

**ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНО-ПРОИЗВОДСТВЕННОЕ ОБЪЕДИНЕНИЕ  
«НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЦЕНТР НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ  
НАУК БЕЛАРУСИ ПО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЮ»**

**УДК 621.315.592**

**ТОЛКАЧЕВА  
Екатерина Анатольевна**

**ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЛОКАЛЬНЫХ  
КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД И ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ  
КИСЛОРОДОСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ В ОБЛУЧЕННОМ  
КРЕМНИИ**

**Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.10 – физика полупроводников**

**Минск, 2019**

Работа выполнена в Государственном научно-производственном объединении «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»

Научный руководитель: **Мурин Леонид Иванович**,  
кандидат физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник лаборатории  
радиационных воздействий ГО «НПЦ НАН  
Беларуси по материаловедению»

Официальные оппоненты: **Челядинский Алексей Романович**,  
доктор физико-математических наук, главный  
научный сотрудник кафедры физики  
полупроводников и наноэлектроники физического  
факультета Белорусского государственного  
университета

**Бумай Юрий Александрович**,  
кандидат физико-математических наук, доцент  
кафедры экспериментальной и теоретической  
физики Белорусского национального технического  
университета

Оппонирующая  
организация Научно-исследовательское учреждение «Институт  
прикладных физических проблем им.  
А.Н. Севченко» Белорусского государственного  
университета

Защита состоится «14» марта 2019 г. в 14<sup>00</sup> часов на заседании совета по защите диссертаций Д 01.06.01 при Государственном научно-производственном объединении «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению» по адресу: 220072, г. Минск, ул. П.Бровки, 19. Тел. +375 (17) 284-12-49 (ученый секретарь совета), email: ifttnanb@physics.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению».

Автореферат разослан «\_\_\_» февраля 2019 года

Ученый секретарь  
совета по защите диссертаций  
доктор физико-математических наук



Гременок В.Ф.

## **ВВЕДЕНИЕ**

Кремний по-прежнему остается базовым материалом современной полупроводниковой микро- и наноэлектроники (на его основе выпускается более 90% всех полупроводниковых приборов), и, по всем прогнозам, он будет доминировать в течение ближайших десятилетий. Наиболее важной технологической примесью (после основных легирующих) в кремнии является кислород. Кислородосодержащие центры в ряде случаев определяют оптические, электрические, рекомбинационные и другие характеристики материалов и структур. В связи с этим механизмы формирования и свойства кислородосодержащих центров в кремнии интенсивно исследуются. Об этом свидетельствуют как многочисленные публикации, так и большое количество докладов на международных конференциях.

Данная работа посвящена исследованию оптических свойств кислородных комплексов в кремнии и выяснению механизмов их образования. Типичным примером таких центров служит семейство вакансионно-кислородных центров в кристаллах Si. Благодаря высокой термической стабильности и наличию глубоких уровней кислородосодержащие дефекты могут служить эффективными центрами рекомбинации неосновных носителей заряда и использоваться в радиационной технологии изготовления кремниевых быстродействующих приборов. Кроме того, такие комплексы являются центрами зарождения кислородных преципитатов, формирование которых используется в технологии кремниевых приборов и интегральных микросхем для внутреннего геттерирования нежелательных примесей (Cu, Fe и т.д.). В связи с этим изучение оптических свойств вакансионно-кислородных центров в кремнии и установление механизмов их формирования являются актуальными задачами в области физики как полупроводниковых материалов, так и приборных структур на их основе.

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Связь работы с научными программами (проектами) и темами**

Диссертационная работа выполнена в Государственном научно-производственном объединении «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению». Тема диссертации соответствует перечню приоритетных направлений фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь на 2016 – 2020 годы, утвержденному постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 190 от 12.03.2015, в частности пункту 8. «Многофункциональные материалы и технологии».

Настоящая работа проводилась в рамках следующих программ и проектов:  
Заданий Государственных программ научных исследований:

– «Кристаллические и молекулярные структуры», задание № 25 «Исследование физических свойств монокристаллических кремния, германия, сплавов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  и приборных структур на их основе, подвергнутых радиационно-термическим воздействиям, в т. ч. легированных нетрадиционными методами. Дефектная инженерия эпитаксиальных слоев» (2006 – 2010 гг., № г.р. 20061903 от 2006 г.);

– «Функциональные и композиционные материалы, наноматериалы» задание № 1.07 «Радиационно-индуцированные эффекты в кремнии, германии, твердых растворах кремний-германий и полупроводниковых приборах на их основе, в том числе субмикронных и наноразмерных структурах» (2011 – 2013 гг., № г.р. 20112875 от 2011 г.);

– «Функциональные и композиционные материалы, наноматериалы», подпрограмма «Кристаллические и молекулярные структуры» задание № 1.08 «Инженерия радиационно-индуцированных центров в кристаллах кремния и приборных структурах на их основе» (2014 – 2015 гг., № г.р. 20143214 от 2014 г.);

– «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Материаловедение и технологии материалов», задание 1.03 «Дефектно-примесное взаимодействие и инжекционно-стимулированные реакции в кристаллах кремния, кремний-германиевых сплавах и приборных структурах на их основе» (2016 – 2020 гг., № г.р. 20160304 от 09.03.2016 г.);

Проектов Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований:

– Ф10МС-030 «Взаимодействие примесных атомов бора и кислорода в кремниевых солнечных элементах» (2010 – 2012 гг., № г.р. 20102539 от 01.05.2010 г.);

– Ф12МС-009 «Формирование радиационно-индуцированных центров с высокой термической стабильностью в p-n-структурах и барьерах Шоттки на основе Si» (2012 – 2014 гг., № г.р. 20122308 от 11.07.2012 г.);

– Т14-040 «Начальные стадии формирования внутренних геттеров в кремнии: влияние различных факторов» (2014 – 2016 гг., № г.р. 20143240 от 25.11.2014 г.);

– Ф16М-047 «Оптические и электрические свойства вакансионно-кислородных комплексов в Si» (2016 – 2018 гг., № г.р. 20163083 от 08.08.2016 г.).

### **Цель и задачи исследований**

Целью работы являлось выяснение механизмов формирования кислородосодержащих комплексов и идентификация локальных колебательных мод таких центров с учетом изотопного состава кремния в кристаллах, подвергнутых радиационным и термическим обработкам.

Для реализации поставленной цели решались следующие задачи:

– выяснение влияния изотопного состава кристаллов кремния ( $^{28}\text{Si}$  – 92,23 %,  $^{29}\text{Si}$  – 4,68 %,  $^{30}\text{Si}$  – 3,09 %) на спектроскопические характеристики полос поглощения комплексов VO и VO<sub>2</sub> и определение изотопических сдвигов локальных колебательных мод (ЛКМ) для различных изотопных модификаций структурной единицы Si-O<sub>S</sub>-Si;

– установление механизмов трансформации кислородосодержащих дефектов в температурном диапазоне 100 – 450 °С в образцах кремния, выращенных по методу Чохральского (Cz-Si) и облученных различными частицами (быстрыми электронами и нейтронами) на основе анализа оптических спектров;

– идентификация вакансионно-кислородных центров на основе анализа спектральной формы полос поглощения, используя процедуру подгонки, где было принято во внимание влияние кремниевых изотопов ( $^{29}\text{Si}$  и  $^{30}\text{Si}$ );

– использование различных видов дефектной инженерии (облучение при  $T > 300$  °С, гидрогенизация, многоступенчатое облучение) для модификации структуры и увеличения концентрации кислородосодержащих центров.

