

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МЕЖУЗЕЛЬНОЙ ДИФфуЗИИ ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННОГО БОРА

О.И. Величко¹, Н.В. Княжева²

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013 Беларусь

¹тел. +375296998078, E-mail: oleg_velichko@lycos.com

²тел. +375292165139, E-mail: kniazhava@gmail.com

Разработана модель межзельной диффузии ионно-имплантированного бора в кремнии при быстрых термических отжигах секундной длительности предварительно аморфизованных слоев. Предполагается, что межзельные атомы бора непрерывно генерируются в процессе отжига вследствие образования, перестройки или распада кластеров атомов примеси в ионно-имплантированных слоях с концентрацией примеси выше предела растворимости, а также в результате действия упругих напряжений, возникающих вследствие малости атомного радиуса бора по сравнению с атомным радиусом кремния. На этой основе проведено моделирование процесса перераспределения ионно-имплантированного бора при термическом отжиге длительностью 60 секунд при температуре 850 °С. Рассчитанный профиль распределения атомов бора после термообработки хорошо согласуется с экспериментальными данными, что подтверждает адекватность разработанной модели. Определен ряд параметров межзельной диффузии, в частности средняя длина пробега неравновесных межзельных атомов бора, равная 12 нм. Также установлено, что приблизительно 1.94 % атомов бора переходят в межзельное положение, участвуют в быстрой миграции и затем опять становятся неподвижными, переходя в положение замещения или образуя электрически неактивные комплексы с дефектами кристаллической решетки.

Введение

Для создания современных интегральных микросхем с ультравысокой степенью интеграции (ULSI) предполагается использовать методы легирования посредством низкоэнергетической (200 эВ — 1 кэВ) высокодозной ионной имплантации с последующим быстрым отжигом имплантированных слоев. Конечные распределения атомов электрически активных примесей определяются в этом случае как параметрами имплантации, так и процессами диффузии и кластерообразования, протекающими при быстром термическом отжиге. Основной примесью, применяемой для создания высоколегированных областей p^+ -типа, является бор. Как известно, процесс имплантации ионов бора имеет ряд особенностей. Так, высокодозная имплантация ионов бора приводит к созданию слоев, содержащих большое количество постимплантационных дефектов. В то же время образование аморфного слоя не происходит. Поэтому, в технологии ULSI перед имплантацией бора осуществляют имплантацию более тяжелых ионов примесей IV группы (Si, Ge), которая обеспечивают образование аморфного слоя. Типичный профиль распределения концентрации бора после отжига при температуре 850 °С аморфного слоя, созданного имплантацией ионов Ge, представлен на Рис.1. Экспериментальные данные взяты из работы [1]. Подложки имплантировались ионами Ge с энергией 32 кэВ и дозой $1 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$, что имеет следствием создание аморфного слоя глубиной 55 нанометров. После внедрения Ge подложки имплантировались ионами бора с энергией 500 эВ и дозой $2 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Затем проводился отжиг длительностью 60 с. Распределение общей концентрации бора определялось методом вторичной ионной масс-спектропии (ВИМС).

Поскольку имплантация бора проводится в предварительно созданный аморфный слой, на начальной стадии отжига происходит его твердофазная рекристаллизация, в результате кото-

рой удаляются дефекты, локализованные в пределах этого слоя. Оставшаяся часть постимплантационных дефектов расположена за пределами границы области рекристаллизации, то есть на глубине примерно 0.055 мкм и более, что подтверждается данными [1]. Значительная часть атомов бора занимает положение замещения, причем их концентрация превышает предел растворимости.

Концентрация бора, мкм⁻³

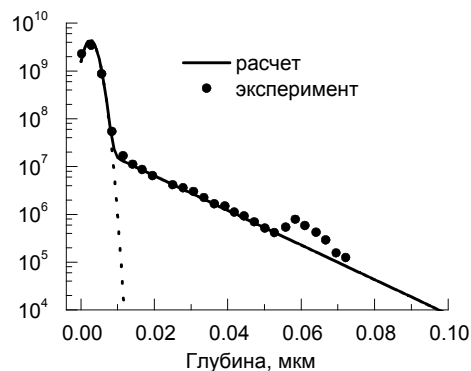


Рис.1. Рассчитанное распределение атомов бора в кремнии после отжига длительностью 60 с при температуре 850 °С. Пунктирная кривая — рассчитанное распределение бора после имплантации. Экспериментальные данные (•) взяты из работы Hamilton et al. [1].

Из Рис.1 видно, что даже при весьма низкой температуре последующего отжига имеет место диффузия атомов бора в области с концентрацией меньшей $2 \times 10^7 \text{ мкм}^{-3}$. Существующие программы моделирования процессов легирования кремния (см. например, [2,3]) не описывают этого явления. В работе [4] было предположено, что образование "хвостов" в области низкой концентрации примесных атомов при перераспределении ионно-имплантированной примеси есть след-

ствии длиннопробежной миграции неравновесных межузельных атомов примеси. Используем предположение о межузельной миграции для расчета процесса перераспределения ионно-имплантированного бора при быстром низкотемпературном отжиге, представленного на Рис.1.

