

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ДЕФЕКТОВ В ИОННО-ОБЛУЧЕННОМ КРЕМНИИ

В.И. Белько

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

Для моделирования роста кластеров собственных междоузлий и формирования $\{311\}$ -дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется система дифференциальных уравнений реакции, которая может быть получена из системы уравнений реакции-диффузии интегрированием искомых функций по пространству. Получено отношение концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации в зависимости от времени при разных значениях температуры и разном количестве уравнений в системе. Показано, что модель, основанная на системе обыкновенных дифференциальных уравнений, является приемлемой и в то же время намного более экономичной альтернативой системе уравнений реакции-диффузии – параболической системе уравнений в частных производных.

Ключевые слова: ионная имплантация; собственные междоузлия; $\{311\}$ -дефекты в кремнии; моделирование.

SIMULATION OF THE FORMATION OF DEFECT CLUSTERS IN ION-IRRADIATED SILICON

Viktor Belko

Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, belko@bsu.by

To simulate the growth of clusters of intrinsic interstitials and the formation of $\{311\}$ -defects in silicon during postimplantation annealing, a system of differential equations is used, which can be obtained from the system of reaction-diffusion equations by integrating the distributions of n-interstitial clusters over space. The ratio of the concentration of free interstitials to their equilibrium concentration is obtained as a function of time for different temperatures and a different number of equations in the system. It is shown that the model based on the system of ordinary differential equations is an acceptable and at the same time much more economical alternative to the system of reaction-diffusion equations - a parabolic system of partial differential equations.

Keywords: ion implantation; self-interstitials; $\{311\}$ -defects in silicon; modeling.

Введение

Моделирование имплантации ионов и отжига образовавшихся дефектов с учетом временно-ускоренной диффузии является неотъемлемым этапом при разработке и оптимизации технологии изготовления интегральных схем. Для моделирования физических процессов, протекающих в ходе имплантации и последующего отжига, применяются квантово-химические расчеты, классическая молекулярная динамика, кинетический метод Монте-Карло и численное решение уравнений реакции-диффузии. При моделировании с помощью системы уравнений реакции-диффузии [1] интересующие нас физические процессы должны быть описаны системой дифференциальных уравнений. Обычно это урав-

нения в частных производных параболического типа, где появление или исчезновение частиц описывается скоростями этих процессов и диффузионными параметрами. Скорость реакции определяется параметрами, которые характеризуют взаимодействие.

В данной работе для моделирования роста кластеров собственных междоузлий и формирования $\{311\}$ -дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется система дифференциальных уравнений реакции, которая может быть получена из системы уравнений реакции-диффузии интегрированием искомых функций по пространству. Указанная модель аналогична, но не совпадает с моделью, предложенной в [2].

Результаты и их обсуждение

Сформулируем математическую модель, описывающую перераспределение дефектов (одиночных междоузлий и междоузлий в кластерах) во время отжига ионно-имплантированного кремния с учетом размеров кластеров в виде задачи Коши для системы уравнений реакции:

$$\frac{dI}{dt} = -D_I I / R_p - 2k_1^+ I^2 + 2k_2^- I(2) + \sum_{n=2}^{N-1} (-k_n^+ I(n) \cdot I + k_{n+1}^- I(n+1)), \quad (1)$$

$$\frac{dI(n)}{dt} = k_{n-1}^+ I(n-1) \cdot I - k_n^+ I(n) \cdot I - k_n^- I(n) + k_{n+1}^- I(n+1), \quad n = 2, \dots, N-1 \quad (2)$$

$$\frac{dI(N)}{dt} = k_{N-1}^+ I(N-1) \cdot I - k_N^- I(N), \quad (3)$$

$$I(0) = D_{impl}, I(n)|_{t=0} = 0 \quad (4)$$

Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1)-(4) описывает процессы диффузии одиночных междоузлий, захват одиночных междоузлий в кластеры и их эмиссию из кластеров.

Здесь $I, I(n)$ – суммарные по всему слою (толщины L) концентрации одиночных междоузлий и междоузлий в кластерах размера n , D_I – коэффициент диффузии одиночных междоузлий, k_n^+, k_n^- – кинетические коэффициенты прямой и обратной реакций для кластера размера n , соответственно, N – максимально возможное количество междоузлий в кластере, D_{impl} – начальная доза одиночных междоузлий (равная дозе имплантированных ионов).