**Методом исследования** являлось компьютерное моделирование и анализ экспериментально измеренных спектров ИК поглощения для кристаллов кремния, содержащих кислородные комплексы различного типа.

**Объектом исследования** являлись кристаллы кремния, в том числе легированные атомами изотопов кислорода, содержащие кислородные центры различного типа.

### **Научная новизна**

Разработана методика анализа колебательных полос поглощения, обусловленных вакансионно-кислородными комплексами в кремнии, учитывающая влияние изотопного состава природного Si на локальные колебательные моды атомов кислорода в составе вакансионных центров. Впервые детально проанализирована термическая стабильность вакансионно-кислородных комплексов в облученных и термообработанных кристаллах кремния.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Методика анализа спектроскопических характеристик колебательных полос поглощения, обусловленных вакансионно-кислородными комплексами в облученных кристаллах кремния, впервые учитывающая изменение частот колебаний атомов кислорода в результате формирования их валентных связей с изотопами кремния  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{29}\text{Si}$  и  $^{30}\text{Si}$ . Данная методика позволяет провести идентификацию локальных колебательных мод вакансионно-кислородных центров различного типа и анализировать кинетику их формирования и отжига.

2. Закономерности формирования вакансионно-кислородных комплексов в облученных кристаллах кремния (дивакансия-кислород, тривакансия-кислород, дивакансия-два атома кислорода и тривакансия-два атома кислорода), заключающиеся в изменении их структуры на атомарном уровне (увеличении атомов кислорода или вакансий) при повышении температуры отжига в интервале  $\sim 200 - 450$  °С. Полученные данные могут быть использованы при разработке новых радиационно-технологических способов управления быстрым действием приборных структур на основе Si.

3. Использование различных видов дефектной инженерии (многоступенчатое облучение, отжиг, гидрогенизация) является определяющим фактором в трансформации и перестройке радиационно-индуцированных кислородосодержащих дефектов, в том числе обеспечивающим высокую концентрацию кислородных тримеров и возможность идентификации их локальных колебательных мод. Контроль содержания кислородных тримеров и вакансионно-кислородных комплексов оптическими методами необходим в технологии внутреннего геттерирования нежелательных примесей при создании современных кремниевых приборов и интегральных микросхем.

### **Личный вклад соискателя**

Соискателем лично проанализирована термическая стабильность вакансионно-кислородных комплексов в облученных и термообработанных кристаллах кремния, полученных методом Чохральского; проведен расчет изотопических сдвигов ЛКМ для всех возможных изотопных модификаций структурной единицы Si-O<sub>S</sub>-Si в кристаллах кремния; с учетом изотопного состава природного кремния (<sup>28</sup>Si (92,23 %), <sup>29</sup>Si (4,68 %) и <sup>30</sup>Si (3,09 %)) рассчитано соотношение амплитуд, соответствующих различным модификациям структурной единицы Si-O<sub>S</sub>-Si, используя статистический подход; проведены обработка и анализ спектров в области колебательных мод вакансионно-кислородных центров V<sub>n</sub>O (n ≥ 2) и V<sub>n</sub>O<sub>m</sub> (n ≥ 2, m ≥ 2); проведен анализ спектров ИК поглощения в кристаллах кремния с различным уровнем легирования, содержащих кислородные димеры; проведена интерпретация спектроскопических данных по радиационно-индуцированному формированию кислородных тримеров. Соавтором Маркевичем В.П. была выполнена часть экспериментальных измерений, а соавтор Коршунов Ф.П. участвовал в обсуждении полученных результатов. Анализ и интерпретация полученных данных, подготовка научных публикаций, а также выводы по диссертационной работе сделаны соискателем по итогам обсуждений результатов с научным руководителем Муриным Л.И..

## **Апробация результатов диссертации и информация об использовании ее результатов**

Изложенные в диссертации результаты докладывались на 17 международных научных конференциях: Международная научная конференция «Актуальные проблемы физики твердого тела» (Минск, Беларусь, 2009, 2011, 2016, 2018 гг.); Международная научная конференция «Материалы и структуры современной электроники» ((Минск, Беларусь, 2010, 2016, 2018 гг.); Международная конференция E-MRS (European Materials Research Society) (Страсбург, Франция, 2010, 2016, 2018 гг.); Международное совещание «Радиационная физика твердого тела» (Севастополь, 2011, 2016, 2018 гг.); Международная конференция «Актуальные проблемы физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе», «Кремний-2011» (Москва, Россия, 2011 г.); Modern Applications of Nanotechnology: The 2nd Iran-Belarus International Conference (Minsk, Belarus, 2015); Международная научно-техническая конференция «Медэлектроника-2015» (Минск, Беларусь, 2015 г.); Международный симпозиум: Перспективные материалы и технологии (Витебск, Беларусь, 2017 г.).

Результаты диссертационной работы приняты для использования в учебном процессе на кафедре физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета БГУ (получена справка о практическом использовании результатов исследования) и внедрены в технологические процессы Филиала «Транзистор» ОАО «Интеграл» для улучшения динамических параметров кремниевых приборов (получен акт о практическом использовании).

### **Опубликованность результатов диссертации**

Результаты диссертации опубликованы в 26 научных работах: 8 статей в рецензируемых научных журналах в соответствии с п. 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь (общим объемом 3,8 авторских листов), 17 статей и 1 тезис в сборниках материалов научных конференций.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из перечня условных обозначений, введения, общей характеристики работы, четырех глав основной части, заключения и библиографического списка. Полный объем диссертации составляет 124 страницы, включая 33 рисунка на 28 страницах, 10 таблиц на 10 страницах. Библиографический список содержит 140 наименований (занимает 13 страниц), включая собственные публикации соискателя ученой степени.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** приводится обоснование выбора темы диссертационной работы и ее актуальности. Определяются основные направления исследования вакансионно-кислородных центров  $V_nO$  ( $n \geq 2$ ) и  $V_nO_m$  ( $n \geq 2, m \geq 2$ ) в облученных кристаллах Si.

**Глава 1** представляет собой обзор литературных данных по теме диссертации. В ней кратко анализируются работы, посвященные исследованию как собственных дефектов вакансионного типа (вакансия, дивакансия, тривакансия), так и собственных дефектов междоузельного типа (междоузельные атомы кремния  $I$  и  $I_2$ ), и примесных кислородосодержащих центров (междоузельный кислород, кислородные димеры и тримеры, термодоноры). Представлен анализ работ по механизму образования и оптическим свойствам центров  $V_nO$  ( $n \geq 2$ ) и  $V_nO_m$  ( $n \geq 2, m \geq 2$ ), а также по определению положения полос, обусловленных данными комплексами. Имеющиеся в литературе данные о локальных колебательных модах центров  $V_nO$  ( $n \geq 2$ ) и  $V_nO_m$  ( $n \geq 2, m \geq 2$ ) весьма неоднозначны. Связано это в первую очередь с тем, что комплексы  $V_nO$  ( $n \geq 2$ ) и  $V_nO_m$  ( $n \geq 2, m \geq 2$ ) содержат такую же структурную единицу Si-O<sub>S</sub>-Si, как и комплекс VO, и частоты валентных колебаний кислорода очень близки для всех центров. На эксперименте это проявляется в том, что имеет место перекрытие полос поглощения, обусловленных разными комплексами. При этом полоса поглощения, обусловленная VO, как правило, доминирует.

