

**ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МИКРО-
И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ**

УДК 53.01.072 : 681.3

В. И. Абрашин, О. И. Величко, А. А. Егоров, В. А. Лабунов

(Минск)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННОГО МЫШЬЯКА В КРЕМНИИ.
СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ
ОДНО- И ДВУМЕРНЫХ РАСЧЕТОВ**

Разработана модель твердофазной диффузии примесей для случая одновременного переноса примесных атомов посредством вакансионного и межузельного механизмов. Проведено одно- и двумерное моделирование процесса перераспределения ионно-имплантированного мышьяка. Определены параметры в эффективном коэффициенте диффузии примеси и проведено сравнение результатов, полученных на основе решения одно- и двумерного уравнений диффузии. Совпадение численных расчетов с экспериментальными данными для двух значений длительности отжига позволяет сделать вывод об адекватности разработанной модели.

В настоящее время для формирования активных структур кремниевых интегральных микросхем (ИМС) большой степени интеграции используется метод ионной имплантации в сочетании с термообработками [1]. Конечное распределение электрически активных примесей при данном способе легирования определяется процессами твердофазной диффузии, протекающими при постимплантационных отжигах. Полученные локальные легированные области имеют микронные и субмикронные размеры. Это означает, что экспериментальное измерение распределений атомов примесей в данных областях практически невозможно. Единственным средством получения информации о распределениях примесных атомов является машинное моделирование процессов твердофазной диффузии, сочетаемое с экспериментальными измерениями профилей распределения примеси на специальных тестовых структурах. Точность проведенных машинных расчетов в значительной мере зависит от адекватности используемых моделей твердофазной диффузии примесных атомов.

Существующие модели термической диффузии примесей имеют ряд принципиальных недостатков, связанных с неадекватным описанием микроскопических механизмов переноса примесных атомов. Так, предполагается, что перенос примесных атомов осуществляется в результате обмена местами атома примеси с вакансией, оказавшейся в соседнем узле решетки вследствие миграции по объему полупроводника («простой» вакансионный механизм [2]). Экспериментально установлено, что при нахождении вакансии в пределах третьей координатной сферы атома примесей элементов III и V групп образуется вакансионно-примесный комплекс [3]. В результате миграции и распада этих комплексов происходит диффузия примесных атомов по вакансионному механизму. Кроме того, экспериментально установлено, что атомы элементов III и V групп мигрируют в кремнии посредством, как вакансионного, так и межузельного механизма диффузии [4]. Так, согласно [4], доля межузельного механизма в процессе диффузии мышьяка при

1090 °C составляет 35 %, т. е. межузельный механизм может играть существенную роль. В то же время при моделировании рассматривается только вакансионный механизм диффузии [5]. В случае же описания диффузии с помощью смешанного механизма [4] игнорируются концентрационные зависимости эффективных парциальных коэффициентов диффузии примесей с помощью вакансий и межузельных атомов кремния [6]. Физически это означает пренебрежение зарядовыми состояниями собственных точечных дефектов (СТД). В настоящее время установлено, что вакансии имеют зарядовые состояния V^{2-} , V^- , V^x , V^+ [2], и предполагается, что межузельные атомы кремния находятся в зарядовых состояниях I^- , I^x , I^+ [7]. Однако не исключается существование и двукратно заряженных межузельных атомов [2].

Рассмотрим модель процессов твердофазной диффузии по смешанному механизму с одновременным учетом зарядовых состояний как вакансий, так и межузельных атомов кремния.

Используем с этой целью комплексную модель процессов твердофазной диффузии [6]. В работе [6] получено уравнение диффузии атомов примеси в результате их взаимодействия с СТД при условии существования локального термодинамического равновесия между атомами примеси в положении замещения, СТД и комплексами атом примеси — СТД. Пренебрегая отклонением состояния газа электронов (дырок) от идеального, это уравнение можно представить в виде

$$C_i = \sum_k \nabla \{ D_i^{sk} [\nabla (C_q^{kx} C^s) + h^b C_q^{kx} \nabla (C^s - N^b)] \}, \quad (1)$$

$$D_i^{sk}(\chi) = C_i^{kx} \sum_r D_i^{sr} H^{kr} h^{kr} \chi^{-zr}, \quad (2)$$

