

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫСОКОДОЗНОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ДВУХ ТИПОВ ИОНОВ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СОЕДИНЕНИЙ A^3B^5 В КРЕМНИИ

А.Ф. Комаров, В.В. Михайлов, С.А. Мискевич
Институт прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко БГУ,
ул. Курчатова, 7, Минск, 220045, Беларусь, komarAF@bsu.by

Разработана физико-математическая модель и программное обеспечение для моделирования процесса высокодозной имплантации мышьяка и индия в кремний, учитывающая радиационно-стимулированную диффузию примеси, распыление и распухание мишени, а также образование новой фазы. Экспериментально установлено формирование нанокластеров кристаллического $InAs$ со средним диаметром 7 нм и плотностью их распределения $2,87 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ в процессе имплантации As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) и In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) при $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ в Si.

Введение

Концентрационные профили легирования при низких дозах имплантации, в случае отсутствия диффузионного и химически управляемого перераспределения примеси теоретически достаточно хорошо изучены в работах [1, 2]. Однако для высоких флюенсов ионов ($\Phi > 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) формирование профилей примеси определяется не только кинетикой атомных столкновений, но и процессами, связанными с накоплением примеси в мишени, распылением поверхности мишени, диффузией примеси, атомным перемешиванием, образованием новых фаз во время имплантации и радиационным распуханием [3-5]. Известно, что в зависимости от характера экспериментальных условий и физико-химических свойств атомов мишени и примесей названные процессы могут проявляться в различной мере, что приводит к необходимости корректировки существующих моделей и используемых диффузионно-кинетических параметров.

Типичный разброс кластеров по размерам, регистрируемый в ионно-имплантированной системе, составляет 20–50 % [6]. Такой разброс кластеров по размерам неприемлем для многих приложений, в частности, в оптоэлектронике. Поэтому установление основных закономерностей зародышеобразования и роста (перестройки) кластеров новых фаз при ионно-лучевых воздействиях, а также поиск путей управления распределением нанокластеров по размерам является стратегической задачей исследователей на ближайшие годы [7–9].

Методика эксперимента

Пластины кремния с кристаллографической ориентацией (001) имплантировались сначала ионами As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), а затем ионами In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$). Для предотвращения процесса аморфизации за счет накопления большого количества радиационных дефектов при имплантации больших флюенсов тяжелых ионов подложки подогревались до $500 \text{ }^\circ\text{C}$.

Экспериментальные данные и их обсуждение

Проведено экспериментальное исследование по высокодозной имплантации As и In в кремний

при температуре $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$. На рис. 1 представлены светлопольная микрофотография, полученная методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), и картина электронной дифракции. Имплантация ионов мышьяка и индия при $500 \text{ }^\circ\text{C}$ не приводит к аморфизации имплантированного слоя кремния. Наряду со вторичными дефектами структуры (микродвойники) регистрируется большое количество мелких кластеров внедренной примеси. На диаграмме рис. 1 представлено распределение данных кластеров по размерам.

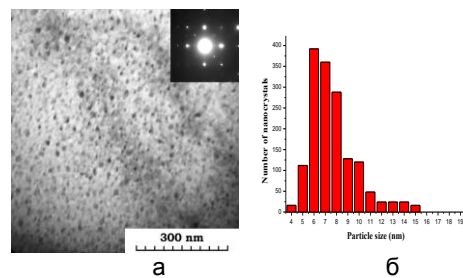


Рис. 1. Светлопольная ПЭМ микрофотография с картиной электронной дифракции (а) и распределение нанокластеров $InAs$ по их размерам (б).

На рис. 2 представлены спектры комбинационного рассеяния света (КРС) кремниевого образца до имплантации, после имплантации ионами As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) и In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), а также после термообработки.

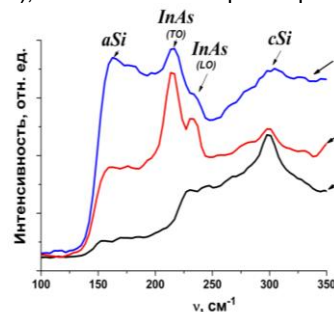


Рис. 2. Спектр комбинационного рассеяния света пластины кремния до имплантации (кривая 1), после имплантации ионами As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) и In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) (кривая 2) и после отжига ($900 \text{ }^\circ\text{C}$, 60 мин) (кривая 3). Основная полоса КРС исходного кремния (521 см^{-1}) лежит вне зоны наших интересов и здесь не приводится.

В спектре имплантированного образца появились слабые полосы при 160 см^{-1} , 216 см^{-1} , 235 см^{-1} и 300 см^{-1} . Полоса с максимумом при частоте 300 см^{-1} , более интенсивно проявившаяся в спектре неимплантированного образца, связана с рассеянием на продольных акустических фононах в кремнии [9]. Появление после имплантации в спектре широкой полосы с максимумом около 160 см^{-1} , соответствующей поперечным акустическим фононам в кремнии, является характерным признаком наличия аморфных включений кремния [9]. Полосы с максимумами при 216 см^{-1} и 235 см^{-1} соответствуют поперечным (TO) и продольным (LO) оптическим фононам кристаллического $InAs$ [10]. Проявление этих полос в спектрах неотожженного образца, говорит о том, что процесс формирования нанокристаллов происходит уже на этапе имплантации.