Сделано заключение, что только тщательный анализ формы полос, обусловленных  $V_nO$  и  $V_nO_m$  ( $n \geq 2, m \geq 2$ ), с учетом изотопного состава кристаллов кремния, может позволить провести идентификацию локальных колебательных мод соответствующих центров, что и было сделано в настоящей диссертационной работе.

**Во второй главе** описывается методика определения положения колебательных полос путем подгонки, приведены детали расчета спектроскопических характеристик локальных колебательных мод, обусловленных валентными колебаниями примесных атомов кислорода в природном кремнии в изотопных комбинациях  $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_S-^{29}\text{Si}$  и  $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_S-^{30}\text{Si}$  ( $O_S$  – атом кислорода в вакансии). Определены геометрия (величина внутреннего угла  $\alpha = 62^\circ$ ) квазимолекулы  $^m\text{Si}-O_S-^n\text{Si}$  и значение массы взаимодействия  $m^* = 4,035$  а.е.м. для A-центра. На основе полученных значений  $\alpha$  и  $m^*$  рассчитаны изотопические сдвиги ЛКМ, которые оказались равными  $1,6 \text{ см}^{-1}$  для  $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_S-^{29}\text{Si}$  и  $3,1 \text{ см}^{-1}$  для  $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_S-^{30}\text{Si}$  по отношению к основной полосе  $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_S-^{28}\text{Si}$   $835,8 \text{ см}^{-1}$ .

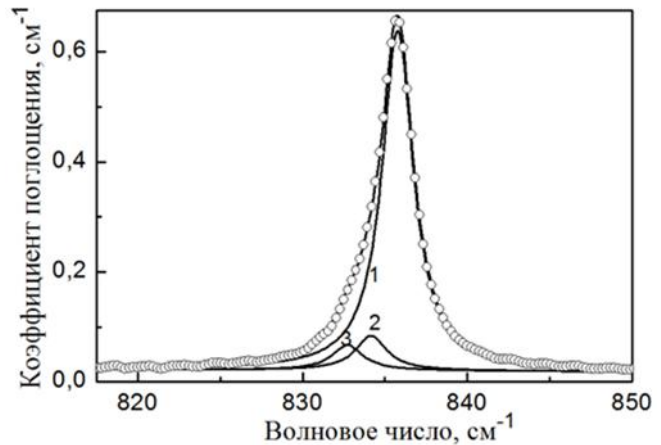
Рассчитана относительная интенсивность полос поглощения для различных изотопных модификаций структурной единицы  $^m\text{Si}-^n\text{Si}$  в природном кремнии для



дефектов VO (таблица 1). Проведена оценка изотопических сдвигов соответствующих мод полуэмпирическим путем, то есть путем подгонки формы полос поглощения VO и VO<sub>2</sub>, используя функцию Лоренца с фиксированными соотношениями амплитуд (рисунок 1), соответствующих относительным концентрациям различных изотопных комбинаций <sup>m</sup>Si-<sup>n</sup>Si.

Таблица 1. – Значения вероятностей формирования <sup>m</sup>Si-<sup>n</sup>Si и относительная интенсивность соответствующих полос

Модификация	Природный Si	
	Вероятность P, %	Относительная интенсивность
<sup>28</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>28</sup> Si	85,06	1
<sup>28</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>29</sup> Si	8,63	0,1015
<sup>28</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>30</sup> Si	5,70	0,0670
<sup>29</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>29</sup> Si	0,22	0,0026
<sup>29</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>30</sup> Si	0,29	0,0034
<sup>30</sup> Si- <sup>16</sup> O <sub>S</sub> - <sup>30</sup> Si	0,09	0,0011



1 – <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>28</sup>Si, 2 – <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>29</sup>Si,  
3 – <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>30</sup>Si

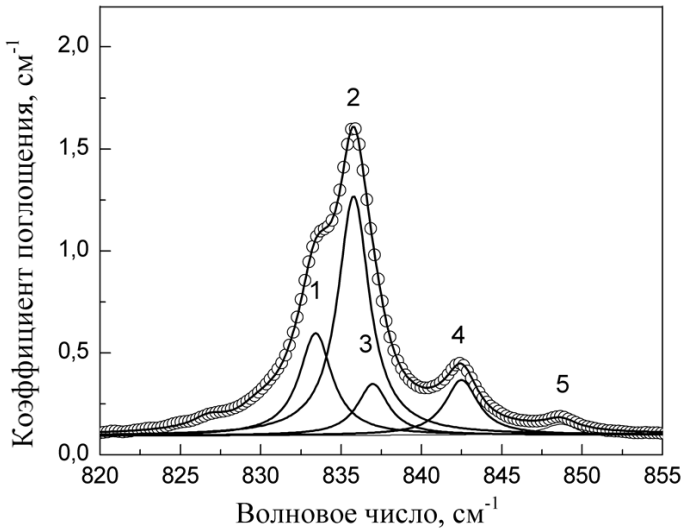
Рисунок 1. – Спектр поглощения при  $T \approx 10$  К для образца Cz-Si, облученного электронами ( $E = 10$  МэВ,  $F = 3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-2</sup>)

Полученные значения изотопических сдвигов оказались весьма близки к расчетным данным. Для А-центра – 1,51 см<sup>-1</sup> для <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>29</sup>Si и 2,92 см<sup>-1</sup> для <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>30</sup>Si по отношению к основной полосе <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>28</sup>Si 835,8 см<sup>-1</sup>, а среднее значение полуширины (16 образцов) составило 2,34 см<sup>-1</sup>.

Для центра VO<sub>2</sub> изотопические сдвиги ЛКМ оказались равными 1,59 см<sup>-1</sup> для <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>29</sup>Si и 2,99 см<sup>-1</sup> для <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>30</sup>Si по отношению к положению основной полосы <sup>28</sup>Si-<sup>16</sup>O<sub>S</sub>-<sup>28</sup>Si 895,6 см<sup>-1</sup>, а среднее значение полуширины составило 2,56 см<sup>-1</sup>.

Полученные значения вероятностей формирования <sup>m</sup>Si-O-<sup>n</sup>Si и относительная интенсивность соответствующих полос для центра VO<sub>2</sub> оказались равными таковым для центра VO.

В главе 3 обсуждается появление новых полос поглощения (рисунок 2), самые интенсивные из которых расположены при 833,4 и 842,4 см<sup>-1</sup>. Исследования 30-минутного изохронного отжига показывают (рисунок 3), что не только процессы их формирования, но также и кинетика отжига очень подобны: полосы 833,4 и 842,4 см<sup>-1</sup> исчезают одновременно после отжига в температурном диапазоне 300 – 350 °С. В то же время отношение интенсивностей этих полос различно в образцах, облученных быстрыми электронами и нейтронами, т. е.