Модель процесса межузельной диффузии

Как показывают данные [5], твердофазная рекристаллизация аморфного слоя в случае последующей имплантации ионов бора также имеет ряд особенностей. Так, процесс низкотемпературной рекристаллизации не приводит к 100 % активации бора при высоких дозах имплантации. Действительно, в работе [5] было обнаружено, что в результате твердофазной рекристаллизации при температуре 600 °С в случае концентрации примеси выше $3.5 \cdot 10^8$ мкм⁻³ происходит образование электрически неактивного бора. Это значение концентрации существенно выше предела растворимости бора C_{sol} , который для рассматриваемой температуры отжига 600 °С составляет $5.63 \cdot 10^6$ мкм⁻³ [6]. Таким образом, часть атомов примеси является электрически неактивной, образуя кластеры атомов бора с дефектами кристаллической структуры, в качестве которых обычно рассматриваются межузельные атомы кремния [7]. Следует ожидать, что описанное явление будет иметь место и для рассматриваемой температуры отжига 850 °С. Предел растворимости бора C_{sol} для данной температуры равен $4.88 \cdot 10^7$ мкм⁻³ [6]. Как видно из Рис.1, это значение значительно меньше максимальной концентрации примесных атомов после имплантации ионов $C_m \approx 4.44 \cdot 10^9$ мкм⁻³. Следовательно, для рассматриваемого процесса отжига существенная доля атомов бора является электрически активной после твердофазной рекристаллизации, находясь выше предела растворимости, а другая значительная часть бора электрически неактивна, будучи связанной в кластеры. Как показывают данные [5], при температурах отжига выше 750 °С происходит деактивации атомов бора, то есть атомы примеси, концентрация которых превышает предел растворимости, также начинают связываться в кластеры. Таким образом, для рассматриваемого процесса отжига при 850 °С сразу после рекристаллизации имеет место образование новых кластеров атомов бора в дополнение к уже имеющимся. Кроме того, может происходить перестройка уже имеющихся кластеров, например в результате созревания по Оствальду (Ostwald ripening) [8]. Суть этого процесса заключается в распаде кластеров малого размера и увеличении количества кластеров более крупных размеров. В результате такого распада или перестройки часть примесных атомов может перейти в межузельное положение [9]. Кроме того, в приповерхностном слое глубиной 0.005 мкм возникают упругие напряжения, поскольку атомный радиус бора $r_A^B = 0.095$ нм меньше атомного радиуса кремния

$r_A^{Si} = 0.134$ нм. Согласно [10] это явление приводит к генерации межузельных атомов.

В данной работе предполагается, что в области, где концентрация атомов имплантированного бора превышает предел растворимости, происходит генерация неравновесных межузельных атомов примеси. Генерация этих неравновесных частиц происходит в результате образования, перестройки или распада кластеров атомов бора, а также вследствие действия упругих напряжений. Поскольку генерация неравновесных межузельных атомов бора происходит непрерывно, используем для описания генерации, диффузии и рекомбинации межузельных атомов бора систему уравнений, приведенную в [11]. Применительно к рассматриваемому процессу диффузии бора эта система имеет следующий вид:

Закон сохранения неподвижных атомов примеси

$$\frac{\partial C^T(x,t)}{\partial t} = \frac{C^{AI}(x,t)}{\tau^{AI}} - G^{AI}(x,t), \quad (1)$$

Уравнение диффузии неравновесных межузельных атомов бора

$$\frac{\partial^2 C^{AI}}{\partial x^2} - \frac{C^{AI}}{l_{AI}^2} + \frac{\tau^{AI} G^{AI}(x,t)}{l_{AI}^2} = 0 \quad (2)$$

где C^T — суммарная концентрация атомов примеси в положении замещения и связанных в кластеры (неподвижные атомы примеси) C^{AI} — концентрация неравновесных межузельных атомов примеси; l_{AI} и τ^{AI} — средняя длина пробега и среднее время жизни неравновесных межузельных атомов примеси, соответственно; G^{AI} — скорость генерации межузельных атомов бора.

Добавим к уравнению (2) условие непротекания на поверхности полупроводника и граничное условие первого рода в объеме. Чтобы описать пространственное распределение скорости генерации межузельных атомов бора, используем распределение Гаусса

$$G^{AI}(x,t) = g_m \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \quad (3)$$

где g_m — максимальное значение скорости генерации межузельных атомов бора в единице объема полупроводника; R_p и ΔR_p — средний проективный пробег ионов бора и стратлинг проективного пробега, соответственно.