После отжига интенсивность полосы при 160 см^{-1} заметно уменьшилась, что говорит о восстановлении кристаллической структуры имплантированного слоя кремния (отжиг дефектов). Интенсивность полос, связанных с продольными и поперечными фононами в кристаллическом $InAs$, заметно увеличилась. Следовательно, дополнительная термообработка приводит к усилению процесса формирования нанокристаллов $InAs$ в кремниевой матрице.

Теоретическая модель

Разработана модель расчета концентрационных профилей распределения примесей при высокодозной ионной имплантации в условиях, когда формирование профилей примесей определяется не только кинетикой атомных столкновений, но и процессами, связанными с накоплением примесей в мишени, распылением поверхности мишени, диффузией примесей, образованием новых фаз во время имплантации и радиационным распуханием.

В соответствии с проведенными экспериментами вначале моделировался процесс ионной имплантации As (250 кэВ , $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), а затем In (250 кэВ , $2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) при $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ в Si .

Уравнение для моделирования процесса высокодозной ионной имплантации As в Si имеет вид:

$$\frac{\partial N_{As}(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[G_{As}(z,t) N_{As}(z,t) + D_{As}(z,t) \frac{\partial N_{As}(z,t)}{\partial z} \right] + f_{As}^i(z,t), \quad (1)$$

Система уравнений для моделирования процесса высокодозной ионной имплантации In в кремний, в который предварительно был имплантирован As , представлена уравнениями (2-3):

$$\frac{\partial N_{In}(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[G_{In}(z,t) N_{In}(z,t) + D_{In}(z,t) \frac{\partial N_{In}(z,t)}{\partial z} \right] + f_{In}^i(z,t) - f_{In}^r(z,t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_{In}(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} [G_{In}(z,t) n_{In}(z,t)] + f_{In}^r(z,t), \quad (3)$$

Где уравнением (2) представлен поток несвязанных атомов In в кремнии, а (3) - поток атомов In , вступивших в соединение с ранее имплантированными атомами As

$f_{As}^i(z,t)$, $f_{In}^i(z,t)$ — функция распределения ионов, имплантированных в окрестности точки z в единицу времени t ;

$G_{As}(z,t)$, $G_{In}(z,t)$ — локальная скорость перемещения атомов As , In в момент времени t на глубине z относительно поверхности мишени, обусловленная распылением и распуханием мишени;

$N_{As}(z,t)$, $N_{In}(z,t)$ — концентрация атомов As , In в зависимости от времени t и глубины z ;

$f_{In}^r(z,t)$ — функция, численно равная количеству атомов In , вступивших в соединение с ранее имплантированными атомами As в единице объема за единицу времени.

Уравнения (1), (2), (3) представляют собой систему уравнений конвекции-диффузии-реакции. Такая модель является основной [3] для описания процессов перераспределения примеси при достаточно высоких интегральных дозах облучения.

Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными

Физико-математическая модель высокодозной ионной имплантации As и In в Si базируется на численном решении систем уравнений конвекции-диффузии-реакции (1), (2), (3).

На рис. 3 приведены расчетные и экспериментальные концентрационные профили распределения имплантированного мышьяка с энергией $E = 170 \text{ кэВ}$ и флюенсом $\Phi = 3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ в кремнии. Как видно из рис. 3, моделируемый профиль достаточно хорошо соответствует экспериментальному.

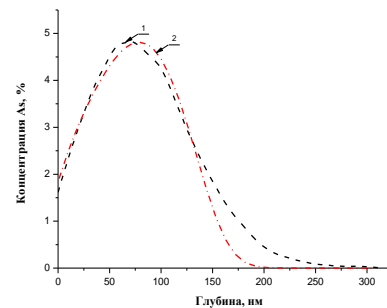


Рис. 3. Глубинные распределения концентрации атомов мышьяка в кремнии:

1 — эксперимент, 2 — расчет.

На рисунке 4 приведены расчетные и экспериментальные концентрационные профили распределения имплантированного индия с энергией $E = 250 \text{ кэВ}$ и флюенсом $\Phi = 2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ в кремнии, предварительно имплантированном мышьяком ($E = 170 \text{ кэВ}$, $\Phi = 3,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$). Из полученных

экспериментальных результатов следует, что часть атомов $\approx 10\%$ имплантированного индия при $T = 500\text{ }^\circ\text{C}$ находится в связанном состоянии с атомами, предварительно имплантированного мышьяка, т.е. в виде нанокластеров кристаллического InAs со средним размером $\approx 7\text{ нм}$. Доля связанных атомов индия с атомами мышьяка в кремнии представлена кривой 4 на рис. 4.