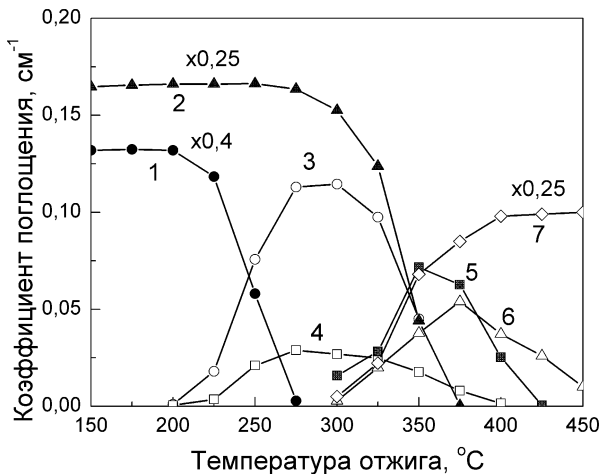
1 – 833,4 см<sup>-1</sup>; 2 – 835,8 см<sup>-1</sup>; 3 – 837,0 см<sup>-1</sup>;  
4 – 842,4 см<sup>-1</sup>; 5 – 848,7 см<sup>-1</sup>

**Рисунок 2.** – Низкотемпературный спектр поглощения для образца Cz-Si, облученного быстрыми нейтронами, после отжига при температуре 275 °С

зависит от вида облучения (энергии и массы частиц). Полоса 842,4 см<sup>-1</sup> является намного более интенсивной в случае нейтронного облучения. Относительная интенсивность полосы 842,4 см<sup>-1</sup> по отношению к полосе 833,4 составляет ~ 0,5 в образцах, облученных нейтронами, а для образцов, облученных электронами ~ 0,3. Соответственно, полосе 842,4 см<sup>-1</sup> следует приписать более сложному дефекту, а именно, комплексу V<sub>3</sub>O, который может образовываться через реакцию V<sub>3</sub>+O<sub>i</sub> ⇒ V<sub>3</sub>O.

В ходе анализа развития спектров поглощения, измеренных при низкой температуре ( $T \approx 10$  К)

для образцов Cz-Si, облученных при комнатной температуре, в процессе изохронного отжига в интервале температур 300 – 450 °С обнаружено формирование и последующий отжиг ряда новых полос, обусловленных комплексами V<sub>n</sub>O<sub>m</sub> ( $n, m \geq 2$ ). Основные из этих полос расположены при 829,3 см<sup>-1</sup>, 836,9 см<sup>-1</sup> и 844,2 см<sup>-1</sup>.



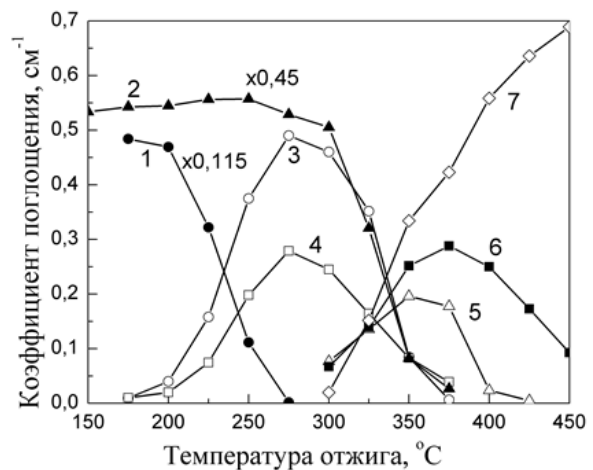
а)

а) облучение электронами ( $E = 10$  МэВ,  $F = 3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-2</sup>),

б) нейтронами ( $F = 7,5 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>)

1 – 2767 (V<sub>2</sub>); 2 – 835,8 (VO); 3 – 833,4 (V<sub>2</sub>O); 4 – 842,4 (V<sub>3</sub>O); 5 – 829,3 (V<sub>2</sub>O<sub>2</sub>);

6 – 844,2 (V<sub>3</sub>O<sub>2</sub>); 7 – 895,5 (VO<sub>2</sub>)

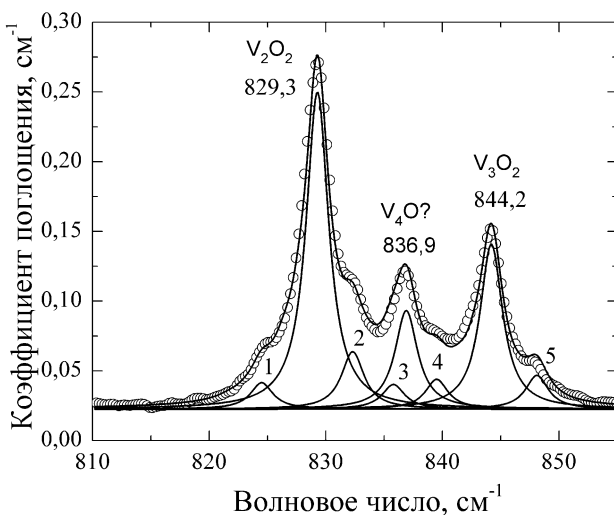


б)

**Рисунок 3.** – Зависимости коэффициента поглощения от температуры отжига

Изучение зависимости коэффициента поглощения от температуры отжига и сопоставление с данными, полученными методом электронного парамагнитного резонанса, позволило приписать полосу  $829,3 \text{ см}^{-1}$  комплексу  $V_2O_2$ . Данная полоса наиболее ярко проявляется при отжиге кислородосодержащих образцов кремния, облученных большими дозами быстрых электронов с относительно невысокой энергией ( $E \leq 10 \text{ МэВ}$ ). Из сравнения относительной интенсивности полос  $844,2 \text{ см}^{-1}$  и  $829,3 \text{ см}^{-1}$  в образцах, облученных нейтронами и электронами, полоса  $844,2 \text{ см}^{-1}$  приписана комплексу  $V_3O_2$ .

Проведено сравнение спектров измеренных при низких и при комнатных температурах для одного и того же образца Cz-Si, отожженного при  $320 \text{ }^\circ\text{C}$  в течение 30 часов после облучения электронами ( $E = 2,5 \text{ МэВ}$ ,  $F = 1,28 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$ ) при комнатной температуре (рисунки 4 и 5). Для определения положения и интенсивности полос в измеренных спектрах поглощения использовалась процедура подгонки расчетного спектра с контурами, описываемыми функцией Лоренца. Во время подгонки для каждой полосы принималось во внимание наличие полос, обусловленных присутствием всех трех изотопов кремния. Как видно из представленных данных, в спектре, измеренном при температуре  $T \approx 10 \text{ К}$ , практически отсутствуют явно выраженные признаки полосы А-центра, а также полос комплексов  $V_2O$  и  $V_3O$ ). Доминирующей полосой в интервале волновых чисел  $815\text{--}855 \text{ см}^{-1}$  является полоса  $829,3 \text{ см}^{-1}$ , соответствующая комплексу  $V_2O_2$ . В спектрах поглощения наблюдается также полоса  $844,2 \text{ см}^{-1}$ , которая обусловлена комплексом  $V_3O_2$ , и полоса  $836,9 \text{ см}^{-1}$ , которая возможно связана с комплексом  $V_4O$ .



