

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ МЫШЬЯКА В СИСТЕМЕ SiO_2/Si ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ИМПЛАНТАЦИИ И КОРОТКОМ ТЕРМИЧЕСКОМ ОТЖИГЕ

О.И. Величко²⁾, Г.М. Заяц³⁾, А.Ф. Комаров¹⁾, А.М. Миронов¹⁾, В.А. Цурко³⁾

¹⁾Институт прикладных физических проблем, Белорусский государственный университет, ул. Курчатова, 7, Минск, Беларусь 220064, e-mail: KomarovF@bsu.by

²⁾Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки, 6, Минск, Беларусь 220013, e-mail: oleg_velichko@lycos.com

³⁾Институт математики НАН Беларуси, ул. Сурганова, 11, Минск, Беларусь 220072, e-mail: vtsurko@im.bas-net.by

Модель термической диффузии As строится с учетом нелинейности процесса, кластерообразования, влияния точечных дефектов. Решение построенных систем дифференциальных уравнений находится разностным методом.

Введение

В современных технологиях создания активных областей элементов интегральных схем используются технологические операции низкоэнергетической имплантации в сочетании с коротким термическим отжигом. Такого рода процессы позволяют изготавливать приборы со сверхмелкими p - n -переходами [1–4]. Получаемые при этом профили примесей сложной конфигурации [5, 6] не удается моделировать с достаточной точностью с помощью известных программных средств, например, SSUPREM-4.

В работах [7–9] нами исследованы различные аспекты моделирования диффузии мышьяка в приповерхностных областях кремния в условиях низкоэнергетической имплантации и короткого термического отжига, изучен и обоснован эффект восходящей диффузии, наблюдаемый экспериментально [5, 6].

В настоящей работе строится физико-математическая модель миграции ионов As в системе SiO_2/Si , предлагается численный метод расчета профиля примеси. Модель учитывает влияние неравновесных дефектов, а также воздействие электронов на кластеризацию.

Предлагаемый нами численный метод позволяет корректно строить алгоритм без традиционно вводимого на границе раздела сред искусственного параметра — коэффициента массопереноса (transport rate). Выбор этого параметра весьма затруднителен для различных сред, примесей и температур процесса. Данные по его значениям в различных источниках существенно разнятся.

Предлагаемый подход моделирования профилей примесей можно использовать и для других, не на основе кремния, сложных структур.

Модель

Физико-математическую модель диффузии мышьяка в системе кремний-окисел рассмотрим в следующей постановке.

Полагаем, что процесс миграции As происходит на отрезке $[0, l]$ за время t_f . Пусть $x^* \in [0, l]$ — точка раздела двух сред: оксида кремния и кремния.

Диффузия примеси в SiO_2 описывается уравнением

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(T) \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad x \in (0, x^*), \quad t \in (0, t_f] \quad (1)$$

На поверхности окисла полагаем

$$D(T) \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0.$$

Здесь C — концентрация примеси, $D(T)$ — коэффициент диффузии. Коэффициент $D(T)$ зависит от температуры отжига T и условий формирования окисла.

В кремнии учитываем влияние на перенос атомов As точечных дефектов, электронов, кластерообразования. Предполагаем, что диффузия мышьяка происходит благодаря формированию, миграции и диссоциации пар " $\text{As}^+ \text{D}^-$ ", где As^+ и D^- — атом мышьяка в положении замещения и собственный точечный дефект, соответственно. При построении модели эволюции точечных дефектов сделаем некоторые предположения. Во-первых, предполагаем, что диффузия мышьяка происходит в основном по междоузельному механизму, а диффузия по вакансиям менее существенна. Поэтому, далее рассматриваем единственное уравнение для описания миграции точечных дефектов, вызванной переходами собственных междоузельных атомов. Во-вторых, предполагаем, что дрейфом собственных междоузельных атомов и вакансий в поле внутренних упругих напряжений можно пренебречь.

