікроскопічного стану поверхні після селективного травлення отримано фотографії з оптичного мікроскопа (рис. 5, *a*, *б*), на яких бачимо, що під напиленою плівкою після процесів стискання та розтискання утворюється підвищена концентрація дефектів. З аналізу фотографій селективно протравленої поверхні, зроблених за допомогою атомно-силового мікроскопа, випливає, що це групи структурних поверхневих дефектів, які відрізняються від дислокаційних ямок травлення глибиною та формою країв.

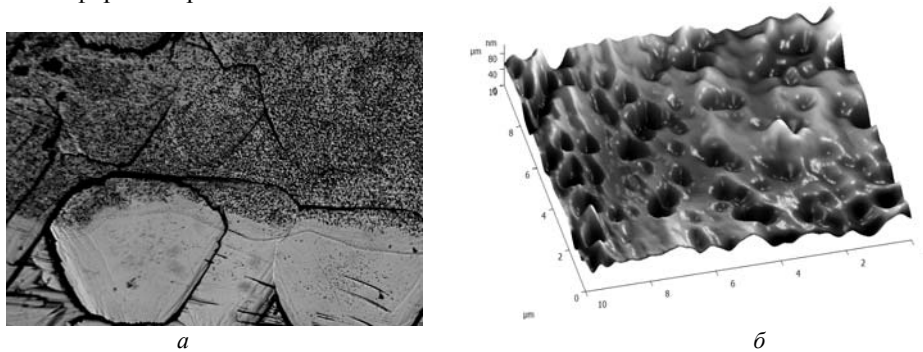


Рис. 5. Мікрофотографія поверхні (111) кремнію, яка була покрита Al плівкою: *a* – зроблені за допомогою оптичного мікроскопа, $\times 70$; *б* – за допомогою атомно силового мікроскопа.

На відміну від цих кристалів, на поверхнях зразків, на які напилювали Al плівку (рис. 6), проте їх не піддавали жодній зовнішній дії, такого підвищення концентрації не зафіксовано, а це дає підстави стверджувати, те що ці дефекти гетерувались у приповерхневому шарі кристала з об'єму кристала внаслідок зовнішньої деформації та наявності Al плівки.

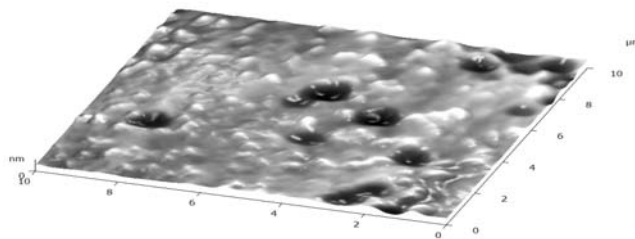


Рис. 6. Мікрофотографія поверхні (111) кремнію, яка не була покрита Al плівкою.

Оскільки дислокації утворюють навколо себе поле механічних напружень, то вони є ефективними стоками для різних дефектів чи домішок у кристалі. У разі прикладання до зразка зовнішнього механічного поля дислокації можуть переміщатись по ґратці (наприклад, петлеподібні дислокації із закріпленими кінцями здатні вигинатись) і відбувається додаткове захоплення дефектів з об'єму кристала. У випадку одновісної деформації кристала дислокації наближаються до приповерхневого шару з механічними

напруженнями, що зумовлені неоднаковими параметрами ґратки кремнію та алюмінієвої плівки, у цьому разі дефекти, локалізовані навколо ядра дислокацій, зазнають захоплення в порушеному приповерхневому шарі. Це пояснює зміну провідності зразка під час деформації. Під час розтискання дислокація випрямляється і повертається у вихідне положення, а деякі захоплені дефекти залишаються в полі деформаційного потенціалу, зумовленого неузгодженістю параметрів ґратки, що призводить до зміни опору зразка між циклами деформації.

Переміщення по ґратці дефектів може зумовлювати появу пасток, які можуть захоплювати носії заряду. Заповнення таких пасток супроводжується зменшенням концентрації носіїв струму і, відповідно, зростанням опору зразка після припинення деформації. Такими дефектами можуть бути дислокації, які віддали захоплені на себе дефекти приповерхневому шару, або вакансії, винесені дислокаціями на поверхню та ін.

Пояснення цієї зміни електропровідності не обмежується лише одним механізмом. Також можлива наявність блокування донорних центрів, що виникли або перемістились під час деформації. Ще один механізм – зміна розсіювання носіїв заряду на дефектах, винесених та захоплених приповерхневим шаром.