1 – 824,5; 2 – 832,3; 3 – 835,8; 4 – 839,5;  
5 – 848,1 (положения полос в  $\text{см}^{-1}$ )

Рисунок 4. – Спектр поглощения  
( $T \approx 10 \text{ К}$ ) для образца Cz-Si

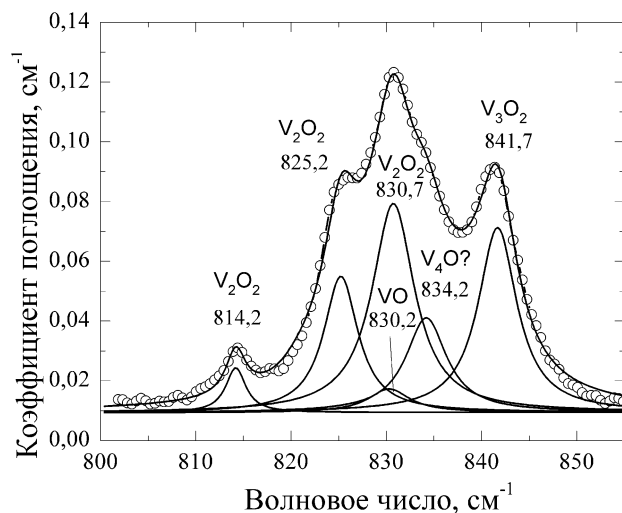


Рисунок 5. – Спектр поглощения  
( $T \approx 300 \text{ К}$ ) для образца Cz-Si

При измерениях при комнатной температуре доминирующей полосой в интервале волновых чисел  $800 - 860 \text{ см}^{-1}$  является полоса  $830,7 \text{ см}^{-1}$ . Заметно выражена также полоса  $841,7 \text{ см}^{-1}$ . В дополнение к данным полосам поглощения, в результате подгонки был выделен еще ряд менее интенсивных полос, в том числе полосы, расположенные при  $814,2 \text{ см}^{-1}$  и  $825,2 \text{ см}^{-1}$ . На основе анализа спектров ИК поглощения, измеренных при различных температурах в интервале  $10 - 300 \text{ К}$ , для образца Cz-Si, отожженного при  $320 \text{ °C}$  в течение 30 часов после облучения быстрыми электронами при комнатной температуре, сделано заключение, что комплекс  $\text{V}_2\text{O}_2$  может существовать в нескольких конфигурациях, и трансформация полос связана с различным заполнением данных конфигураций при низких и комнатных температурах.

В ходе рассмотрения возможных механизмов формирования комплексов  $\text{V}_2\text{O}_2$  и  $\text{V}_3\text{O}_2$  определены наиболее вероятные реакции, а именно, взаимодействие одиночных вакансий с комплексами  $\text{VO}_2$  приводит к образованию  $\text{V}_2\text{O}_2$ , а взаимодействие подвижных комплексов  $\text{V}_3\text{O}$  с междоузельными атомами кислорода  $\text{O}_i$  – к формированию  $\text{V}_3\text{O}_2$ :

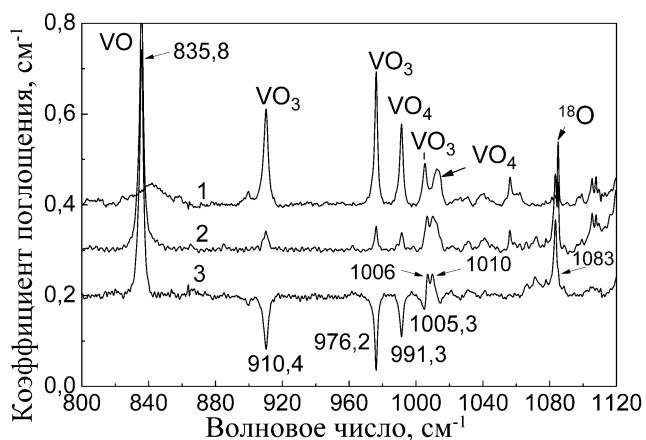


Установлено, что в кристаллах кремния, полученных методом Чохральского и облученных быстрыми электронами или реакторными нейтронами, в процессе последующего высокотемпературного отжига при  $T \geq 450 \text{ °C}$  имеет место формирование вакансионно-кислородных комплексов различного типа, обуславливающих появление ряда колебательных полос поглощения в интервале волновых чисел  $980 - 1120 \text{ см}^{-1}$ . Предполагается, что комплексы, формирующиеся в области температур  $450 - 700 \text{ °C}$  и обуславливающие полосы  $1042$ ,  $1056$  и  $1107 \text{ см}^{-1}$ , включают в свой состав не менее пяти атомов кислорода, и именно эти комплексы являются центрами зарождения кислородных преципитатов.

**В главе 4** приведены результаты исследований оптических свойств кислородных димеров и тримеров. Из анализа спектров ИК поглощения (в интервале волновых чисел  $940 - 1040 \text{ см}^{-1}$ ), измеренных при комнатной и низкой температурах, для образцов кремния *n*- и *p*-типа с различным содержанием основных легирующих ( $[\text{В}] = 1,5 \cdot 10^{14} - 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $[\text{Р}] = 7 \cdot 10^{13} - 7 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ) примесей обнаружено, что положение колебательной моды димера не зависит от типа и уровня легирования кристаллов Si, другими словами, от положения уровня Ферми. Уровень Ферми изменялся в пределах от  $E_V + 0,22 \text{ эВ}$  до  $E_C - 0,27 \text{ эВ}$  при комнатных температурах ( $T \approx 300 \text{ К}$ ) и от  $E_V + 0,05 \text{ эВ}$  до  $E_C - 0,05 \text{ эВ}$  при низких температурах. Отсюда следует, что кислородные димеры в исследуемых кристаллах находились в нейтральном зарядовом состоянии.

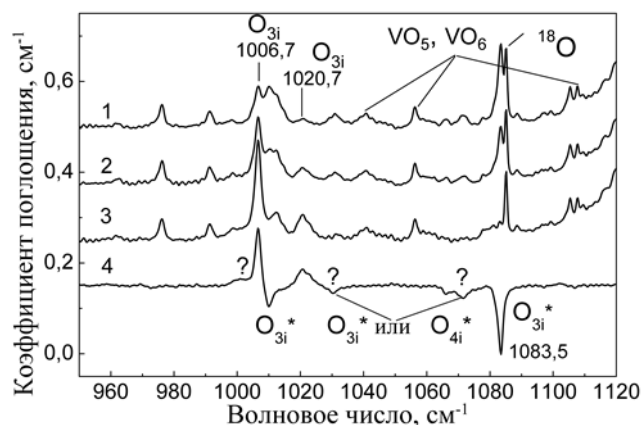
Методом ИК поглощения исследована кинетика отжига (трансформации) кислородных димеров ( $O_{2i}$ ) и комплексов вакансии – кислородный димер ( $VO_2$ ) в кристаллах кремния, обогащенных данными центрами путем предварительного облучения быстрыми электронами при повышенных температурах (300 – 400 °С). На основе анализа экспериментальных данных оценены коэффициенты диффузии  $O_{2i}$  и  $VO_2$ .

Используя различные виды дефектной инженерии удалось значительно увеличить концентрацию малых кислородных кластеров. Самая высокая концентрация дефекта  $O_{3i}$  достигнута в образцах, сначала обогащенных комплексом вакансии-три атома кислорода ( $VO_3$ ), а затем облученных быстрыми электронами при комнатной температуре ( $F = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ ) (рисунок 6). В результате взаимодействия радиационно-индуцированных собственных междоузельных атомов кремния с  $VO_3$  происходит эффективная генерация метастабильных комплексов, включающих три междоузельных атома кислорода. На основе анализа результатов проведенного изохронного отжига образцов, облученных при комнатной температуре, установлено, что эти комплексы ответственны за ЛКМ с частотами 556, 1010 и 1083  $\text{см}^{-1}$  и устойчивы до 250 °С (рисунок 7).



