

# УСТАНОВКИ И МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЯ



УДК 538.915

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ ФОСФОРА $^{31}\text{P}$ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ $^{30}\text{Si}$ ПО ТОЛЩИНЕ ОБРАЗЦА ПРИ НЕЙТРОННО-ТРАНСМУТАЦИОННОМ ЛЕГИРОВАНИИ

В.А.Абрамовский, Н.В.Абрамовская

## DISTRIBUTION OF THE $^{31}\text{P}$ SILICON IMPURITY IN A SILICON $^{30}\text{Si}$ CRYSTAL ALONG THE SPECIMEN WIDTH AT NEUTRON TRANSMUTATION DOPING

V.A.Abramovskii, N.V.Abramovskaia

*Институт электронных и информационных систем НовГУ, Victor.Abramovsky@novsu.ru,  
Natalya.Radchenko@novsu.ru*

Изучается рассеяние тепловых, холодных и ультрахолодных нейтронов, падающих на плоскую грань кристалла кремния  $^{30}\text{Si}$ . Сечения рассеяния и захвата нейтронов ядром кремния при разных значениях кинетической энергии нейтрона вычисляются из экспериментальных данных в тепловой точке  $E_k = 2,53 \cdot 10^{-2}$  эВ. Используя эти сечения, с помощью программы монте-карловского моделирования изучается перерассеяние нейтронов на ядрах кремния в кристаллической решетке. Из-за эффекта перерассеяния распределение примеси фосфора  $^{31}\text{P}$  становится неоднородным. Оно имеет регулярный характер, падающий по толщине образца. Величина концентрации примеси  $^{31}\text{P}$  на данной толщине зависит от плотности потока и энергии падающих нейтронов. Подобный физический эффект дает возможность создавать новые полупроводниковые приборы с заданными характеристиками. Разработанная монте-карловская программа моделирования перерассеяний в кристалле также может быть применена к исследованию влияния перерассеяний на другие полупроводниковые материалы, такие как германий и карбид кремния. Она также может использоваться для изучения перерассеяния электронов и протонов на кристаллах.

**Ключевые слова:** нейтрон, кремний, нейтрон-трансмутационное легирование, распределение примесей, протон

A scattering of thermal, cold and ultra-cold neutrons over the flat face of the silicon  $^{30}\text{Si}$  crystal is studied. Scattering cross sections and capture cross sections of neutrons by silicon nucleus are calculated from the experimental data in the thermal point  $E_k = 2,53 \cdot 10^{-2}$  eV. A re-scattering of neutrons on nuclei in the crystal lattice of silicon is studied by Monte Carlo simulation program using these cross sections. Phosphorus  $^{31}\text{P}$  distribution in the specimen becomes non-homogeneous because of the re-scattering effects. The inhomogeneity has a regular character along the specimen. The magnitude of  $^{31}\text{P}$  concentration in the given width of the specimen depends on the flux density and the energy of incident neutrons. Such physical effect allows one to design new semiconductor devices with desired characteristics. The developed Monte Carlo simulation program for re-scattering in a crystal can also be used to investigate the influence of re-scattering on other semiconductor materials such as germanium and silicon carbide. It can also be used to study re-scattering of electrons and protons in crystals.

**Keywords:** neutron, silicon, neutron transmutation doping, impurity distribution, proton

### Введение

Метод нейтронного трансмутационного легирования (НТЛ) полупроводников, основанный на ядерных превращениях изотопов полупроводниковых материалов при захвате медленных тепловых нейтронов [1] является эффективным инструментом для создания современных полупроводниковых материалов. Предполагается, что метод НТЛ позволяет получить высокую точность легирования и высокую однородность распределения примесей.

Концентрация легирующих примесей (например, в случае  $^{30}\text{Si}$  легирующей примесью является фосфор  $^{31}\text{P}$ ) зависит от плотности потока нейтронов и времени экспозиции легируемого образца.

Концентрация введенного фосфора  $10^{15} \text{ см}^{-3}$  при облучении природного кремния потоком нейтронов  $10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ сек}^{-1}$  достигается за 190 часов (7 дней). Концентрация  $10^{16} \text{ см}^{-3}$  будет достигнута только через 79 дней непрерывного облучения [2].