Результаты моделирования

Используем для расчета распределения атомов ионно-имплантированного бора после термического отжига аналитическое решение краевой задачи (1), (2), полученное в [11]. Результаты

проведенного расчета представлены на Рис.1 сплошной линией. Как видно из Рис.1, рассчитанный профиль распределения бора находится в хорошем согласии с экспериментальными данными [1]. Отклонение результатов расчета от экспериментальных данных на глубинах больших 0.055 мкм и более связано с поглощением межузельных атомов бора постимплантационными дефектами, оставшимися после твердофазной рекристаллизации. При расчете были использованы следующие значения параметров модели: **параметры, задающие начальное распределение атомов бора:** $R_p = 2.6$ нм; $\Delta R_p = 1.8$ нм и **параметры, описывающие процесс межузельной диффузии:** средняя длина пробега межузельных атомов бора $l^{AI} = 12$ нм; значение скорости генерации неравновесных межузельных атомов примеси в максимуме распределения $G_m = 1.56 \times 10^6$ мкм⁻³с⁻¹.

Заключение

Проведено моделирование процесса перераспределения ионно-имплантированного бора при термическом отжиге длительностью 60 секунд при температуре 850 °С. Рассчитанный профиль распределения атомов бора после термообработки хорошо согласуется с экспериментальными данными. Определен ряд параметров межузельной диффузии, например, средняя длина пробега неравновесных межузельных атомов бора равна 12 нм при температуре 850 °С. Также установлено, что приблизительно 1.94 % атомов бора переходят в межузельное положение, уча-

ствуют в быстрой миграции и затем опять становятся неподвижными, переходя в положение замещения или образуя неактивные комплексы с дефектами.

Список литературы

1. Hamilton J. J., Kirkby K. J., Cowern N. E. B. et al. // Appl. Phys. Lett. - 2007. - **91**. - Art. no. 092122.
2. TSUPREM-4 User's Manual. Version 2000.4. Avant! Corp. (Fremont, CA). 2000.
3. ATHENA. 2D process simulation software User's manual. Silvaco (Santa Clara, USA) 2004.
4. Величко О.И. // Ионная имплантация в полупроводниках и других материалах / Тез. докл. Междунар. конф. (Вильнюс, 27-29 сент. 1983 г.). Каунас: Изд. Каунасского политехн. ин-та имени А.Снечкусас. - 1983. - С.198.
5. Landi E., Guimaraes S., Solmi S. // Appl. Phys. A. - 1987. - **44**. - P.135.
6. Solmi S. Dopants in silicon: Activation and deactivation kinetics. In: Encyclopedia of Materials: Science and Technology, edited by K. H. J. Buschow, R. W. Cahn, M. C. Flemings, B. Ilschner, et al. (Elsevier Science Ltd., 2001), P.2331-2340.
7. Bisognin G., De Salvador D., Napolitani E. et al. // Mat. Sci. Eng. B. - 2004. - **114-115**. - P.88.
8. Claverie A., Colombeau B., Cristiano F. et al. // Nucl. Instrum. and Methods. in Phys. Res. B. - 2002. - **186**. - P.281.
9. Величко О.И. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, Институт электроники НАНБ, 1988. - 210 с.
10. Пантелеев В. А., Гугина Т. С., Окулич В. И. // Легирование полупроводников. - М.: Наука, 1982. - С.102.
11. Velichko O. I., Sobolevskaya N.A. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. - 2008. - **11(3)**. - P.316.

MODELING OF INTERSTITIAL DIFFUSION OF ION-IMPLANTED BORON

Oleg Velichko¹ and Natalia Kniazhava²

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
6, P.Brovki str., Minsk, 220013 Belarus

¹Tel. +375296998078, E-mail: oleg_velichko@lycos.com

²Tel. +375292165139, E-mail: kniazhava@gmail.com

A model of the interstitial diffusion of ion-implanted boron during rapid thermal annealing of silicon layers previously amorphized by implantation of germanium has been proposed. It is supposed that the boron interstitials are created continuously during annealing due to generation, dissolution, or rearrangement of the clusters of impurity atoms which are formed in the ion-implanted layers with impurity concentration above the solubility limit. The local elastic stresses arising due to the difference of boron atomic radius and atomic radius of silicon also contribute to the generation of boron interstitials. A simulation of boron redistribution during thermal annealing for 60 s at a temperature of 850 °C has been carried out. The calculated profile agrees well with the experimental data. A number of the parameters of interstitial diffusion have been derived. In particular, the average migration length of nonequilibrium boron interstitials is equal to 12 nm. It was also obtained that approximately 1.94 % of boron atoms were converted to the interstitial sites, participated in the fast interstitial migration, and then became immobile again transferring into a substitutional position or forming the electrically inactive complexes with crystal lattice defects.