Термодинамический подход, основанный на локальном равновесии между растворенными в положении замещения атомами мышьяка, точечными дефектами и парами «атом-дефект» приводит к следующей системе диффузионных уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} (C + C^{AC}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{D}(x) \left(\frac{\partial (CC)}{\partial x} + \frac{CC}{x} \frac{\partial x}{\partial x} \right) \right) \quad (2)$$

$$x \in (x^*, l), \quad t \in (0, t_f],$$

$$\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - \frac{\bar{C}}{l^2} + \frac{\bar{C}^2}{l^2} = 0, \quad x \in (x^*, l), \quad (3)$$

где (2) — уравнение диффузии атомов примеси и (3) — уравнение диффузии точечных дефектов; $\bar{D}(x)$ — эффективный коэффициент диффузии атомов примеси в поле внутренних упругих напряжений по механизму образования вакансион-

но-примесных комплексов; $C^{AC} = \bar{\kappa} \cdot \chi^4 C^B$ — концентрация примесей, связанных в кластеры, где $\bar{\kappa}$ — характерный параметр кластеризации, χ — общая концентрация электронов, нормализованная к собственной концентрации электронов:

$$\chi = n/n_e = \frac{C - C^{AC} - C^B + \sqrt{(C - C^{AC} - C^B)^2 + 4n_e^2}}{2n_e}$$

n_e — собственная концентрация электронов, C^- — суммарная концентрация примеси противоположного типа; C — эффективная концентрация дефектов; l — средняя длина пробега точечных дефектов; C^g — эффективная скорость генерации точечных дефектов.

Уравнение (2) дополняем на границе $x = l$ краевым условием

$$D(\chi) \left(\frac{\partial(C\bar{C})}{\partial x} + \frac{\bar{C}C}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) \Big|_{x=l} = 0.$$

Для дефектов на этой же границе полагаем

$$\bar{C} \Big|_{x=l} = 1$$

и при $x = x^*$ задаем условие

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=x^*} = (\alpha C + \beta) \Big|_{x=x^*},$$

где α и β — параметры.

На границе раздела системы кремний-окисел учитываем непрерывность потока примеси и условие сегрегации:

$$D(T) \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=x^*-0} = D(\chi) \left(\frac{\partial(C\bar{C})}{\partial x} + \frac{\bar{C}C}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) \Big|_{x=x^*+0},$$

$$(C + C^{AC}) \Big|_{x=x^*-0} / C \Big|_{x=x^*+0} = m,$$

здесь m — коэффициент сегрегации.

Начальное распределение примеси задается профилем ионной имплантации [10].

Численный алгоритм

Приближенное решение поставленной задачи находим с помощью метода конечных разностей [11]. Введем сетки узлов

$$\omega_\tau = \{t_j = j \cdot \tau, j = 0, 1, \dots, j_0, j_0 \cdot \tau = t_f\},$$

$$\omega_h = \{x_i = i \cdot h, i = 0, 1, \dots, N, N \cdot h = l\}.$$

Сетку ω_h строим таким образом, чтобы точка x^* была узлом сетки: $x^* = i \cdot h$, $2 < i < N - 2$. Обозначения для разностных соотношений будем брать из [11]. Пусть $y, \bar{y}, z$ — приближенные значения для $C, \bar{C}$ и χ соответственно.

Уравнение (1) и краевое условие при $x = 0$ аппроксимируем соотношениями

$$y_i = ay_{i-1}, \quad a = D(T) - \text{const}, \quad (T - \text{const}),$$

$$i = 1, 2, \dots, i_1 - 1, \quad j = 1, 2, \dots, j_0,$$

$$ay_x = 0.5hy_{i-1}, \quad j = 1, 2, \dots, j_0.$$

Для (2) строим консервативную схему

$$(y + \bar{\kappa} z^4 y^2) \Big|_i^j = ((a_1(z)(\bar{y} y)_{\bar{x}}) + (a_2(z, y, \bar{y}) z_{\bar{x}})) \Big|_i^j$$

$$i = i_1 + 1, i_1 + 2, \dots, N - 1, \quad j = 1, 2, \dots, j_0,$$

$$a_1(z_i) = 0.5(D(z_i)) + D(z_{i-1}))$$

$$a_2(z_i, y_i, \bar{y}_i) = 0.5(D(z_i)) y(x_i) \bar{y}(x_i) / z(x_i) +$$

$$+ D(z_{i-1}) y(x_{i-1}) \bar{y}(x_{i-1}) / z(x_{i-1})$$

На границе $x = l$ получаем разностное соотношение вида

$$-0.5h(y + \bar{\kappa} z^4 y^2) \Big|_N^j = (a_1(z)(\bar{y} y)_{\bar{x}} +$$

$$+ a_2(z, y, \bar{y}) z_{\bar{x}}) \Big|_N^j, \quad j = 1, 2, \dots, j_0.$$

Разностные условия на границе раздела $x = x^*$ следующие

$$0.5h(y_i + (y + \bar{\kappa} z^4 y^2)) \Big|_i^j = (a_1(z)(\bar{y} y)_{\bar{x}} +$$

