

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ ИМПЛАНТИРОВАННОГО БОРА В КРЕМНИИ

А.Р. Челядинский, В.Б. Оджаев

Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь, Chelyadinski@bsu.by

Исследована диффузия имплантированного бора в кремнии (дозы ионов $6 \cdot 10^{13}$ – $3.7 \cdot 10^{15}$ см⁻²) при быстром термическом отжиге и отжиге в печи в зависимости от длительности отжига, содержания радиационных дефектов (дополнительное облучение ионами Si⁺), легирования слоев примесью Ge или С. Коэффициент диффузии бора определяется перераспределением его по междоузельному и вакансионному каналам в результате взаимодействия с точечными дефектами. При ламповом отжиге атомы бора вытесняются в быстрый междоузельный канал междоузельными атомами Si, и коэффициент диффузии бора превышает собственное значение при 1050°C в 10 раз. С истощением избыточных атомов Si и захватом примеси на избыточные вакансии коэффициент диффузии бора (термоотжиг в печи) уменьшается в 10 раз по сравнению с собственным значением. Коэффициент диффузии бора достигает собственного значения через 60 мин отжига при 1050°C. Система уравнений диффузии бора с учетом дефектно-примесного взаимодействия описывает экспериментальные профили.

Введение

Аномалии в диффузии ионно-имплантированного бора в кремнии не находили долгое время однозначной интерпретации. Замедление диффузии имплантированного бора при термоотжиге по сравнению с обычной диффузией в объемном кремнии связывали с захватом примесей на ловушки типа дислокационных петель, дефектов упаковки [1], захватом на избыточные вакансии [2]. Вместе с тем, и ускорение диффузии внедренного бора при быстром термическом отжиге (секундные длительности) также связывалось с диффузией бора по избыточным вакансиям [3]. В нашей работе исследовано влияние радиационных дефектов на диффузию имплантированного бора как в процессе быстрого термического отжига, так и термоотжига в печи. Концентрация дефектов в слоях варьировалась путем предварительного облучения ионами Si⁺ различными дозами. В работе изучалась также диффузия бора в слоях, содержащих ловушки для определенного типа дефектов, чтобы прояснить роль вакансионных и междоузельных дефектов в диффузионных процессах. Чтобы выделить вклады различных механизмов в наблюдаемые аномалии в диффузии бора изучалась зависимость коэффициента диффузии от времени

Результаты и их обсуждение

Зависимость коэффициента диффузии имплантированного бора от времени отжига исследована при ламповом отжиге длительностью до 30 с и затем при термоотжиге в печи. Для импульсного отжига при длительности 7 с коэффициент диффузии в 10 раз превышает собственное значение. С увеличением длительности лампового отжига коэффициент диффузии падает и при временах более 17 с становится меньше собственного значения. При увеличении длительности термоотжига в печи до 40 мин коэффициент диффузии бора приближается к собственному значению.

Исследования диффузии имплантированного бора в зависимости от концентрации в слоях радиационных дефектов дали следующие результаты: При низких дозах ионов бора ($6 \cdot 10^{13}$ см⁻²) без дополнительного облучения ионами Si⁺ кон-

центрация дефектов составляла $7 \cdot 10^{18}$ см⁻³, коэффициент диффузии D ($7 \cdot 10^{-13}$ см²с⁻¹) при ламповом отжиге (1050°C, 15 с) превышал собственное значение ($1 \cdot 10^{-13}$ см²с⁻¹) в 7 раз. С ростом концентрации радиационных дефектов D увеличивался до $7 \cdot 10^{-12}$ см²с⁻¹, т.е. в 10 раз. Это обусловлено вытеснением части атомов бора из узлов в быстрый канал диффузии междоузельными атомами Si (эффект Воткинса). При средних дозах ионов B⁺ ($6 \cdot 10^{14}$ см⁻²) коэффициент диффузии возрастал от $2 \cdot 10^{-12}$ до $3.5 \cdot 10^{-12}$ см²с⁻¹, т.е. всего в 1.7 раза. При больших дозах ионов бора ($3.7 \cdot 10^{15}$) дополнительное введение радиационных дефектов не приводит к росту коэффициента диффузии, что указывает на существование собственного внутреннего источника ускоренной диффузии бора при его больших концентрациях.