3 – разностный спектр: спектр 1 – спектр 2

Рисунок 6. – Спектры поглощения для образцов Cz-Si, облученных электронами ( $E = 2 \text{ МэВ}$ ,  $F = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$ ) при 350°С, отожженных в течение 5 минут при 595 °С (спектр 1) и после облучения при комнатной температуре (спектр 2)



1 – 200 °С; 2 – 250 °С; 3 – 275 °С;

4 – разностный спектр: 275 °С – 200 °С  
Рисунок 7. – Спектры поглощения для образца Cz-Si (рисунок 6), измеренные после различных стадий 30-минутного изохронного отжига

При более высоких температурах они преобразуются в устойчивую форму кислородного тримера и ответственны за полосы 537, 723, 1006 и 1020  $\text{см}^{-1}$ , которые наблюдались также при “горячем” облучении ( $T \geq 350 \text{ °С}$ ).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

### Основные научные результаты диссертации

1. В настоящей работе разработана методика определения изотопических ( $^{28}\text{Si}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{30}\text{Si}$ ) смещений валентных колебаний для квазимолекул типа Si-O<sub>S</sub>-Si в кристаллах кремния. Определены изотопические сдвиги для различных изотопных модификаций структурной единицы Si-O<sub>S</sub>-Si в комплексах вакансия-кислород и вакансия-два атома кислорода. С учетом изотопного состава природного кремния ( $^{28}\text{Si}$  (92,23 %),  $^{29}\text{Si}$  (4,68 %) и  $^{30}\text{Si}$  (3,09 %)) рассчитано соотношение амплитуд, соответствующих различным изотопным модификациям структурной единицы Si-O<sub>S</sub>-Si, используя статистический подход [3, 15, 26].

2. Поведена аппроксимация полос поглощения в области ЛКМ вакансионно-кислородных центров V<sub>n</sub>O (n = 1, 2, 3) лоренцианами. Показано, что комплексу дивакансия-кислород соответствует ЛКМ 833,4 см<sup>-1</sup>, а комплексу тривакансия-кислород соответствует ЛКМ 842,4 см<sup>-1</sup> [4, 10].

3. Исследованы процессы образования и отжига вакансионно-кислородных комплексов V<sub>n</sub>O<sub>2</sub> в облученных быстрыми электронами и нейтронами кристаллах кремния, полученных методом Чохральского. Приведен ряд аргументов, позволяющих идентифицировать низкотемпературные полосы поглощения 829,3 см<sup>-1</sup> и 844,2 см<sup>-1</sup> как обусловленные локальными колебательными модами комплексов V<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и V<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, соответственно [6–8, 16–21, 23, 24].

4. Показано, что в облученных кристаллах кремния, полученных методом Чохральского, после отжига при  $T \geq 450$  °C имеет место формирование комплексов VO<sub>m</sub> (m ≥ 5), которые являются центрами зарождения кислородных преципитатов [5, 9, 13].

5. На основе анализа спектров поглощения показано, что положение колебательных мод кислородных димеров и форма соответствующих полос поглощения не зависят от положения уровня Ферми. Полученные результаты свидетельствуют о том, что кислородные димеры являются электрически неактивными центрами в кремнии. Из анализа экспериментальных данных по кинетике формирования комплексов VO<sub>4</sub> и VO<sub>3</sub> определены диффузионные характеристики O<sub>2i</sub> и VO<sub>2</sub> [2, 11, 14, 22].

6. Путем использования различных видов дефектной инженерии удалось значительно увеличить концентрацию кислородных тримеров в кристаллах Cz-Si. В результате анализа соответствующих спектров ИК поглощения установлено, что эти комплексы ответственны за колебательные полосы 537, 723, 1006 и 1020 см<sup>-1</sup> [1, 12, 25].

### **Рекомендации по практическому использованию результатов**

Определены механизмы перестройки вакансионно-кислородных комплексов в процессе термических отжигов кристаллов кремния, облученных высокоэнергетическими частицами, а также термическая стабильность таких центров, что может использоваться при разработке новых радиационно-технологических способов управления быстродействием приборных структур на основе Si, а также для прогнозирования радиационной стойкости кремниевых кристаллов и структур.

Контроль содержания вакансионно-кислородных комплексов и кислородных тримеров оптическими методами необходим в технологии внутреннего геттерирования нежелательных примесей при создании современных кремниевых приборов и интегральных микросхем.

Результаты диссертационной работы приняты для использования в учебном процессе на кафедре физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета БГУ (получена справка о практическом использовании результатов исследования) и внедрены в технологические процессы Филиала «Транзистор» ОАО «Интеграл» для улучшения динамических параметров кремниевых приборов (получен акт о практическом использовании).

### **СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ**

#### **Статьи в рецензируемых научных журналах**

1. Murin, L.I. Local vibrational modes of the oxygen trimer in Si / L.I. Murin, E.A. Tolkacheva, V.P. Markevich, A.R. Peaker, B.G. Svensson, J.L. Lindström // *Physica Status Solidi. C.* – 2011. – Vol. 8, № 3. – P. 709–712.
2. Murin, L.I. The oxygen dimer in Si: Its relationship to the light-induced degradation of Si solar cells? / L.I. Murin, E.A. Tolkacheva, V.P. Markevich, A.R. Peaker, B. Hamilton, E. Monakhov, B.G. Svensson, J.L. Lindström, P. Santos, J. Coutinho, A. Carvalho // *Applied Physics Letters.* – 2011. – Vol. 98, № 18. – P. 182101 (1–3).
3. Толкачева, Е.А. Влияние изотопного состава природного кремния на локальные колебательные моды вакансионно-кислородных комплексов / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // *Журнал прикладной спектроскопии.* – 2013. – Т. 80, № 4. – С. 586–590.
4. Толкачева, Е.А. Исследование вакансионно-кислородных комплексов в облученных быстрыми электронами и нейтронами кристаллах кремния методом ИК-поглощения / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // *Вестці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук.* – 2014. – № 2. – С. 101–104.

5. Толкачева, Е.А. Особенности трансформации кислородосодержащих центров в кремнии при отжиге в интервале температур 450–700 °С: данные ИК поглощения / Е.А. Толкачева, О.Н. Холод, Л.И. Мурин // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. – 2016. – № 1. – С. 124–128.

6. Толкачева, Е.А. Локальные колебательные моды комплекса дивакансия-два атома кислорода в кремнии / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин, Ф.П. Коршунов // Доклады НАН Беларуси. – 2016. – № 3. – С. 51–56.

7. Толкачева, Е.А. Оптические свойства и механизм образования вакансионно-кислородных комплексов  $V_2O_2$  и  $V_3O_2$  в облученных кристаллах кремния / Е.А. Толкачева, В.П. Маркевич, Л.И.Мурин // Физика и техника полупроводников. – 2018. – Т. 52, № 9. – С. 973–979 [Semicond. Vol. 52, №. 9. – P. 1097–1103].