В энергетическом спектре нейтронного потока существуют быстрые нейтроны, которые разрушают порядок расположения атомов кремния в кристаллической решетке, создавая обширные области радиационных дефектов. При малом времени облучения, что соответствует слабой степени легирования, радиационные эффекты удаляются из образца при тепловом отжиге в температурном интервале 650-750°C. При большом времени легирования возникают сложные разупорядоченные комплексы дефект — примесь

фосфора, устойчивые к температурному отжигу. Отжиг этих комплексов является сложной технологической задачей.

Уменьшение концентрации радиационных дефектов можно достичь уменьшением энергии нейтронов в потоке. Пороговая энергия смещения атома кремния в кристаллической решетке  $E_d=15$  эВ [3]. Поэтому спектр тепловых нейтронов с энергией ниже 1 эВ не будет приводить к появлению радиационных дефектов.

При облучении образцов больших линейных размеров существенную роль могут играть многократные перерассеяния нейтронов на атомах кремния. Это приводит к неоднородности распределения примеси в образце. В настоящей работе используется метод Монте-Карло для моделирования облучения кристалла кремния  $^{30}\text{Si}$  нейтронами различных энергий.

### Моделирование с помощью метода Монте-Карло

Мы используем метод Монте-Карло для решения задачи о проходе нейтронов сквозь пластинку [4]. Применимость метода Монте-Карло в данном случае основывается на том, что макроскопическое сечение может быть интерпретировано как вероятность взаимодействия на единичном пути пробега нейтрона. В этом методе генерируется достаточно большое число историй нейтронов и рассматривается их судьба в ходе последовательных столкновений. Место столкновений и их результат определяются с учетом вероятностей с помощью случайных чисел. После определенного количества перерассеяний нейтроны могут быть либо поглощены веществом пластинки, либо пройти сквозь пластинку, либо отразиться от пластинки (альbedo нейтронов). Для реализации такого генератора событий используются классы программного комплекса ROOT [5].

При энергиях ниже 1 эВ сечение взаимодействия нейтрона с ядром обратно пропорционально скорости (нерелятивистской) нейтрона

$$\sigma_{\alpha} = \frac{d_{\alpha}}{(E_k/MeV)^{1/2}}, \quad (1)$$

где индекс  $\alpha$  может принимать значения  $c, el, tot$ ,  $\sigma_c$  — сечение захвата нейтрона ядром,  $\sigma_{el}$  — сечение упругого рассеяния нейтрона на ядре,  $\sigma_{tot}$  — полное сечение взаимодействия нейтрона с ядром,  $E_k$  — кинетическая энергия нерелятивистского нейтрона. Сечения нормируются в тепловой точке  $E_k=2,53 \cdot 10^{-2}$  эВ, в которой сечения рассеяния нейтрона на ядре кремния  $^{30}\text{Si}$  равны

$$\sigma_c = 0,107 \pm 0,002 \text{ барн}, \quad \sigma_{el} = 2,49 \pm 0,04 \text{ барн},$$

$$\sigma_{tot} = 2,597 \pm 0,041 \text{ барн}. \quad (2)$$

Из соотношений (2) по формуле (1) получаем для кремния  $^{30}\text{Si}$

$$d_c = 1,7 \cdot 10^{-5} \text{ барн}, \quad d_{el} = 2,327 \cdot 10^{-4} \text{ барн},$$

$$d_{tot} = 2,427 \cdot 10^{-4} \text{ барн}. \quad (3)$$

### Результаты

В таблице приведены сечения захвата, упругие и полные сечения для  $^{30}\text{Si}$  при разных кинетических энергиях налетающего нейтрона. Также приведены макроскопические сечения среды  $\Sigma_{\alpha} = N \cdot \sigma_{\alpha} \text{ см}^{-1}$  ( $N$  — число атомов/см $^3 \times 10^{24}$ ), длина свободного пробега до первого столкновения. Мы не приводим погрешности этих величин, поскольку в нашей оценке они не существенны. Интервал  $E_k = 10^{-3} \div 1$  эВ соответствует тепловым нейтронам [6] (в некоторых базах данных граница тепловых нейтронов опущена ниже  $10^{-5}$  эВ). Интервал  $E_k = 10^{-7} \div 10^{-3}$  эВ соответствует холодным нейтронам, а интервал ниже  $10^{-7}$  эВ соответствует ультрахолодным нейтронам. Было сгенерировано по одному миллиону событий прохождения нейтронов через пластинку из кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 10 см для каждой указанной энергии. Доли нейтронов, которые были поглощены материалом пластинки в результате перерассеяний, приведены в таблице.

