

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ПРИМЕСЕЙ В КРЕМНИЕВЫХ СТРУКТУРАХ В ПРОЦЕССЕ БЫСТРЫХ ТЕРМООБРАБОТОК

Ф.Ф. Комаров¹⁾, А.Ф. Комаров¹⁾, А.М. Миронов¹⁾, Г.М. Заяц²⁾, Ю.В. Макаревич¹⁾, С.А. Мискевич¹⁾

¹⁾НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Савченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220108

Минск, Беларусь, тел.: +375(17)212-48-33, e-mail: KomarovF@bsu.by

²⁾Институт математики НАН Беларуси, ул. Сурганова, 11, 220072 Минск, Беларусь, тел.: +375(17)284-19-64, e-mail: zayats@im.bas-net.by

Разработаны физико-математические модели и проведено численное моделирование процесса диффузии имплантированных примесей при быстрых термообработках кремниевых структур. Результаты расчетов с достаточной точностью соответствуют результатам экспериментов. Разработан программный комплекс, который интегрирован в систему Silvaco ATHENA. Программы комплекса позволяют моделировать процессы низкоэнергетической имплантации ионов В, ВF₂, Р, As, Sb, С в кремниевые структуры и последующего быстрого термического отжига.

Введение

Одной из основных задач субмикронной технологии ультрабольших интегральных микросхем (УБИС) является получение мелкозалегающих р-п-переходов с необходимыми электрическими характеристиками. При создании локальных легированных областей элементов кремниевых УБИС основными технологическими процессами являются низкоэнергетическая (с энергиями 0,5–50 кэВ) имплантация ионов легирующих примесей с последующими быстрыми термообработками. Сочетание такого рода имплантации и быстрого термического отжига (БТО) позволяет изготавливать приборы со сверхмалыми размерами переходов [1–4]. При таких технологиях характерно образование профилей примесей сложной конфигурации [5, 6]. Экспериментальный подбор технологических режимов является дорогостоящим и длительным, поэтому моделирование – необходимый инструмент разработки и исследования используемых процессов, в частности, ионной имплантации и диффузионного переноса атомов примеси в процессе термообработок. Но даже последние версии программного обеспечения, предназначенного для сквозного моделирования процессов изготовления изделий микроэлектроники, не позволяют достаточно точно прогнозировать распределение легирующих примесей при быстрых высокотемпературных термообработках. У поверхности полупроводника расчетные данные, полученные при использовании таких программ, могут существенно отличаться от экспериментальных результатов [5–7]. В настоящей работе рассматриваются физико-математические модели, позволяющие достаточно точно моделировать современные технологические процессы создания элементной базы УБИС. Приведенные методы и результаты исследований основаны на наших работах [8–15].

Применяемые модели

Модель ионной имплантации базируется на численном решении обратных кинетических уравнений Больцмана. Вывод уравнения приведен в работе [15]. Численное решение позволило получить пространственные моменты распределения ионов бора, фосфора, мышьяка, сурьмы, ВF₂ и углерода при имплантации с энергиями от

500 эВ до 1 МэВ в материалы, применяемые в современной кремниевой технологии изготовления интегральных схем. Для построения двумерных распределений примесей в многослойных непланарных структурах применяются методы, изложенные в [16–19].

В соответствии с современными представлениями, диффузия примесей замещения в полупроводниках осуществляется с участием точечных дефектов — вакансий (V) и собственных межузельных атомов (I), которые образуют с атомами примеси подвижные примесно-вакансионные и примесно-межузельные пары. Как показано в [8, 20, 21], диффузионный поток примеси можно представить в виде

$$J = -D^E \left(\nabla(C^V C) + \frac{C^V C}{\chi} \nabla \chi \right) - D^F \left(\nabla(C^I C) + \frac{C^I C}{\chi} \nabla \chi \right) \quad (1)$$

Здесь χ — общая концентрация носителей заряда, нормированная к собственной концентрации носителей

$$\chi = n/n_e = \left[C - N + \sqrt{(C - N)^2 + 4n_e^2} \right] / 2n_e. \quad (2)$$