8. Murin, L.I. Interaction of radiation-induced self-interstitials with vacancy-oxygen related defects  $V_nO_2$  (n from 1 to 3) in silicon / L.I. Murin, E.A. Tolkacheva, S.B. Lastovskii, V.P. Markevich, J. Mullins, A.R. Peaker, B.G. Svensson // Physica Status Solidi. A [Electronic resource]. – 2018. – Mode of access: <https://doi.org/10.1002/pssa.201800609>. – Date of access: 24.01.2019.

### **Статьи в сборниках трудов конференций**

9. Murin, L.I. Oxygen-related nanoclusters formed upon thermal double donor annihilation in silicon / L.I. Murin, E.A.Tolkacheva, B.G. Svensson // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2009: Сб. докладов Междунар. конф., Том 3, Минск, 20–23 окт. 2009 г. / Издатель А.Н. Вараксин; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.] – Минск, 2009. – С. 14–16.

10. Толкачева, Е.А. Колебательные моды комплексов дивакансия-кислород и тривакансия-кислород в кремнии / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // Материалы и структуры современной электроники: Сб. науч. тр. 4-й Междунар. науч. конф., Минск, 23–24 сент. 2010 г. / БГУ; под ред.:В.Б. Оджаева [и др.]. – Минск, 2010. – С. 124–127.

11. Толкачева, Е.А. О локальных колебательных модах кислородных димеров в кремнии n- и p- типа / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2011: Сб. докладов Междунар. науч. конф., Том 2, Минск, 18–21 октября 2011г. / Издатель А.Н. Вараксин; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Минск, 2011. – С. 351–353.

12. Толкачева, Е.А. Радиационно-ускоренное формирование кислородных тримеров в кремнии / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // Радиационная физика твердого тела: труды 21-й Междунар. конф., Севастополь, 22–27 авг. 2011 г. / под ред. Бондаренко Г.Г. – Москва, 2011. – С. 504–513.



13. Murin, L.I. Vacancy-oxygen nanoclusters and enhanced oxygen precipitation in silicon / L.I. Murin, E.A. Tolkacheva // Modern Applications of Nanotechnology: Proc. of the 2nd Iran-Belarus Intern. Conf., Minsk, Belarus, 6–8 May 2015. – P. P096 (1–6).

14. Medvedeva, I.F. Calibration factors for the determination of radiation-induced oxygen-vacancy complexes and oxygen dimer concentrations in silicon crystals by infrared absorption / I.F. Medvedeva, L.I. Murin, E.A. Tolkacheva, V.P. Markevich // Медэлектроника-2015. Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: Сб. науч. статей 9-й Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 4-5 декабря 2015 г. / БГУИР; редкол.: Л.М. Лыньков [и др.]. – Минск, 2015. – С. 170–172.

15. Толкачева, Е.А. Колебательные моды центра  $VO_2$  в облученных кристаллах кремния / Е.А. Толкачева // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2016: Сб. докладов Междунар. науч. конф., Том 2, Минск, 22–25 ноября 2016 г. / Издательство: Ковчег; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Минск, 2016. – С. 252–254.

16. Толкачева, Е.А. Локальные колебательные моды комплексов дивакансия- два атома кислорода и тривакансия- два атома кислорода в кремнии / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. 7-й Междунар. науч. конф., Минск, 12–13 окт. 2016 г. / БГУ; редкол.: В.Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2016. – С. 168–171.

17. Мурин, Л.И. Оптические свойства комплекса дивакансия-два атома кислорода в кремнии / Л.И. Мурин, Е.А. Толкачева // Радиационная физика твердого тела: труды 26-й Междунар. Конференции, Севастополь, 4–9 июля 2016 г. / под ред. Бондаренко Г.Г. – Москва, 2016. – С. 307–316.

18. Мурин, Л.И. Инженерия кислородосодержащих центров в кремнии: формирование комплексов  $VO_2^*$  при комнатной температуре / Л.И. Мурин, Е.А. Толкачева // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2016: Сб. докладов Междунар. науч. конф., Том 2, Минск, 22–25 ноября 2016 г. / Издательство: Ковчег; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Минск, 2016. – С. 204–206.

19. Мурин, Л.И. Диффузионные характеристики кислородных димеров и комплексов вакансия – два атома кислорода в кремнии: данные ИК поглощения / Л.И. Мурин, Е.А. Толкачева, В.П. Маркевич // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. 7-й Междунар. науч. конф., Минск, 12–13 окт. 2016 г. / БГУ; редкол.: В.Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2016. – С. 171–174.

20. Толкачева, Е.А. Формирование комплексов дивакансия-два атома кислорода и тривакансия-два атома кислорода в облученных кристаллах кремния / Ф.П. Коршунов, В.А. Гуринович, Л.И. Мурин // Перспективные

материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Часть 1, Витебск, 22–26 мая 2017 г. / Издательство: УО «ВГТУ»; редкол.: В.В. Рубаник (пред.) [и др.]. Витебск, 2017. – С. 260–262.

21. Толкачева Е.А. Особенности процессов радиационного дефектообразования при облучении быстрыми электронами кристаллов Si, содержащих вакансионно-кислородные комплексы / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин, В.П. Маркевич // Радиационная физика твердого тела: труды 28-й Междунар. конф., Севастополь, 9–14 июля 2018 г. / под ред. Бондаренко Г.Г. – Москва, 2018. – С. 185–192.

22. Мурин, Л.И. Инженерия кислородосодержащих центров в кремнии: определение коэффициента диффузии кислородных димеров / Л.И. Мурин, Е.А. Толкачева // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2018: Сб. докладов Междунар. науч. конф., Том 2, Минск, 24–28 сентября 2018г. / Издательство: Ковчег; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Минск, 2018. – С. 146–148.

23. Толкачева, Е.А. Оптические свойства и механизм образования комплекса  $V_3O_2$  в облученных кристаллах кремния / Е.А. Толкачева // Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2018: Сб. докладов Междунар. науч. конф., Том 2, Минск, 24–28 сентября 2018г. / Издательство: Ковчег; редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Минск, 2018. – С. 157–159.

24. Инженерия кислородосодержащих центров в кремнии: радиационно-индуцированные трансформации вакансионно-кислородных комплексов  $VO_2$ ,  $V_2O_2$  и  $V_3O_2$  / Л.И. Мурин, Е.А. Толкачева, С.Б. Ластовский, В.П. Маркевич // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. 8-й Междунар. науч. конф., Минск, 11 – 12 окт. 2018 г. / редкол.: В.Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.]. – Минск: БГУ, 2018. – С. 167–171.

25. Толкачева, Е.А. Радиационно-индуцированное формирование кислородных тримеров в кремнии: данные ИК-поглощения / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. 8-й Междунар. науч. конф., Минск, 11–12 окт. 2018 г. / редкол.: В.Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.]. – Минск: БГУ, 2018. – С. 197–200.

### **Тезисы докладов**

26. Толкачева, Е.А. Влияние изотопного состава природного кремния на форму полосы поглощения, обусловленной комплексом вакансия-кислород / Е.А. Толкачева, Л.И. Мурин, И.Ф. Медведева // Актуальные проблемы физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе («Кремний-2011»): Тезисы докладов 8-й Междунар. конф., Москва, 5–8 июля 2011 г. / Изд-во НИТУ. – Москва, 2011. – С. 122.