Энергия, $E_k$ эВ	Сечение, барн	Макроскопическое сечение, см $^{-1}$	Длина свободного пробега до первого взаимодействия, см	Доля нейтронов, поглощенных при перерассеянии, %
1	$\sigma_c = 0,1702 \cdot 10^{-1}$ $\sigma_{el} = 3,96 \cdot 10^{-1}$ $\sigma_{tot} = 4,13 \cdot 10^{-1}$	$\Sigma_c = 0,085 \cdot 10^{-1}$ $\Sigma_{el} = 0,198 \cdot 10^{-1}$ $\Sigma_{tot} = 0,283 \cdot 10^{-1}$	35,2	9,59
$10^{-3}$	$\sigma_c = 0,538$ $\sigma_{el} = 12,5$ $\sigma_{tot} = 13,06$	$\Sigma_c = 0,269 \cdot 10^{-1}$ $\Sigma_{el} = 0,626$ $\Sigma_{tot} = 0,652$	1,53	35,5
$10^{-5}$	$\sigma_c = 5,38$ $\sigma_{el} = 125$ $\sigma_{tot} = 130,6$	$\Sigma_c = 0,269$ $\Sigma_{el} = 6,26$ $\Sigma_{tot} = 6,52$	0,153	43,4
$10^{-7}$	$\sigma_c = 53,8$ $\sigma_{el} = 1252$ $\sigma_{tot} = 1306$	$\Sigma_c = 2,69$ $\Sigma_{el} = 62,5$ $\Sigma_{tot} = 65,2$	0,0153	43,4

Также при генерации событий было учтено распределение поглощенных нейтронов по оси абсцисс (по толщине пластинки). Для каждой энергии мы построили гистограмму распределения вероятности поглощения нейтронов в точке с абсциссой от 0 до 10 см, с шагом в 1 см (рис.1-4).

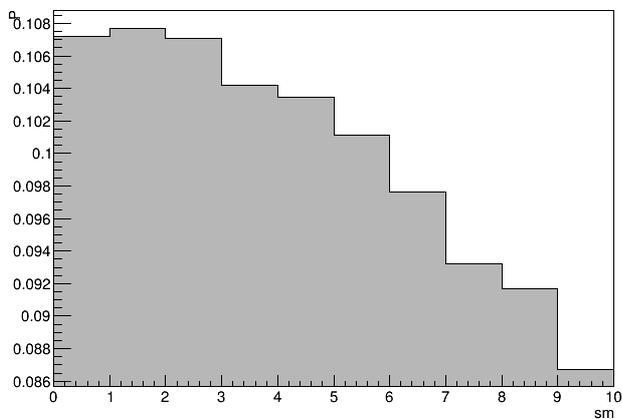


Рис.1. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=1$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 10 см

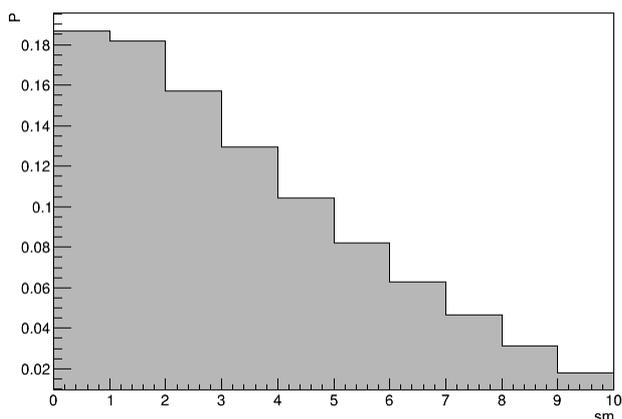


Рис.2. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=10^{-3}$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 10 см