В (1), (2) приняты следующие обозначения: C — концентрация примеси в положении замещения, N — концентрация примесей противоположного типа проводимости, C^V — концентрация вакансий, нормированная на термически равновесную концентрацию; C^I — концентрация собственных межузельных атомов, нормированная на термически равновесную концентрацию; D^E — эффективный коэффициент диффузии атомов примеси в поле внутренних упругих напряжений по механизму образования вакансионно-примесных комплексов, D^F — эффективный коэффициент диффузии примеси в поле внутренних упругих напряжений по механизму образования комплексов с собственными межузельными атомами. Из закона сохранения и условий (1), (2) получаем нелинейное уравнение диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = \sum_{i=1}^p \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D^E(C) \frac{\partial(C^V C)}{\partial x_i} + \right. \\ \left. + D^F(C) \frac{\partial(C^I C)}{\partial x_i} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial x_i} \right], \\ p = 1, 2, 3, \quad D^N = C(D^E C^V + D^F C^I) / \sqrt{(C - N)^2 + 4n_e^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Уравнение (3) рассматриваем в одно-, двух- или трехмерной области. Для уравнения (3) применяем граничные условия общего вида

$$\alpha_1 \left[D^E(C) \frac{\partial(C^V C)}{\partial \mathbf{n}} + D^F(C) \frac{\partial(C^I C)}{\partial \mathbf{n}} + D^N(C, C^V, C^I) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \right] + \alpha_2 C = \alpha_3, \quad (4)$$

где $\mathbf{n}$ – вектор нормали к границе моделирования, параметр α_1 принимает значение 0 либо 1, α_2 и α_3 – функции, зависящие от учитываемых физических явлений на границе области моделирования. В частности, при $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$ на границе имеют место условия отражения. Начальные условия задаются имплантационным распределением.

Распределения концентрации точечных дефектов C^V и C^I в кремнии описываются квазилинейными параболическими уравнениями

$$\frac{\partial C^{V,I}}{\partial t} = \sum_{i=1}^p \frac{\partial}{\partial x_i} \left(d^{V,I}(C) \frac{\partial C^{V,I}}{\partial x_i} + \psi_{1,i}^{V,I}(\mathbf{x}) C^{V,I} \right) - \psi_2^{V,I}(C) C^{V,I} + \psi_3^{V,I}(\mathbf{x}). \quad (5)$$

Здесь $d^{V,I}(C)$ – коэффициент диффузии; $\psi_{1,i}^{V,I}(\mathbf{x})$ – функция, зависящая от эффективной скорости дрейфа дефектов в поле внутренних упругих напряжений; в слагаемом $\psi_2^{V,I}(C) > 0$ учтены средняя длина диффузионного пробега дефектов и их среднее время жизни; $\psi_3^{V,I}(\mathbf{x})$ – функция, зависящая от скорости генерации дефектов.

Уравнение (5) замыкаем на границе условием общего вида

$$\alpha_1 \left(d^{V,I}(C) \frac{\partial C^{V,I}}{\partial \mathbf{n}} + \psi_1 C^{V,I} \right) + \alpha_2 C^{V,I} = \alpha_3, \quad (6)$$

где α_1 принимает значение 0 либо 1, α_2 – коэффициент рекомбинации, α_3 – поверхностная длина рекомбинации. Значения концентрации точечных дефектов в начальный момент времени могут быть рассчитаны при моделировании процесса ионной имплантации явно или согласно модели «+1» [22].

Численное решение нелинейной системы уравнений (3)–(6) основано на разностном локально-одномерном методе в целых шагах [23], дающим возможность существенно сократить общее число арифметических операций по сравнению с прямыми методами. Уравнения для примеси решаются совместно с уравнениями для дефектов (5). Уравнения диффузии примеси в SiO_2 и условия сопряжения на границе раздела кремний-оксид были формализованы методом, изложенным в работе [25].

Результаты и обсуждение

Профили распределения бора в кремнии, полученные с использованием приведенной выше модели, а также расчетом с помощью модели диффузии CNET [27] программного комплекса ATHENA, сравнивались с экспериментальными

данными. Использование уравнений (1)–(6) позволило достаточно точно моделировать распределение примесей в кремнии после низкоэнергетической ионной имплантации и быстрого отжига при различных температурах. На рис. 1 приведено сравнение результатов расчетов с данными экспериментов (ВИМС), выполненных в ОАО «Интеграл» для распределения бора в кремнии, полученного имплантацией ионов BF_2 (энергия 20 кэВ, доза $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) и отжигом (1050 °С, 30 с).