$$- a_2(z, y, \bar{y}) z_{\bar{x}}) \Big|_{x^*+1}^j - a \frac{y_i' - y_{i-1}}{h},$$

$$(y + \bar{\kappa} z^4 y^2) / y_i' = m.$$

В данных формулах определено $y_i' = y_{x^*-0}$. Величины z и y связаны соотношением

$$z - \frac{1}{2n_e} (y - \bar{\kappa} z^4 y^2 - C^B +$$

$$\sqrt{(y - \bar{\kappa} z^4 y^2 - C^B)^2 + 4n_e^2}) = 0.$$

Уравнение для дефектов (3) аппроксимируем разностным уравнением

$$\bar{y}_{xx} - \frac{\bar{y}}{l^2} + \frac{C^g}{l^2} = 0, \quad i = i_1 + 1, i_1 + 2, \dots, N - 1$$

и условиями на границах $y_x \Big|_i = \sigma_1 y_i + \sigma_2$,

$y \Big|_{i=N} = 1$, где $\sigma_1, \sigma_2 - \text{const}$.

Решение построенной системы нелинейных разностных уравнений находится итерационным методом.

Результаты и обсуждение

Результаты моделирования быстрого термического отжига приведены на рис. 1. Расчеты проводились для As, имплантированного в систему SiO₂/Si с энергией 10 кэВ дозой $7 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Толщина слоя SiO₂ составляла 11 нм. Далее производился отжиг 5 с при температуре 1000 °C. Результаты расчетов с достаточной точностью соответствуют измеренному профилю [12], включая приповерхностную область.

По нашему мнению, неравномерное распределение точечных дефектов играет главную роль в «восходящей» диффузии и формировании локального максимума вблизи поверхности раздела SiO₂/Si. У поверхности кремния происходит рекомбинация собственных междоузельных атомов, что приводит к появлению дополнительного потока примеси (см. уравнение (2)). Мы считаем, что наблюдаемый максимум примеси на поверхности кремния не является особенностью метода ВИМС, поскольку этот максимум отсутствует на

профилях имплантированного мышьяка, измеренных тем же методом [5], [12].

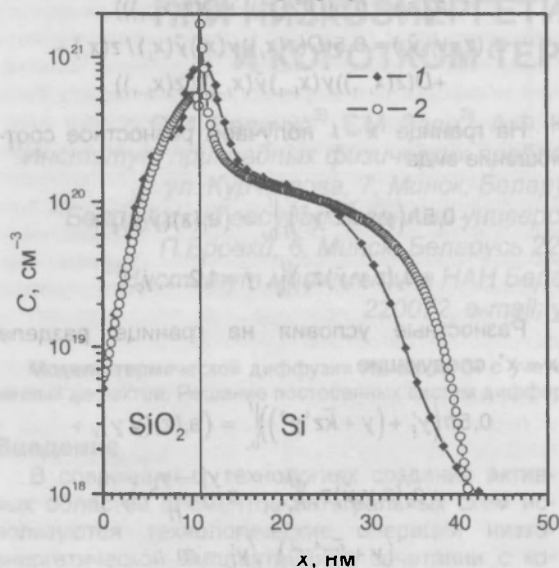


Рис. 1. Сравнение экспериментальных данных [12] (кривая 1) и результатов моделирования (кривая 2).

Закключение

Физико-математическая модель миграции As построена с учетом влияния неравновесных дефектов и кластеризации на эволюцию концентраций атомов примеси и электронов. Предлагаемый подход позволяет моделировать наблюдаемую экспериментально «восходящую» диффузию. Предложен численный алгоритм решения системы дифференциальных уравнений. Приведены результаты расчетов, согласующиеся с экспериментом.