$$C_q^{kx}(x, t) = C^{kx}(x, t) / C_i^{kx},$$

$$\chi = [C^s - N^b + \sqrt{(C^s - N^b)^2 + 4n_{ie}^2}] / 2n_i,$$

$$h^b = C^s / \sqrt{(C^s - N^b)^2 + 4n_{ie}^2}, \quad h = 1 + h^b.$$

Представим функциональную зависимость эффективных коэффициентов диффузии (2) следующим образом:

$$D_i^{sk}(\chi) = D_i^{sk} \frac{1 + \beta_1^k \chi + \beta_2^k \chi^2 + \dots + \beta_r^k |\chi|^{2r}}{1 + \beta_1^k + \beta_2^k + \dots + \beta_r^k}, \quad (3)$$

$$\beta_r^k = D_i^{sr} H^{kr} h^{kr} / (D_i^{sk} H^{kx} h^{kx}).$$

Выражение (3) было получено из (2) с учетом отталкивания атома примеси и СТД с зарядами одинакового знака. Учитывая вышеуказанные значения зарядовых состояний СТД, в правой части выражения (3) можно ограничиться членами, пропорциональными χ^2 .

Упростим теперь уравнение диффузии примеси (1). Как показано в [8], для широкого класса термообработок не слишком малой длительности распределения нейтральных СТД в объеме полупроводника можно считать примерно однородными, т. е.

$$C_q^{kx}(x, t) \approx C_q^{kx}(t). \quad (4)$$

Подставляя (4) в (1) и учитывая (3), получим искомое уравнение диффузии атомов примеси с помощью смешанного (вакансионного и межузельного) механизма диффузии:

$$C_i = \nabla [D(\chi, t) h \nabla C^s] - \nabla [D(\chi, t) h^b \nabla N^b], \quad (5)$$

$$D(\chi, t) = D_i(t) \frac{1 + \beta_1(t) \chi + \beta_2(t) \chi^2}{1 + \beta_1(t) + \beta_2(t)}, \quad (6)$$

$$D_i(t) = D_i^V C_q^{Vx}(t) + D_i^I C_q^{Ix}(t), \quad (7)$$

$$\beta_1(t) = \frac{\beta_1^V(1 + \beta_1^I + \beta_2^I) + p(t)\beta_1^I(1 + \beta_1^V + \beta_2^V)}{1 + \beta_1^I + \beta_2^I + p(t)(1 + \beta_1^V + \beta_2^V)}, \quad (8)$$

$$\beta_2(t) = \frac{\beta_2^V(1 + \beta_1^I + \beta_2^I) + p(t)\beta_2^I(1 + \beta_1^V + \beta_2^V)}{1 + \beta_1^I + \beta_2^I + p(t)(1 + \beta_1^V + \beta_2^V)}, \quad (9)$$

$$p(t) = D_i^I C_q^{Ix}(t) / [D_i^V C_q^{Vx}(t)]. \quad (10)$$

В выражениях (7)–(10) индексы V и I относятся к вакансиям и межузельным атомам кремния соответственно.

Из выражений (5), (6) видно, что уравнение диффузии (5) имеет форму, удобную для моделирования процессов легирования в производстве ИМС. Так, из (6) следует, что хотя (5) описывает диффузию одновременно и вакансионным, и межузельным механизмами, при выполнении условия (4) эффективный коэффициент диффузии имеет форму, сходную с коэффициентом диффузии при чисто вакансионном механизме. Однако для смешанного механизма диффузии значения параметров в (6) зависят от времени термообработки, согласно выражениям (7)–(10). Как следует из (7)–(10), эти величины постоянны только тогда, когда неизменна доля межузельного механизма. Значения параметров в выражениях (6)–(10) можно определить из контрольных экспериментов на одномерных тестовых структурах. Приведем в качестве примера результаты расчетов процесса перераспределения ионно-имплантированного мышьяка. Рассмотрим случай имплантации большой дозы ионов примеси, когда при отжиге имеет место высококонцентрационная диффузия. Для определения параметров диффузии используем экспериментальные данные [9]. Эти данные представлены на рис. 1. Имплантация мышьяка проводилась с дозой 10^{16} ион/см² и энергией 50 кэВ в кремниевые подложки ориентации (111) p -типа проводимости с удельным сопротивлением 0,5 Ом · см. Для предотвращения испарения примеси на поверхность подложки осаждался слой двуокиси кремния SiO₂. Термообработка проводилась в среде азота при температуре 1000 °С и длительности 20 и 60 мин. Здесь же представлены результаты численного моделирования процесса одномерной диффузии ионно-имплантированного мышьяка. Проведенные расчеты показали, что для данных условий термообработки функции $D_i(t)$ и $p(t)$ слабо зависят от времени и их можно считать постоянными $D_i(t), p(t) \equiv \text{const}$ в диапазоне 20 + 60 мин. Поскольку $D_i(t)$ не зависит от времени обработки, $D_i(t) = D_i^V + D_i^I = D_i$ (D_i — коэффициент диффузии мышьяка в собственном кремнии). Из выражений (8), (9) видно, что эффективные коэффициенты $\beta_1(t)$ и $\beta_2(t)$ в этом случае также не зависят от времени. Так как коэффициенты β_1 и β_2 постоянны, значение β_1 определено из литературных данных ($\beta_1 = 100$ [5]), а значение β_2 — из условия наилучшего согласования рассчитанных кривых с экспериментальными данными для двух значений длительности термообработки ($\beta_2 = 5$).