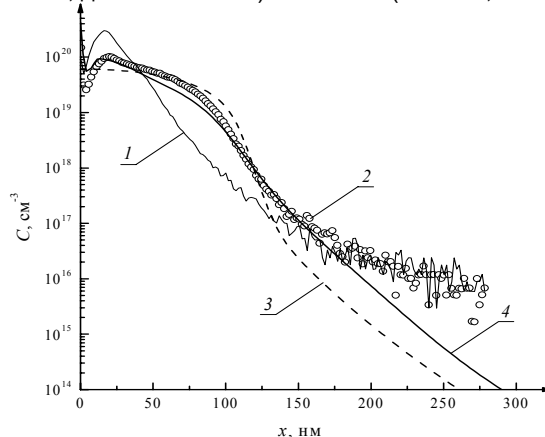


Рис. 1. Распределение бора в кремнии после имплантации ионов BF_2 (20 кэВ, доза $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) и отжига при 1050 °С, 30 с: 1 – после ионной имплантации, ВИМС, 2 – после термообработки, ВИМС, 3 – после термообработки, моделирование, модель CNET, 4 – после термообработки, моделирование, модель (1)–(6)

Результаты расчетов распределения мышьяка с использованием рассматриваемых двумерных моделей в структуре типичного МОП-транзистора приведены на рис. 2.

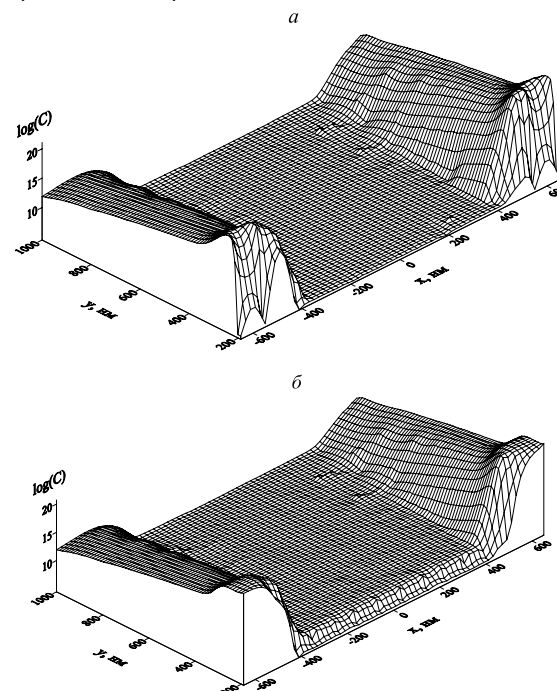


Рис. 2. Результаты расчетов объемной концентрации $C(x,y)$ мышьяка в кремнии: а – полная концентрация As, полученная после ионной имплантации (энергия 40 кэВ, доза $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$); б – концентрация электрически активной примеси

ного As, после термообработки длительностью 30 с при температуре 1000 °С

Расчеты проводились совместно с программным комплексом ATHENA. Использовалась подложка кристаллического кремния ориентации (100) с концентрацией бора 10^{14} см⁻³. Структура МОП-транзистора создавалась с применением стандартного технологического маршрута формирования транзистора с LDD (lightly-doped-drain) структурой, завершающие операции формирования легированных областей – имплантация ионов мышьяка (50 кэВ, $5 \cdot 10^{15}$ см⁻³) и последующий отжиг (900° С, 30 с) моделировали с использованием уравнений (1)–(6). Расчеты показали, что распределение мышьяка после отжига практически не зависит от фоновой примеси бора, если уровень легирования бором ниже, чем собственная концентрация носителей при температуре отжига. Из сравнения рис. 2 а и 2 б видно, что за время отжига произошло размытие пика имплантированной примеси и перераспределение концентрации имплантированного мышьяка в приповерхностной области.

Заключение

Рассмотренные физико-математические модели и численные алгоритмы дают возможность моделировать технологические процессы низкоэнергетической ионной имплантации и быстрого термического отжига полупроводниковых структур. Разработанный на основе этих моделей программный комплекс, работающий совместно с системой сквозного моделирования процессов и приборов интегральной электроники Silvaco ATHENA, позволяет использовать модели и методы расчета, альтернативные реализованным в известных программных продуктах, главным образом в решении задач с малой глубиной формируемых легированных областей. С помощью разработанного программного обеспечения было проведено моделирование различных процессов, в том числе имплантация ионов В, ВF₂, Р, As, Sb, С в кремниевые структуры, соответствующие типичным сильно легированным мелким активным областям элементов УБИС, и последующего быстрого термического отжига. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Vandervorst W., Janssens T., Brijis B. et al. // Applied Surface Science. – 2004. – 231–232. – P. 618.