При термоотжиге в печи при низкой дозе ионов B⁺ ($6 \cdot 10^{13}$ см⁻²) концентрация дефектов в слое ($7 \cdot 10^{18}$ см⁻³) сравнима с объемной концентрацией бора и захват его на избыточные вакансии приводит к уменьшению коэффициента диффузии. С увеличением концентрации дефектов коэффициент диффузии бора растет с $1.5 \cdot 10^{-14}$ см² до $8 \cdot 10^{-14}$ см²с⁻¹ в результате диффузии по избыточным вакансиям. Но и в пределе при дозе ионов Si⁺ $6 \cdot 10^{14}$ см⁻² (начало аморфизации слоя) коэффициент диффузии не достигает собственного значения, поскольку в этом случае исключается быстрый канал диффузии по междоузлиям.

При средних дозах ионов B⁺ ($6 \cdot 10^{14}$ см⁻²) объемная концентрация бора в слое больше концентрации дефектов вследствие того, что начиная с дозы ионов $1 \cdot 10^{14}$ см⁻² дефекты накапливаются сублинейно ($C_{\text{деф}} \sim \Phi^{0.5}$). Поэтому только с дополнительным облучением ионами Si⁺ коэффициент диффузии B⁺ уменьшается с $3 \cdot 10^{-13}$ до $7 \cdot 10^{-14}$ см²с⁻¹.

Полученные результаты говорят о двухпоточной диффузии бора в кремнии, и скорость диффузии по междоузлиям выше скорости диффузии по вакансиям.

Введение в имплантированный слой примесей С (рис. 1) или Ge (рис. 2) приводит к снижению коэффициента диффузии бора. Это обусловлено тем, что эти примеси являются ловушками для

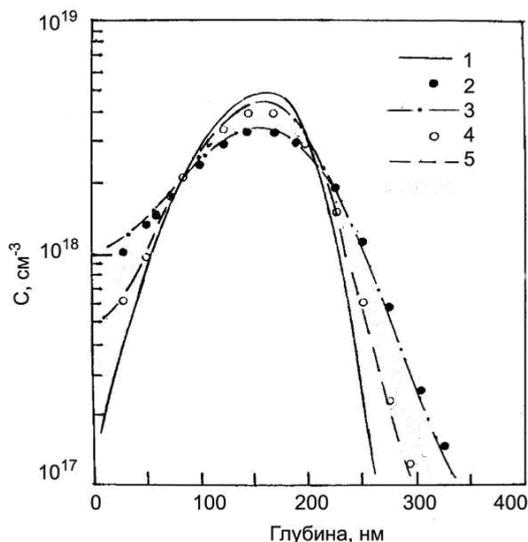


Рис. 1. Профили диффузии имплантированного бора ($6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, 45 кэВ) в кремнии (2, 3) и в слоях кремния, предварительно легированных углеродом дозой $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (4, 5). Ламповый отжиг, 1050°C , 15 с. 1 - исходн. расч. 2, 4 - эксп., 3, 5 - расч.