Поверхность слоя будем считать идеальным стоком для дефектов, а поток свободных междоузлий к поверхности приближенно описывается слагаемым $-D_I I / R_p$ в уравнении (1).

Значение коэффициента диффузии одиночных междоузлий D_I и их равновесная концентрация I^{eq} , а также величины кинетических постоянных, взяты из работ [1, 2].

В соответствии с [1], критический размер кластеров, при котором происходит переход их в качественно новое состояние ($\{311\}$ -дефекты), принят равным $n = 10$. При переходе в это новое состояние значе-

ния коэффициентов прямых реакций скачкообразно увеличиваются.

Применим данную модель для описания процесса формирования $\{311\}$ -дефектов в кристалле кремния во время отжига при различных температурах в результате роста кластеров собственных междоузлий, образовавшихся после имплантации ионов кремния с энергией 40 кэВ и дозой $D_{impl} = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Начальное распределение собственных междоузлий определим в соответствии с «+1-моделью», когда на один внедренный атом после первой быстрой стадии рекомбинации дефектов приходится одно междоузлие, и будем считать, что оно описывается распределением Гаусса со стандартным отклонением 24 нм и средним значением $R_p = 60$ нм. Соответственно, полагаем, что начальная доза одиночных междоузлий D_{impl} равна дозе имплантированных ионов.

Для численного решения задачи Коши для системы уравнений реакции (1)-(4) был применен специальный метод решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений – одностадийная схема Розенброка с комплексными коэффициентами [3].

Отношения концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации (*Supersaturation*) в ионно-имплантированном кремнии в течение постимплантационного отжига в зависимости от времени при температурах 600, 700 и 800°C, полученные в результате расчетов, представлены на рисунке 1. Количество уравнений в системе $N = 100$. Те же величины, экспериментально полученные в работе [4], представлены на рисунке 2. Здесь интерес для нас представляют зависимости, показанные символами: 600°C – квадраты; 700°C – треугольники; 800°C – ромбы.

Сумма всех междоузлий в зависимости от времени $S(t)$, которая использовалась для контроля точности, имеет следующий вид:

$$S(t) = \sum_{i=1}^N I_i \cdot i.$$

Если в уравнении (1) убрать слагаемое $-D_I I / R_p$, то эта сумма должна быть посто-

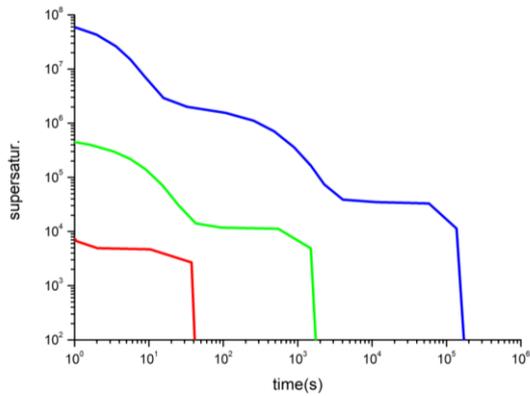


Рис. 1. Отношение концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации в зависимости от времени – расчет при 600°C (синяя кривая сверху); 700°C (зеленая кривая посередине); 800°C (красная кривая снизу)

Fig. 1. The ratio of the concentration of free interstitials to their equilibrium concentration as a function of time – calculation at 600°C (blue curve above); 700°C (green curve in the middle); 800°C (red curve below)

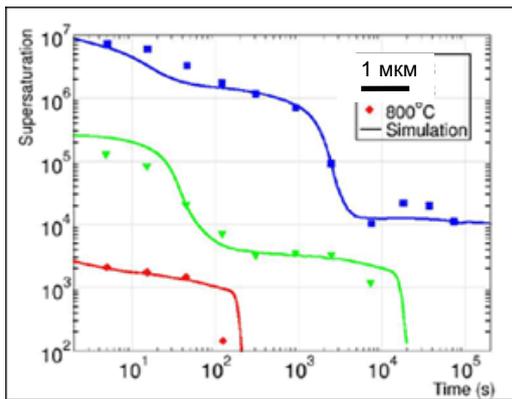


Рис. 2. Отношение концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации в зависимости от времени – эксперимент (600°C, квадратики; 700°C, треугольники; 800°C, ромбы)

