

Исследование методом XAFS пленки Si₃N₄ после Zn/O имплантации

Е.В. Храмов¹, В.В. Привезенцев², В.С. Куликаускас³

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», 123182 Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» - НИИСИ, 117218 Москва, Россия

³ Институт ядерной физики им. Д.В. Скобелыцина, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Нанокластеры (НК), внедренные в прозрачную диэлектрическую матрицу и обладающие интересными оптическими свойствами, могут рассматриваться как перспективные материалы для оптоэлектронных устройств. В частности, НК оксида цинка ZnO смогут найти применение в оптоэлектронике, [1], поскольку оксид цинка является прямозонным материалом с шириной запрещенной зоны 3,37 эВ и имеет большую энергию связи электрона и дырки в экситоне 60 мэВ.

Здесь мы представляем результаты исследования методом XAFS-спектроскопии пленки Si₃N₄, последовательно имплантированной цинком и кислородом и подвергнутой термообработке в Ar. Пленки нитрида кремния толщиной 120 нм были созданы на поверхности монокристаллического Cz n-Si (111) методом PECVD. Они имплантировались ионами ⁶⁴Zn⁺ с дозой 5×10¹⁶/см² и энергией 60 кэВ, а затем ионами ¹⁶O⁺ с энергией 20 эВ и дозой 7×10¹⁶/см². Во время имплантации плотность тока ионного пучка составляла менее 0,5 мкА/см². После имплантации пластины подвергались изохронной термообработке в течение 1 часа в атмосфере Ar при температурах от 400 до 800°C с шагом 100°C на каждом шаге.

Спектры XAFS на К-крае цинка для образцов после Zn/O имплантации и после отжига при 700°C измерялись в флуоресцентном режиме на станции «СТМ» Курчатовского источника синхротронного излучения [2].

По данным XANES, в обоих образцах цинк находится преимущественно в фазе металла. Спектры XANES для обоих образцов (рис.1 А) сходны со спектром металлического цинка, но искажены, что может быть обусловлено разупорядочением локальной структуры цинка (НК, твердый раствор цинка в кремнии) или небольшой долей фаз с другой координацией Zn.

Данные EXAFS и результаты моделирования с помощью программного пакета IFEFFIT [3] представлены на рис.1 В и в таблице 1. Для исходного образца пики от нескольких координационных сфер значительно уширены и сливаются в один широкий пик в диапазоне 1 – 3 Å. Модель из трех путей рассеяния фотоэлектронов (Zn-O и два Zn-Zn) удовлетворительно описывает данные EXAFS, что согласуется с данными XANES: цинк находится в исходном образце преимущественно в металлических НК с тетрагональной структурой, представляющих собой чистый Zn или твердый раствор Zn-Si. Небольшая часть цинка находится в составе фазы, в которой цинк координирован кислородом: в оксиде ZnO или силикате Zn₂SiO₄.

Для образца, отожженного при 700°C, на рис.1 В видны 2 отчетливых пика, соответствующих координации Zn-O и Zn-Zn: происходит упорядочение локальной структуры цинка в виде двух типов – металлических и оксидных частиц. Координационное число (КЧ) как для кислорода, так и для металла при отжиге увеличивается, что, вероятно, вызвано укрупнением частиц обеих фаз в ходе отжига, но все еще значительно меньше объемных значений для металла и оксида, т.е. обе цинксодержащие фазы после отжига остаются нано-дисперсными.

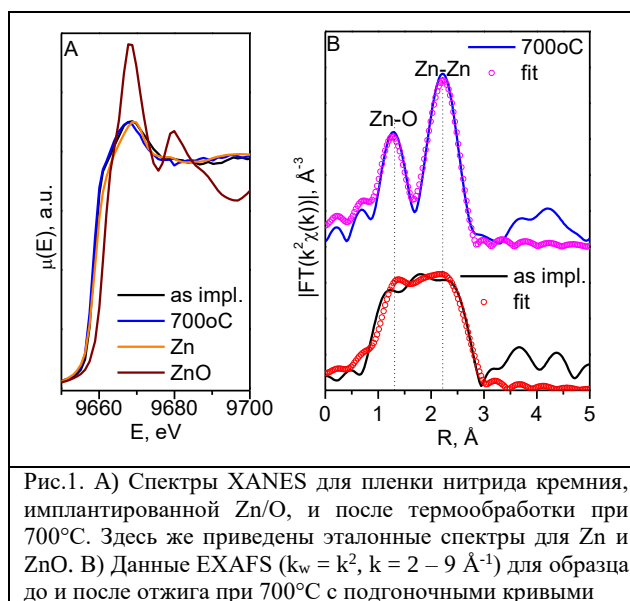


Рис.1. А) Спектры XANES для пленки нитрида кремния, имплантированной Zn/O, и после термообработки при 700°C. Здесь же приведены эталонные спектры для Zn и ZnO. Б) Данные EXAFS ($k_w = k^2$, $k = 2 - 9 \text{ \AA}^{-1}$) для образца до и после отжига при 700°C с подгоночными кривыми

Таблица 1. Результаты моделирования EXAFS на К-крае Zn. Весовой коэффициент k^2 , диапазон Фурье-преобразования $k = 2 - 9 \text{ \AA}^{-1}$, диапазон межатомных расстояний $R = 1.0 - 2.8 \text{ \AA}$, R_f - фактор расхождимости при моделировании

Образец	Путь рассеяния	КЧ	R, Å
as impl. $R_f = 1.0\%$	Zn-O	0.9 ± 0.2	1.93 ± 0.06
	Zn-Zn	2.6 ± 0.5	2.56 ± 0.04
	Zn-Zn	2.6 ± 0.5	2.75 ± 0.05
700°C $R_f = 1.4\%$	Zn-O	0.5 ± 0.1	1.83 ± 0.06
	Zn-Zn	6.6 ± 3.0	2.62 ± 0.03

1. Litton C.W., Collins T.C., Reynolds D.S. Zinc Oxide Materials for Electronic and Optoelectronic Device Application, Wiley, Chichester, 2011.
2. A. Chernyshov, A. Veligzhanin, Y. Zubavichus. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A, 2009, 603, 95-98.
3. B. Ravel. J. Synchrotron. Rad., 2005, 12, 537-541.