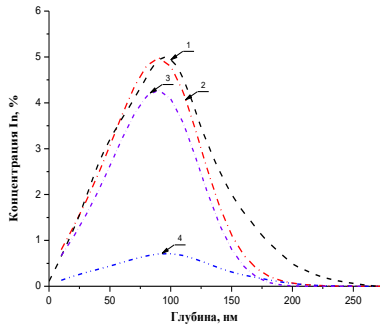


Рис. 4. Глубинные распределения концентрации атомов индия в кремнии: 1 — эксперимент, 2–4 — расчет, 2 — суммарная концентрация атомов индия в кремнии, 3 — несвязанные атомы индия с атомами мышьяка, 4 — атомы индия находящиеся в связанном состоянии с атомами мышьяка, т.е. в виде нанокластеров InAs

Заключение

Проведена имплантация As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$) и In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$) в монокристаллический кремний при $T = 500\text{ }^\circ\text{C}$. Методом ПЭМ и КРС установлено формирование нанокластеров кристаллического InAs со средним диаметром 7 нм и плотностью их распределения $2,87 \cdot 10^{11}\text{ см}^{-2}$ в процессе имплантации As (170 кэВ, $3,2 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$) и In (250 кэВ, $2,8 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$) при $T = 500\text{ }^\circ\text{C}$ в Si .

Разработана физико-математическая модель и программное обеспечение для моделирования процесса высокодозной имплантации мышьяка и индия в кремний, учитывающая радиационно-стимулированную диффузию примеси, распыление и набухание мишени, а также образование новой фазы. В модели реализован учет зависимости коэффициента диффузии соответствующей примеси от концентрации созданных ею дефектов по глубине имплантации

мышьяка и индия в кремний. В рамках модели рассчитан концентрационный профиль распределения по глубине образца атомов In и As , как связанных в нанокластеры InAs , так и в свободном состоянии.

На основе анализа полученных экспериментальных и теоретических данных определены средние значения коэффициентов радиационно-стимулированной диффузии индия ($D_{\text{In}} = 7,56 \cdot 10^{-16}\text{ см}^2/\text{с}$) и мышьяка ($D_{\text{As}} = 2,68 \cdot 10^{-16}\text{ см}^2/\text{с}$) в кремнии. Разработанная физико-математическая модель и программное обеспечение позволяют наряду с определением средних значений коэффициентов радиационно-стимулированной диффузии имплантированной примеси в кремнии определить также долю примеси, находящуюся в связанном состоянии, т.е. в виде нанокластеров InAs .

Список литературы

1. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985. Ziegler J.F., Biersack J.P., SRIM: The Stopping and Range of Ions in Matter, Version 96.07 IBM-Research, Yorktown, 1996.
2. Burenkov A.F., Komarov F.F., Kumakhov M.A., Temkin M.M. Tables of ion implantation spatial distributions. New York-London-Paris: Gordon and Breach, 1986. 462 p.
3. Комаров А.Ф. Процессы взаимодействия ионов и электронов с твердыми телами при высокодозном и высокоэнергетическом облучении: Дис. д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07 / Минск, БГУ. 2005. 209 с.
4. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. Мн.: УП «Технопринт», 2001. 393 с.
5. Schönborn A., Hecking N., Kaat E.H. // Nucl. Instr. and Meth. 1989. Vol. B43. P. 170–175.
6. Mattei G., Mazzoldi P., Bernas H. Metal nanoclusters for optical properties, in: Materials Science with Ion Beams (ed. H. Bernas). Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. P. 287–316.
7. Yuan C.W., Boswell C.N., Shin S.J., Ziao C.Y., Guzman J., Ager III J.W., Haller E.E., Chrzan V.C. // Appl. Phys. Lett. 2005. Vol. 95, P. 083120 (1–3).
8. Yang Y., Zhang Ch., Song Y., Gou J., Zhang Z., Meng Y., Zhang H., Ma Y. // Nucl. Instr. and Meth. 2013. Vol. B308. P. 24–27.
9. Krashennnikov A.V., Norlund K. // J. Appl. Phys. 2010. Vol. 107. P. 071301 (1–70).
10. Lifshitz I., Slezof V. // J. Phys. Chem. Solids. 1961. Vol. 19. P. 35.

SIMULATION OF HIGH-FLUENCE DOUBLE-ION IMPLANTATION INTO SILICON TO FORM III-V COMPOUND QUANTUM DOTS

A.F. Komarov, V.V. Michailov, S.A. Miskiewicz
Elionics laboratory, Institute of Applied Physics Problems, BSU,
7, Kurchatov street, Minsk, 220045, Belarus, komarAF@bsu.by

We have developed numerical model and corresponding software in order to simulate high-fluence implantation of As and In ions into silicon. The simulation framework takes into account four involved processes: impurity diffusion and formation of InAs nano-clusters, as well as sputtering and swelling of silicon due to the double-ion implantation. Furthermore, the respective experimental investigations have been performed. The experiments proved formation of crystalline InAs nano-clusters with mean size of 7 nm and surface density of about $2,87 \cdot 10^{11}\text{ см}^{-2}$ in silicon samples irradiated at $500\text{ }^\circ\text{C}$ with 170 keV As and 250 keV In ions with total ion fluence of $3,2 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$ and $2,8 \cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$, respectively.