2. Buyuklimanli T.H., Marino J.W., Novak S.W. // Applied Surface Science. – 2004. – 231–232. – P. 636.
3. Ihaddadene-Le Coq L. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. – 2004. – 216. – P. 303.
4. Boucard F., Roger F., Chakarov I. et al. // Mat. Sci. Eng. B. – 2005. – 124. – P. 409.
5. Girginoudi D. et al. // Mat. Sci. and Eng. B. – 2004. – 114–115. – P. 381.
6. Solmi S., Ferri M., Bersani M. et al. // J. Appl. Phys. – 2003. – 94, 8. – P. 4950.
7. Ruffell A., Mitchell I.V., Simpson P. // J. J. Appl. Phys. – 2005. – 97. – P. 123518.
8. Komarov F.F., Velichko O.I., Dobrushkin V.A., Mironov A.M. // Phys. Rev. B. – 2006. – 74(3). – P. 035205.
9. Komarov F.F., Mironov A.M., Zayats G.M. et al. // Vacuum. – 2007. – 81. – P. 1184.
10. Мильчанин О.В., Комаров Ф.Ф., Плебанович В.И. и др. // Докл. НАН Беларуси. – 2007. – 51, 2. – С. 40.
11. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф., Миронов А.М. // Доклады НАН Беларуси. – 2007. – 51, 3. – С. 52.
12. Komarov F.F., Komarov A.F., Mironov A.M. et al. // Phys. and Chem. of Sol. St. – 2007. – 8, 3. – P. 494.
13. Mironov A.M., Komarov F.F., Komarov A.F. et al. // Vacuum. – 2009. – 83. – P. 127.
14. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф., Миронов А.М., Заяц Г.М. // CAD DD'10: Материалы VII Междунар. конф. – Минск, 16–17 ноября 2010 г., – Мн., 2010. – С. 370.
15. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Темкин М.М. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 248 с.
16. Hobler G., Langer E., Selberherr S. // Solid-State Electronics. – 1987. – 30, 4. – P. 445.
17. Burenkov A.F., Kurganov A.G., Konoplyanik G.G. // Surface Sciences. – 1989. – 8. – P. 52.
18. Lorenz J., Kruger W., Barthel A. // NASECODE-VI, Ed. Miller J.J.H., Boole Press, 1989. – P. 513.
19. Parab K.B., Yang D.H., Morris S.J. et al. // J. Vac. Sci. Techn. B. – 1996. – 1, 4. – P. 260.
20. Fedotov A.K., Velichko O.I., Dobrushkin V.A. // J. of Alloys and Comp. – 2004. – 382, 1-2. – P. 283.
21. Komarov F.F., Velichko O.I., Mironov A.M. et al. // Proceedings of SPIE. – 2006. – 6260. – P. 566.
22. Griffin P.B., Lever R.F., Packan P.A., Plummer J.D. // Appl. Phys. Lett. – 1994. – 64, 10. – P. 1242.
23. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
24. Komarov F.F., Komarov A.F., Mironov A.M. et al. // Journal of Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2010. – 13, 4. – P. 389.
25. Величко О.И., Заяц Г.М., Комаров А.Ф. и др. // ВИТТ: Материалы VII Междунар. конф. – Мн., 2007. – С. 96.
26. Ferri M., Solmi S., Parisini A. et al. // J. Appl. Phys. – 2006. – 99. – P. 113508.
27. Нелеев В.В., Стемплицкий В.Р. Основы САПР в микроэлектронике: уч. пособие. – Мн.: БГУИР, 2008. – 220 с.

SIMULATION OF THE DIFFUSION OF IMPLANTED IMPURITIES IN SILICON STRUCTURES AT THE RAPID THERMAL ANNEALING

F.F. Komarov¹, A.F. Komarov¹, A.M. Mironov¹, G.M. Zayats², Y.V. Makarevich¹, S.A. Miskiewicz¹

¹Institute of Applied Physics Problems, Belarusian State University, 7 Kurchatov Street, 220108 Minsk, Belarus, tel.: +375(17)212-48-33, e-mail: KomarovF@bsu.by

²Institute of Mathematics, Academy of Sciences of Belarus, 11 Surganov Street, 220072 Minsk, Belarus, tel.: +375(17)284-19-64, e-mail: zayats@im.bas-net.by

Physical and mathematical models and numerical simulation of the diffusion of implanted impurities during rapid thermal treatment of silicon structures are discussed. The calculation results correspond to the experimental results with a sufficient accuracy. A simulation software system has been developed that is integrated into ATHENA simulation system developed by Silvaco Inc. This program can simulate processes of the low-energy implantation of B, ВF₂, Р, As, Sb, С ions into the silicon structures and subsequent rapid thermal annealing.