Список литературы

1. Vandervorst W., Janssens T., Brijis B., Conard T., Huyghebaert C., Fruhauf J., Bergmaier A., Dollinger G., Buyuklimanli T., VandenBerg J.A., Kimura K. // *Applied Surface Science*. – 2004. – Vol. 231–232. – P. 618–631.
2. Buyuklimanli T. H., Marino J. W., Novak S. W. // *Applied Surface Science*. – 2004. – Vol. 231–232. – P. 636–639.
3. Ihaddadene-Le Coq L., Marcon J., Dush-Nicolini A., Masmouci K., Ketata K. // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*. – 2004. – Vol. 216. – P. 303–306.
4. Boucard F., Roger F., Chakarov I., Zhuk V., Temkin M., Montagner X., Guichard E., Mathiot D. // *Mat. Sci. Eng. B*. – 2005. – Vol. 124–125. – P. 409–414.
5. Girginoudi D., Georgoulas N., Thanailakis A., Polycroniadis E. A. // *Materials Science and Engineering B*. – 2004. – 114–115. – P. 381–385.
6. Solmi S., Fern M., Bersani M., Giubertoni D., Soncini V. // *J. Appl. Phys.* – 2003. – Vol. 94, No. 8. – P. 4950–4955.
7. Komarov F. F., Mironov A. M., Tsurko V. A., Velichko O. I., Zayats G. M. // *Proceedings of IV International Conference "New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation"*, Zakopane, Poland, June, 21–24. – 2005. – P. 68–70.
8. Komarov F.F., Velichko O.I., Dobrushkin V.A., Mironov A.M. // *Phys. Rev. B*. – 2006. – Vol. 74(3). – P. 035205-1–035205-10.
9. Komarov F.F., Velichko O.I., Mironov A.M., Tsurko V.A., Zayats G.M. // *Proceedings of SPIE*. – 2006. – Vol. 6260. – P. 566 – 574.
10. Руссел X., Руге И. Ионная имплантация. – М.: Наука, 1983. – 360 с.
11. Самарский А. А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
12. Ferri M., Solmi S., Parisini A., Bersani M., Giubertoni D., Barozzi M. // *Journal of Applied Physics*. – 2006. – 99. – P. 113508-1–113508-7.

MODELLING OF ARSENIC DIFFUSION IN THE SiO₂/Si SYSTEM AT LOW-ENERGY IMPLANTATION AND RAPID THERMAL ANNEALING

O.I. Velichko²⁾, G.M. Zayats³⁾, A.F. Komarov¹⁾, A.M. Mironov¹⁾, V.A. Tsurko³⁾

¹⁾ *Institute of Applied Physics Problems, Belarusian State University, 7 Kurchatov Street, Minsk, Belarus 220064, e-mail: KomarovF@bsu.by*

²⁾ *Belarusian State University on Informatics and Radioelectronics, 6 P. Brovka Street, Minsk, Belarus 220013, e-mail: oleg_velichko@lycos.com*

³⁾ *Institute of Mathematics, Academy of Sciences of Belarus, 11 Surganova Street, Minsk, Belarus 220072, e-mail: vtsurko@im.bas-net.by*

As the lateral dimensions of modern integrated circuits are scaled down to the nanometer range, the need for accurate models of silicon doping is increased. The manufacturing of modern microelectronics products involves operations leading to a formation of complex systems in near-surface regions of a processed material. The rapid thermal processes are highly transient and are governed by the diffusion and reaction of dopant atoms and defects, and especially by the dynamics of their clusters. Earlier, we have studied various aspects of the modelling of arsenic diffusion in silicon surface regions at rapid thermal annealing. In the present work, we consider model of low-energy implanted As diffusion in the Si/SiO₂ interface region of oxidized silicon substrate. The model is taking into account influence of nonequilibrium defects as well as clustering dependence on impurity and electrons concentration. The offered approach allows one to simulate the experimentally observable "uphill" diffusion. We suggest that arsenic diffusion occurs due to the formation, migration, and dissociation of the "As⁺D⁻" pairs, where As⁺ and D⁻ are the substitutionally dissolved arsenic atom and intrinsic point defect, respectively. At a construction of the model of point defects evolution we assume that As diffusion occurs substantially by the interstitial mechanism, and diffusion by vacancies is less significant. Therefore we consider only the equation describing diffusion of point defects induced by transfer of intrinsic interstitial atoms. A thermodynamic approach based on the local equilibrium between the substitutionally dissolved arsenic, point defects and the pairs leads to the system of two diffusion equations: the equation of dopant atoms diffusion and the equation of diffusion of point defects. In the present work we used special approach to the consideration of the impurity transport through Si/SiO₂ boundary which allows to get rid of artificial parameters such as "boundary transport rate" and consider the impurity concentration to be continuous. Consequently, the proposed model allows simulation of high concentration transient enhanced diffusion of As implanted in Si, although this transport process differs substantially from the diffusion processes described by the Fick's second law.