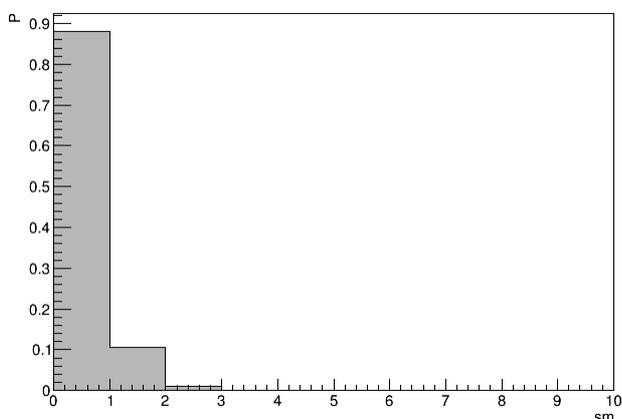


Рис.3. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=10^{-5}$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 10 см

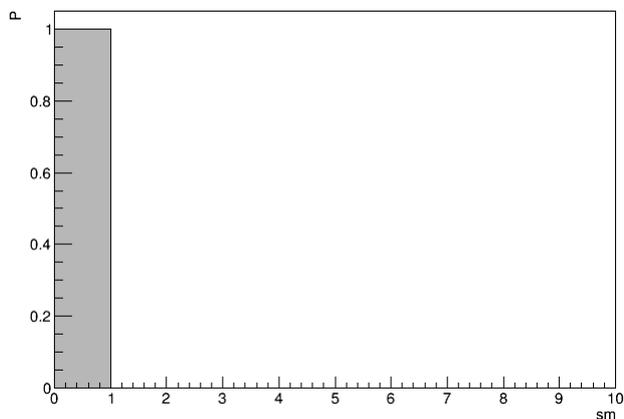


Рис.4. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=10^{-7}$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 10 см

На рис.1-4 видно, что распределение примеси по толщине образца не является однородным. Если энергия нейтронов достаточно велика, то длина свободного пробега до первого столкновения тоже достаточно большая, сравнимая с типичным размером образца. Это приводит к тому, что нейтроны поглощаются по всей толщине образца, но с большей вероятностью они будут поглощены в ближних слоях. Если энергия нейтронов мала, соответствует области холодных и ультрахолодных нейтронов, то длина свободного пробега меньше 1 см, и нейтроны будут практически полностью поглощены в первых сантиметрах образца.

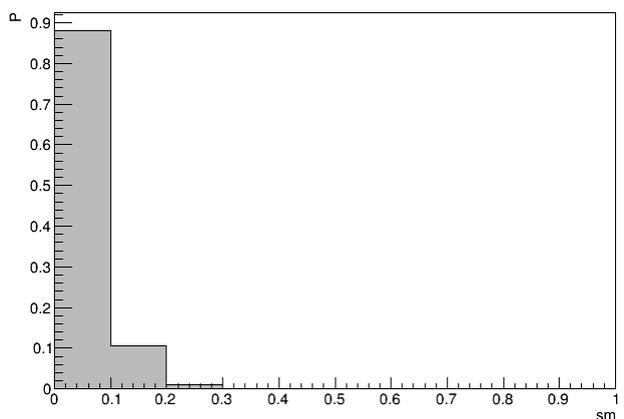


Рис.5. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=10^{-7}$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 1 см

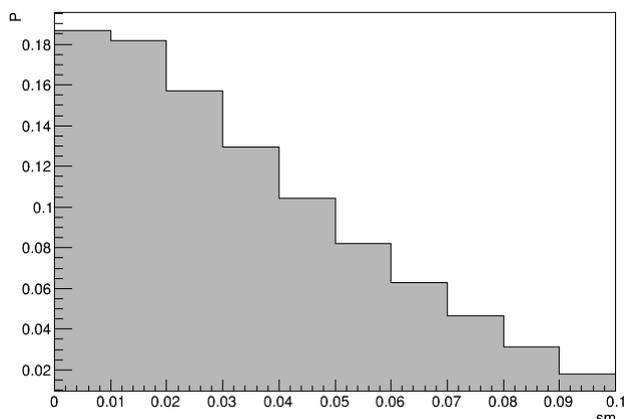


Рис.6. Гистограмма распределения вероятности поглощения нейтронов при энергии  $E_k=10^{-7}$  эВ в пластинке кремния  $^{30}\text{Si}$  толщиной 0,1 см

Для более детального исследования мы сгенерировали еще по миллиону событий для нейтронов с энергией  $E_k = 10^{-7}$  эВ для образца толщиной 1 см (рис.5) и 0,1 см (рис.6).