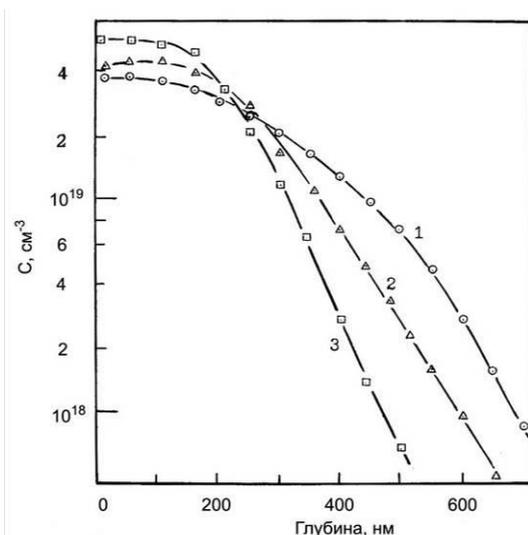


Рис. 2. Профили диффузии имплантированного бора $1.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ в кремнии (1) и в слоях кремния, предварительно легированных германием (2,3): 2 - $\text{Ф}_{\text{Ge}} = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, 3 - $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$

междоузельных атомов Si через эффект Воткинса. Предположение авторов [4], что ускоренная диффузия бора обусловлена упругими напряжениями несоответствия вследствие различия в периодах решетки имплантированного слоя и подложки не подтверждается нашими экспериментами. Противоположное воздействие атомов Ge и C на решетку кремния и одинаковый характер влияния их на коэффициент диффузии бора говорит о том, что упругие напряжения на границе слоя и подложки не ускоряют его диффузию.

Для описания диффузии имплантированного бора в кремнии записана следующая система уравнений:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - K_{bsr} C_i C_{B^s} - K_{bi} C_i C_v \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{B^s}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{B^s} \frac{C_v}{C_v^{eg}} \frac{\partial C_{B^s}}{\partial x} \right) - K_{bsr} C_i C_{B^s} + K_{bsf} C_{B^s} C_v - K_{bsi} C_{B^s} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{B^i}}{\partial t} = D_{B^i} \frac{\partial^2 C_{B^i}}{\partial x^2} - K_{bsf} C_v C_{B^i} + K_{bsr} C_i C_{B^s} + K_{bsi} C_{B^s} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 C_v}{\partial x^2} + K_{bsi} C_{B^s} - K_{bsf} C_v C_{B^s} - K_{bi} C_i C_v \quad (4)$$

где C_i – концентрация междоузельных атомов Si, C_{B^s} – концентрация атомов бора в узлах решетки, C_{B^i} – концентрация атомов бора в междоузлиях, C_v – концентрация вакансий, D_i – коэффициент диффузии междоузельных атомов Si, D_{B^s} – коэффициент диффузии бора по вакансиям, D_{B^i} – коэффициент диффузии бора по междоузлиям, D_v – коэффициенты диффузии вакансий, K_{bsf} – коэффициент захвата междоузельного атома бора на вакансию, K_{bsr} – коэффициент в реакции Воткинса, K_{bsi} – коэффициент теплового выброса атома бора из узла, K_{bi} – коэффициент аннигиляции междоузельного атома кремния с вакансией.

Значения коэффициентов диффузии и реакций компонентов представлены в таблице.

Таблица. Значения коэффициентов диффузии и реакций компонентов в системе уравнений (1-4)

$D_i, \text{см}^2\text{с}$	D_{B^s}	D_{B^i}	D_v
$1 \cdot 10^{-11}$	$4 \cdot 10^{-17}$	$3.5 \cdot 10^{-12}$	$1 \cdot 10^{-11}$
$K_{bsf}, \text{см}^3\text{с}^{-1}$	$K_{bsr}, \text{см}^3\text{с}$	$K_{bi}, \text{см}^3\text{с}^{-1}$	$K_{bsi}, \text{с}^{-1}$
$2 \cdot 10^{-19}$	$3 \cdot 10^{-18}$	$1 \cdot 10^{-21}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$

Граничные условия для концентраций точечных дефектов и бора следующие:

$$C_i(x=0) = C_i^E \quad (5)$$

$$C_v(x=0) = C_v^{Eq} \quad (6)$$

$$dC_{B^s}/dx(x=0) = 0 \quad (7)$$

$$dC_{B^i}/dx(x=0) = 0, \quad (8)$$

т.е. поверхностная концентрация вакансий и междоузельных атомов Si равна равновесному значению, для атомов B поверхность является отражающей границей.

