

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

А.И. Урбанович (Минск, Беларусь)

В последние годы ионно-лучевые методы обработки материалов приобрели большое значение в науке и технике. Особое место ионно-лучевые методы занимают в технологии производства полупроводниковых приборов и интегральных схем, где они применяются почти на всех этапах изготовления этих устройств.

Проблема взаимодействия высокоинтенсивных ионных пучков с полупроводниковыми кристаллами и практического их использования тесно связана с разогревом мишени в ходе облучения и ограничениями на пространственно-временную структуру этих пучков [1]. С одной стороны, нагрев полупроводниковых пластин позволяет реализовать, например, режимы самоотжиговой ионной имплантации, отличительной особенностью которых является объединение в одной операции дозированного внедрения примесных атомов и одновременного отжига создаваемых радиационных нарушений. С другой стороны, современные микроэлектронные устройства состоят в основном из тонких полупроводниковых пленок из Si или GaAs, либо диэлектриков, а также металлов. Уменьшение устройств до субмикронных размеров сопровождается не только

увеличением их быстродействия до долей наносекунд, но и возрастанием локального уровня тепловыделения. Это ведет к серии кратковременных термических нагрузок на устройство. Чтобы спрогнозировать поведение устройств в таких условиях необходимо знать, как протекают тепловые процессы в тонких пленках на коротких временах. Это представляется также важным и в импульсно-лазерной обработке материалов, где быстрый нагрев материала происходит благодаря воздействию высокомогных лазерных импульсов с наносекундной длительностью. В области взаимодействия на коротких временах это может вызывать повышение температуры материала до уровня, превышающего температуру, при которой происходит фазовый переход за очень короткий промежуток времени.

Для дальнейшего роста плотности упаковки элементов микросхем и их быстродействия необходимо применение технологических процессов, уменьшающих отрицательные воздействия высоких температур на поверхностные слои и полупроводниковые пленки. Анализ возможных путей нагрева кремниевых структур показывает, что наиболее перспективным здесь является нагрев в импульсных режимах, поскольку такие режимы значительно сокращают время термообработки, и, как следствие, уменьшают негативное влияние длительных высокотемпературных процессов [2].

Таким образом, моделирование тепловых процессов, возникающих в полупроводниковых структурах при их облучении импульсными ионными и лазерными пучками, представляет значительный интерес как с точки зрения понимания физических процессов происходящих при этом в веществе, так и с позиций практических приложений.

В настоящем сообщении приведены результаты математического моделирования тепловых процессов, возникающих в полупроводниковых кристаллах при их облучении импульсными ионными пучками.

Хорошо известно, что распределение внедренных из ионного пучка примесей по расстоянию от поверхности полупроводника существенно отличается от распределений, имеющих место после проведения термодиффузии. В отличие от концентрации продиффундировавших с поверхности примесей, которая характеризуется, как правило, монотонным убыванием с глубиной от поверхности, при внедрении моноэнергетических ионов характерно наличие максимума концентрации в глубине вещества.

Пусть вещество имеет вид бесконечного слоя, а пучок ионов движется в направлении оси OX . Распределение температуры для такой задачи будет удовлетворять следующему уравнению теплопроводности:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + kf(x)\psi(t) \quad (4)$$

с начальным условием

$$T|_{t=0} = T_0 \quad (5)$$

и граничным условием

$$\chi \frac{\partial T}{\partial x} - h(T^4 - T_0^4)|_{x=0} = 0, \quad (6)$$

где k – объемная мощность теплового источника; $f(x)$ – безразмерная пространственная функция тепловыделения; $k\psi(t)$ – функция, описывающая мощность тепловыделения на единицу объема для импульсного режима облучения, $h = \alpha_e \sigma$ – коэффициент теплообмена с окружающей средой.

Функцию $\psi(t)$ зададим в виде последовательности прямоугольных импульсов длительности t_0 :

$$\psi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \{ \eta(t - n(\alpha + 1)t_0) - \eta(t - t_0 - n(\alpha + 1)t_0) \}, \quad (7)$$

где $\eta(t)$ – функция Хевисайда

$$\eta(t) = \begin{cases} 1, & \text{если } t \geq 0, \\ 0, & \text{если } t < 0, \end{cases}$$

α – параметр, определяющий величину временного промежутка между импульсами. Случай $\alpha = 0$ соответствует непрерывному облучению.

Функцию $f(x)$ можно аппроксимировать следующим образом:

$$f(x) = \exp\left(-\frac{x}{x_p}\right), \quad f(x) = \frac{x}{x_p} \exp\left(-\frac{x}{x_p}\right),$$

где x_p – параметр, линейно связанный с длиной среднего пробега частиц R_p .