Fig. 2. The ratio of the concentration of free interstitials to their equilibrium concentration as a function of time – experiment (600°C, squares; 700°C, triangles; 800°C, rhombuses)

янна и близка к константе D_{impl} . При контрольных расчетах методом Розенброка для всех трех температур отклонение $S(t)$ от постоянной D_{impl} не превышало 0.01 %. Расчеты контрольных сумм полезны для верификации численного метода, хотя близость $S(t)$ к постоянной величине является лишь необходимым условием его корректности.

Сравнивая полученные при численном решении отношения концентрации сво-

бодных междоузлий к их равновесной концентрации (*Supersaturation*) (рис. 1) с экспериментально полученными в работе [4] (рис. 2) можно сделать следующие выводы.

В рамках данной модели с помощью подходящих численных методов уже при количестве уравнений $N = 100$ можно достаточно точно воспроизвести основные тенденции поведения кривой $Supersaturation(t)$ при типичных температурах отжига.

Увеличивая максимальный размер кластеров и, соответственно, число используемых уравнений до $N = 500$ при 700 С, мы получили результаты, близкие к результатам при $N = 100$, при этом вычислительные затраты существенно возрасли. Результаты расчета при 700 С для $N = 100$ и $N = 500$ показаны на рисунке 3. Кривая, полученная для большего числа уравнений, спадает более плавно и имеет более вытянутый хвост, что соответствует экспериментальным данным (рис.2, треугольники).

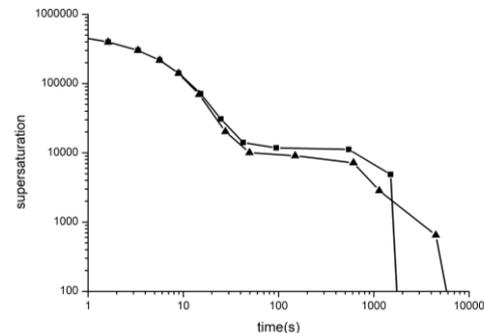


Рис. 3. Отношение концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации в зависимости от времени при температуре 700 С для числа уравнений $N = 100$ (квадраты) и $N = 500$ (треугольники)

Fig. 3. The ratio of the concentration of free interstitials to their equilibrium concentration as a function of time at a temperature of 700 C for the number of equations $N = 100$ (squares) and $N = 500$ (triangles)

Заключение

Для моделирования роста кластеров собственных междоузлий и формирования {311}-дефектов в кремнии во время постимплантационного отжига применяется система дифференциальных уравнений ре-

акции, которая может быть получена из системы уравнений реакции-диффузии интегрированием искоемых функций по пространству. Получено отношение концентрации свободных междоузлий к их равновесной концентрации в зависимости от времени при типичных значениях температуры отжига и разном количестве уравнений в системе. Показано, что модель, основанная на системе обыкновенных дифференциальных уравнений, является приемлемой и в то же время намного более экономичной альтернативой для модели, основанной на параболической системе уравнений в частных производных – системе уравнений реакции-диффузии.

Библиографические ссылки/ References

1. Ortiz C.J., Cristiano F., Colombeau B., Claverie A., Cowern N.E.B. Modeling of extrinsic extended defect evolution in ion-implanted silicon upon thermal annealing. *Materials Science and Engineering B* 2004; 114-115: 184-192.
2. Cowern N.E.B., Mannino G., Stolk P.A., Roozeboom F., Huizing H.G.A., van Berkum J.G.M. Energetics of Self-Interstitial Clusters in Si. *Physical Review Letters* 1999; 82(22): 4460-4463.
3. William H. Press. Numerical Recipes in C. Second Edition: The Press Syndicate of the University of Cambridge; 1992. 925 p.
4. Stolk P.A., Gossmann H.J., Eaglesham D.J. and Poate J.M. Implantation and transient boron diffusion: the role of the silicon self-interstitial. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 1995; 96: 187-191.