Рассчитанные профили диффузии бора в имплантированных слоях кремния достаточно хорошо совпадают с экспериментальными (рис.1).

В слоях, дополнительно облученных различными дозами ионов Si^+ , исследовались параллельно с диффузией имплантированного бора остаточные протяженные нарушения. С ростом концентрации точечных дефектов растет концен-

трация образующихся при отжиге протяженных дефектов, однако коэффициент диффузии бора не уменьшается, как это предполагалось в работе [1], вследствие захвата бора на остаточные дефекты, а увеличивается. Это не подтверждает заключение авторов о причине падения скорости диффузии бора при термоотжиге в печи.

Заключение

Таким образом, диффузия имплантированного бора в кремнии определяется результатом перераспределения бора по междоузельному и вакансионному каналам в результате взаимодействия с точечными дефектами. Вытеснение бора в междоузлия по механизму Воткинса и захват бора на вакансии являются конкурирующими процессами. Сечение замещения по Воткинсу больше сечения захвата атомов бора на вакансии, и в начальные моменты отжига (секундные длительности) преобладает вытеснение бора в быстрый междоузельный канал, и коэффициент диффузии является аномально большим (в 10 раз превышает собственное значение при 1050°C). С истощением концентрации собственных междоузельных дефектов атомы бора захватываются на избыточные вакансии как на ловушки, и коэффициент диффузии (термоотжиг в печи) бора уменьшается. Минимальное значение коэффициента диффузии бора (в 10 раз меньше собственного значения) имеет место, когда концентрации бора и вакансий соизмеримы. В этом случае нет бора в

быстром междоузельном канале диффузии. При дополнительном облучении ионами Si⁺ концентрация вакансий становится намного больше концентрации примеси, и коэффициент диффузии бора растет за счет диффузии по избыточным вакансиям, но и в пределе (начало аморфизации) остается меньше собственного значения вследствие подавления междоузельного канала. Падение коэффициента диффузии не является результатом взаимодействия атомов бора с остаточными протяженными дефектами. Система диффузионных уравнений описывает экспериментальные профили диффузии имплантированного бора в кремнии.

Список литературы

1. *Servidori M., Gemball F.* Reduction of phosphorus transient enhanced diffusion due to extended defects in ion implanted silicon // Nucl. Instr. Meth. B. 1989. V. 39. № 2. P. 347-351.
2. *Gibbons J.F.* Acceptor profiles obtained by diffusive redistribution of implanted impurities during annealing // Appl. Phys. Lett. 1972. V. 23. № 1. P. 49-51.
3. *Aleksandrov O.V., Kozlovskii V.V., Popov V.V., Samorokov V.E.* Diffusion of impurities from implanted silicon layers by rapid thermal annealing // Phys. Stat. Sol. A. 1986. V. 110. № 2. P. K61-65.
4. *Пантелеев В.А., Гугина Т.С., Андон В.Н., Еловская А.И.* Влияние упругих напряжений на диффузионные процессы в полупроводниках // ФТТ. 1977. Т. 19. № 1. С. 181-184.

MODELLING OF IMPLANTED BORON DIFFUSION IN SILICON

A.R. Chelyadinskii, V.B. Odzaev
Belarusian State University,
 4 Nezavisimosti ave., 220030 Minsk, Belarus, chelyadinski@bsu.by

It is shown that implanted boron diffusion is determined by redistribution of boron atoms on interstitial and vacancy channels as result of the interaction with point defects. In the early phase of lamp annealing the displacement of boron atoms out the lattice sites predominates (Watkins effect), and transient enhanced diffusion takes place. Then at the furnace treatment boron atoms are captured on surplus vacancies and diffusion coefficient become anomaly low. Reduction of the diffusion coefficient does not due to boron interaction with residual extended defects. The system of boron diffusion equations taking into account defect-impurity interaction describes the experimental profiles.