Первый случай может соответствовать взаимодействию пучка невысокой интенсивности, содержащем ионы разных энергий, когда максимальное тепловыделение происходит на границе $x = 0$. Второй случай соответствует взаимодействию мощного пучка ионов с мишенью, например, при создании утопленных слоев, когда максимальное тепловыделение происходит на глубине x_p , связанной со средним пробегом ионов в среде.

Введем безразмерные величины и параметры

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_0}, \quad \xi = \frac{x}{x_p}, \quad \tau = \frac{t}{t_0}, \quad \kappa = \frac{\chi t_0}{x_p^2 \rho c}, \quad \bar{k} = \frac{k t_0}{\rho c T_0}, \quad \bar{h} = \frac{\alpha_e \sigma x_p T_0^3}{\chi}.$$

Тогда задача (1)–(4) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \kappa \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \bar{k} f(\xi) \psi(\tau), \\ \theta|_{t=0} &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial \xi} - \bar{h} [(\theta + 1)^4 - 1] \Big|_{\xi=0} &= 0, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\psi(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \{ \eta[\tau - n(\alpha + 1)] - \eta[\tau - 1 - n(\alpha + 1)] \}, \quad \eta = \begin{cases} 1, & \tau \geq 0, \\ 0, & \tau < 0. \end{cases}$$

$$f(\xi) = \begin{cases} e^{-\xi}, \\ \xi e^{-\xi}. \end{cases}$$

Задача (5) решалась численно на прямоугольной разностной сетке с постоянными шагами по времени и пространству. Температура на каждом временном слое определялась из полученных систем трехточечных уравнений методом прогонки.

На рис. 1 и 2 приведены характерные графики зависимости безразмерной температуры θ от величин ξ и τ в случае когда $f(\xi) = e^{-\xi}$, т.е. в случае когда источник тепла находится на границе $\xi = 0$.

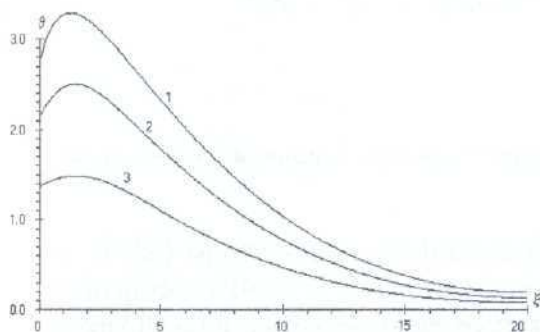


Рис. 1. Зависимость θ от ξ при $\tau=30$;
 1 - $\alpha = 0$, 2 - $\alpha = 0.5$, 3 - $\alpha = 2$

Из рис. 1 видно, что максимальная температура мишени находится не на поверхности кристалла, а смещена вглубь среды на некоторое расстояние, величина которого практически одинакова при всех рассмотренных значениях α . Такое поведение температуры связано с нелинейным характером потерь на излучение на границе $\xi = 0$, согласно закону Стефана-Больцмана. Наибольшее значение θ достигается при $\alpha = 0$.

На рис.2 представлена зависимость $\theta(\tau)$ при тех же значениях α . При $\alpha = 0$ температура монотонно возрастает. При $\alpha = 0.5$ и $\alpha = 2$ ее рост имеет осциллирующий характер, причем амплитуда осцилляций возрастает с ростом α .

При использовании функции $f(\xi) = \xi e^{-\xi}$ качественно характер зависимостей $\theta(\xi)$ и $\theta(\tau)$ остается таким же.

Литература

1. Урбанович А.И., Подлипко Ю.А., Шалима В.Н. Температурные поля при облучении кристаллов ионными пучками переменной мощности //Вестн. БГУ. Сер 1. 1990. № 1. С. 9-11.

2. Пилипенко В.А. Быстрые термообработки в технологии СВИС. Минск: Изд. центр БГУ, 2004.

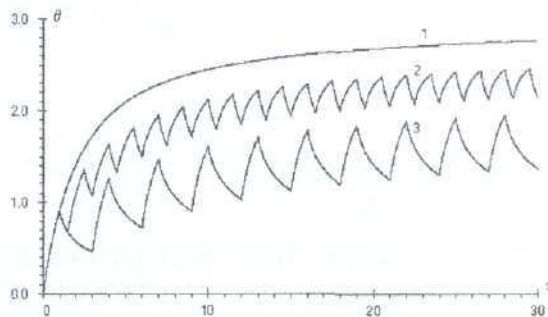


Рис. 2. Зависимость θ от τ при $\xi=0$;
 1 - $\alpha = 0$, 2 - $\alpha = 0.5$, 3 - $\alpha = 2$