На рис.5, 6 видно, что даже на малой энергии в образцах небольших рамеров существует неоднородность в распределении примеси.

### Заключение

Как видно из вышесказанного, перерасеяние нейтронов на атомах  $^{30}\text{Si}$  приводит к неоднородному распределению примеси  $^{31}\text{P}$  по толщине образца. С помощью предложенного Монте-Карло генератора можно подбирать линейные размеры и энергию налетающих нейтронов, чтобы получить однородное распределение (в литературе упоминается погрешность в однородности  $\pm 5\%$  [7]). Таким образом, для каждого образца необходимы свои параметры облучения.

Еще одним важным следствием полученного результата является то, что возможно создавать вполне определенное, заранее заданное распределение примесей по толщине образца. Это может быть инструментом создания новых полупроводниковых приборов.

Разработанный Монте-Карло генератор также может описывать рассеяние электронов и протонов на ядрах кристаллической решетки (учитывая дополнительно кулоновское взаимодействие).

Н.В.Абрамовская благодарна НовГУ за финансовую поддержку — грант для молодых ученых 2013—2014 гг.

2. Ионов А.Н., Баранов П.Г., Берд Б.Я. и др. Нейтронно-трансмутационное легирование фосфором моноизотопа кремния  $^{30}\text{Si}$  // Письма в ЖТФ. 2006. №32. Вып. 12. С.87-94.
3. Вопросы радиационной технологии полупроводников / Под ред. Л.С.Смирнова. Новосибирск: Наука, 1980. 296 с.
4. Кадиллин В.В., Рябева Е.В., Самосадный В.Т. Прикладная нейтронная физика. М.: НИЯУ МИФИ, 2011. 124 с.
5. Официальный Web-сайт проекта ROOT. URL: <http://root.cern.ch> (дата обращения 11.06.2014).
6. Крючков Э.В., Юрова Л.Н. Теория переноса электронов. М.: МИФИ, 2007. 272 с.
7. Антропов Н.А., Боярко Е.Ю., Горбунов Е.К. и др. Проблемы однородного облучения слитков кремния диаметром более 200 мм при нейтронном легировании // Известия РАН. Сер. физическая. 2009. №73. Вып. 11. С.1591-1593.

### References

1. Smirnov L.S. Legirovanie poluprovodnikov metodom iademykh reaktsii [Semiconductor doping by nuclear reaction]. Novosibirsk, "Nauka" Publ., 1981. 181 p.
2. Ionov A.N., Baranov P.G., Berd B.Ia. et alr. Neitronno-transmutatsionnoe legirovanie fosforom monoizotopa kremniia  $^{30}\text{Si}$  [Neutron transmutation doping of silicon  $^{30}\text{Si}$  monoisotope with phosphorus]. Pis'ma v Zhurnal tekhnicheskoi fiziki (Pis'ma v ZhTF) – Technical Physics Letters, 2006, vol. 32, no. 12, pp. 87-94.
3. Smirnov L.S. Voprosy radiatsionnoi tekhnologii poluprovodnikov [The problems of semiconductor radiation technology]. Novosibirsk, "Nauka" Publ., 1980. 296 p.
4. Kadililn V.V., Riabeva E.V., Samosadnyi V.T. Prikladnaia neitronnaia fizika [Applied neutron physics]. Moscow, National Research Nuclear University MEPHI, 2011. 124 p.
5. Official website of the project ROOT. Available at: <http://root.cern.ch> (accessed 11.06.2014).
6. Kriuchkov E.V., Iurova L.N. Teoriia perenosa elektronov [Electron transport theory]. Moscow, MEPHI, 2007. 272 p.
7. Antropov N.A., Boiarko E.Iu., Gorbunov E.K. i dr. Problemy odnorodnogo oblucheniia slitkov kremniia diametrom bolee 200 mm pri neitronnom legirovanii [The problems of homogeneous radiation of silicon ingots with diameter of over 200 mm at neutron doping]. Izvestiia RAN, seriia fizicheskaiia – Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2009, vol. 73, no. 11, pp. 1591-1593.

1. Легирование полупроводников методом ядерных реакций / Под ред. Л.С.Смирнова. Новосибирск: Наука, 1981. 181 с.