Отже, наплення плівки металу на підкладку кремнію і його подальша пружна деформація призводять до захоплення дефектів з об'єму кристала.

З'ясовано, що приповерхневий шар кремнію деформований через невідповідність параметрів ґраток кристала та плівки. Через це утворюється приповерхневий деформаційний потенціал, який здатний захоплювати дефекти з дислокацій, що підходять до поверхні в разі зовнішньої пружної деформації.

З досліджень мікроскопічної структури поверхні виявлено, що ці дефекти – скупчення точкових дефектів.

Описано можливі механізми впливу пружної деформації на електропровідність кристала через збільшення в його приповерхневій ділянці концентрації дефектів.

Виконано теоретичні розрахунки розподілу енергії приповерхневого, деформованого шару в сукупності з енергією дислокацій. З аналізу цих розрахунків отримано параметр глибини максимально можливого захоплення дефектів. Також зазначимо, що теоретичні розрахунки добре корелюють з експериментально отриманими результатами.

1. *Chau R., Datta S., Doczy M. et al. High-Metal-Gate Stack and Its MOSFET Characteristics // IEEE Electron Device Lett. – 2004. – Vol. 25. – N 6. – P. 408–410.*
2. *Канунникова О. М., Кожевников В. И., Гончаров О.Ю. Состав и строение тонких алюминиевых пленок на силикатных стеклах // Химическая физика и мезоскопия. – 2008. – Т. 10. – № 1. – С. 63–67.*
3. *Крылов П. Н. Физические модели термообработанного контакта металл-кремний // Весник Удмур. ун-та. – 2006. – № 4. – С. 125–126.*
4. *Л.Д. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Косевич А. М. и др. Теоретическая физика. Теория упругости. – М.: Наука, 1987. – 251 с.*

ELECTRO-PHYSICAL CHARACTERISTICS OF Si (P-TYPE) NEAR-SURFACE LAYERS WITH Al FILMS SUBJECTED TO ELASTIC DEFORMATIONS**B. Pavlyk¹, M. Kushlyk¹, R. Didyk¹, Y. Shykoryak¹,
D. Slobodzyan¹, A. Hrypa¹, R. Lys¹, B. Kulyk²**¹*Ivan Franko National University of Lviv,**107 Tarnavsky St., Lviv, kushlykmarik@gmail.com*²*Scientific-Technical and Educational Center of Low Temperature Studies,
50 Dragomanov St., Lviv*

It is revealed that deposition of Al film cause deformations in a surface layer of silicon. The effect of defects gettering from volume of the sample to the deformed surface layer is found as a result of uniaxial elastic deformation of crystal. The dependence of the resistance changes for these samples on the elastic deformation is obtained that confirms the process of defect gettering in the surface deformation field. Theoretical calculations of the maximum depth of defects capturing are performed basing on the interaction energy of the deformed layer and the dislocations.

Key words: silicon, elastic deformation, dislocations, defects of discrepancy, gettering of defects.

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ КРИСТАЛЛОВ Si (P-ТИПА) С НАПЫЛЕННЫМИ ПЛЕНКАМИ Al, ПОДВЕРЖЕННЫХ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ**Б. Павлик¹, М. Кушлык¹, Р. Дидык¹, Й. Шикоряк¹,
Д. Слободзян¹, А. Грыпа¹, Р. Лис¹, Б. Кулик²**¹*Львовский национальный университет имени Ивана Франко,**г. Львов, ул. Тарнавского, 107, kushlykmarik@gmail.com*²*Научно-технический и учебный центр низкотемпературных исследований,
г. Львов, ул. Драгоманова, 50*

Установлено, что напыление пленки Al вызывает деформацию приповерхностного слоя кремния. Обнаружен эффект геттерирования дефектов с объема образца деформированным приповерхностным слоем в результате упругой одноосной деформации кристалла. Получена зависимость изменения сопротивления этих образцов от упругой деформации, подтверждающая процесс геттерирования дефектов в приповерхностном деформационном поле. Проведены теоретические расчеты максимальной глубины захвата этих дефектов на основе энергии взаимодействия деформированного слоя и дислокаций.

Ключевые слова: кремний, упругая деформация, дислокации, дефекты несоответствия, геттерирование дефектов.

Стаття надійшла до редколегії 13.03.2012

Прийнята до друку 17.04.2012