## РЕЗЮМЕ

Толкачева Екатерина Анатольевна

### **Инфракрасная спектроскопия локальных колебательных мод и термическая устойчивость кислородосодержащих комплексов в облученном кремнии**

**Ключевые слова:** кремний, облучение, отжиг, вакансионно-кислородные комплексы, локальные колебательные моды, изотопный состав.

**Цель работы:** выяснение механизмов формирования кислородосодержащих комплексов и идентификация локальных колебательных мод таких центров с учетом изотопного состава кремния в кристаллах, подвергнутых радиационным и термическим обработкам.

**Методы исследования:** компьютерное моделирование и анализ экспериментально измеренных спектров ИК поглощения для кристаллов кремния, содержащих кислородные центры различного типа.

**Полученные результаты и их новизна:** разработана методика определения изотопических ( $^{28}\text{Si}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{30}\text{Si}$ ) смещений валентных колебаний для квазимолекул типа  $\text{Si-O}_S\text{-Si}$  в кристаллах кремния. Определены изотопические сдвиги для различных изотопных модификаций структурной единицы  $\text{Si-O}_S\text{-Si}$  в комплексах вакансия-кислород и вакансия-два атома кислорода. Проведена идентификация локальных колебательных мод комплексов дивакансия-кислород, тривакансия-кислород, дивакансия-два атома кислорода и тривакансия-два атома кислорода, и выяснены механизмы формирования и трансформации данных центров. Установлено, что положение колебательных мод кислородных димеров и форма соответствующих полос поглощения в кремнии не зависят от положения уровня Ферми, что свидетельствует об отсутствии электрической активности у данных центров. Проведена идентификация локальных колебательных мод кислородных тримеров в результате исследования кристаллов Si, в которых с использованием различных видов дефектной инженерии была существенно увеличена концентрация комплексов  $\text{O}_{3i}$ .

**Рекомендации по использованию и область применения:** контроль и управление содержанием вакансионно-кислородных нанокластеров, являющихся центрами зарождения кислородных преципитатов, которые используются в технологии кремниевых приборов и интегральных микросхем для внутреннего геттерирования нежелательных примесей. Разработанный метод обработки ИК спектров может применяться в дальнейшем для анализа более сложных спектров.

## РЭЗІЮМЭ

**Талкачова Кацярына Анатольеўна**

### **Інфрачырвоная спектраскапія лакальных вагальных мод і тэрмічная ўстойлівасць комплексаў, змяшчаючых кісларод, у апрамененым крэмнію**

**Ключавыя словы:** крэмній, апрамяненне, адпал, вакансійна-кіслародныя комплексы, лакальныя вагальныя моды, ізатопны склад.

**Мэта работы:** высвятленне механізмаў фарміравання комплексаў, змяшчаючых кісларод, і ідэнтыфікацыя лакальных вагальных мод такіх цэнтраў з улікам ізатопнага складу крэмнія ў крышталях, падвергнутых радыяцыйным і тэрмічным апрацоўкам.

**Метады даследавання:** камп'ютарнае мадэляванне і аналіз эксперыментальна вымераных спектраў ІЧ паглынання для крышталяў крэмнію, якія змяшчаюць кіслародныя цэнтры рознага тыпу.

**Атрыманыя вынікі і іх навізна:** распрацавана метадыка вызначэння ізатапічных ( $^{28}\text{Si}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{30}\text{Si}$ ) зрушэнняў валентных ваганняў для квазімалекул тыпу  $\text{Si-O}_s\text{-Si}$  ў крышталях крэмнію. Вызначаны ізатапічныя зрушэнні для розных ізатопных мадыфікацый структурнай адзінкі  $\text{Si-O}_s\text{-Si}$  ў комплексах вакансія-кісларод і вакансія-два атамы кіслароду. Праведзена ідэнтыфікацыя лакальных вагальных мод комплексаў дывакансія-кісларод, трывакансія-кісларод, дывакансія-два атамаы кіслароду і трывакансія-два атамы кіслароду, і высветлены механізмы фарміравання і трансфармацыі дадзеных цэнтраў. Устаноўлена, што становішча вагальных мод кіслародных дымераў і форма адпаведных палос паглынання ў крэмнію не залежаць ад становішча ўзроўню Фермі, што сведчыць аб адсутнасці электрычнай актыўнасці ў дадзеных цэнтраў. Праведзена ідэнтыфікацыя лакальных вагальных мод кіслародных трымераў ў выніку даследавання крышталяў  $\text{Si}$ , у якіх з выкарыстаннем розных відаў дэфектнай інжынерыі была істотна павялічана канцэнтрацыя комплексаў  $\text{O}_{3i}$ .

**Рэкамендацыі па выкарыстанню і вобласць прымянення:** кантроль і кіраванне зместам вакансійных-кіслародных нанакластараў, якія з'яўляюцца цэнтрамі зараджэння кіслародных прэцыпітатаў, якія выкарыстоўваюцца ў тэхналогіі крамянёвых прыбораў і інтэгральных мікрасхем для ўнутранага гетэрыравання непажаданых прымешак. Распрацаваны метады апрацоўкі ІЧ спектраў можа прымяняцца ў далейшым для аналізу больш складаных спектраў.

## SUMMARY

**Katsiaryna Talkachova**

### **Infrared spectroscopy of local vibrational modes and thermal stability of oxygen-related complexes in irradiated silicon**

**Keywords:** silicon, irradiation, annealing, vacancy-oxygen-related complexes, local vibrational modes, isotopic composition.

**The purpose:** to elucidate the formation mechanisms of oxygen-related complexes and to identify the local vibrational modes of such centers taking into account the isotopic composition of silicon in crystals subjected to radiation and thermal treatments.

**Experimental techniques:** computer simulation and analysis of experimentally measured IR absorption spectra for silicon crystals containing various types of oxygen-related centers.

**Obtained results and their novelty:** a technique has been developed for determining the isotopic ( $^{28}\text{Si}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{30}\text{Si}$ ) displacements of stretching vibrations for quasi-molecules of the Si-O<sub>S</sub>-Si type in silicon crystals. The isotopic shifts are determined for different Si isotope modifications of the Si-O<sub>S</sub>-Si unit in the vacancy-oxygen and two-oxygen-vacancy complexes. The local vibrational modes of the divacancy oxygen, trivacancy-oxygen, divacancy-two oxygen atoms and trivacancy-two oxygen atoms defects were identified and the mechanisms of formation and transformation of these centers were determined. It has been found that the position of the vibrational modes of oxygen dimers and the shape of the corresponding absorption bands in silicon do not depend on the position of the Fermi level thus indicating an absence of the electrical activity of these centers. The local vibrational modes of oxygen trimers were identified in the studies of the Si crystals, in which the concentration of O<sub>3i</sub> complexes was significantly increased due to using various types of defect engineering.

**Recommendations for use and area of application:** control and management of the content of vacancy-oxygen nanoclusters which are the nucleation centers of oxygen precipitates used in the technology of silicon devices and integrated circuits for internal gettering of undesirable impurities. The developed method of the IR spectra treatment can be further applied for an analysis of more complicated spectra.



Подписано в печать 31.01.2019.  
Формат 60×84/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.  
Усл. печ. л. 1,16. Тираж 60 экз. Заказ №55.

ГНУ «ФТИ НАН Беларуси».  
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,  
распространителя печатных изданий № 2/12 от 21.11.2013.  
220141, ул. Купревича, 10, г. Минск.