Для описания процесса кластерообразования также используем литературные данные. Согласно [9]

$$C = C^s + \beta^{Ac} (C^s)^4,$$

$$\beta^{Ac} = 7 \cdot 10^{-66} \exp[1,05 \text{ эВ} / (k_B T)],$$

если C^s выражена в см⁻³.

Как видно из рис. 1, рассчитанные с использованием разработанной методики профили распределения мышьяка хорошо согласуются с экспериментальными данными, причем для разных времен термообработки. Сравним теперь полученную нами концентрационную зависимость эффективного коэффициента диффузии мышьяка $D(\chi, t)h$ с концентрационной зависимостью, предложенной в [10]:

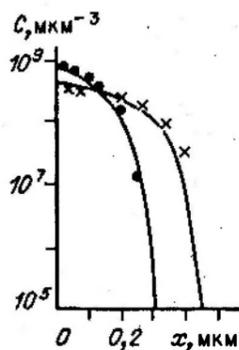


Рис. 1. Распределение ионно-имплантированного мышьяка после термообработки: экспериментальные данные соответствуют длительностям отжига 20 (●) и 60 мин (×), сплошные линии — рассчитанные распределения полной концентрации примесных атомов

$$D_F = hD_i^x + 2D_i^- C^x / n_i \quad (11)$$

Сравнение показывает, что рассчитанные концентрационные зависимости коэффициента диффузии примерно совпадают в диапазоне концентраций до $2 \cdot 10^7 \text{ мкм}^{-3}$, затем значения $D(x, t)h$ превышают значения D_F , причем при $C^x = 2 \cdot 10^8 \text{ мкм}^{-3}$ превышение составляет 190%. Последнее означает, что использование модели [10] не даст согласования с представленными экспериментальными данными. Отметим, что выражение (11) не отражает реальной концентрационной зависимости, так как по определению коэффициент диффузии в собственном кремнии $D_i = D_i^x + D_i^-$, тогда как из (11) следует $D_i = D_i^x$.

Проведем теперь сравнение полученной нами концентрационной зависимости с зависимостью [11], также определенной из экспериментальных данных. С этой целью зависимость коэффициента диффузии от полной концентрации примеси [11] представим в виде зависимости от C^x . Пересчитанная зависимость имеет вид полинома второй степени, т. е. согласуется с (6) и качественно не согласуется с (11). Отметим, что наличие квадратичного члена свидетельствует об участии в переносе атомов мышьяка и двукратно заряженных СТД. Коэффициенты диффузии совпадают в области $C^x < 2 \cdot 10^7 \text{ мкм}^{-3}$, а при более высоких концентрациях значения, определенные нами из данных [9], превышают значения пересчитанной зависимости [11] не более чем на 35%. Это расхождение вполне объяснимо неточностью приближенного метода, использованного в [11] для определения концентрационной зависимости коэффициента диффузии.

Полученное совпадение с экспериментом позволяет использовать предложенную модель для двумерного моделирования процесса перераспределения ионно-имплантированного мышьяка при формировании эмиттера биполярного транзистора. Характерное сечение формируемой структуры изображено на рис. 2. Соответствующее двумерное распределение мышьяка после термообработки представлено на рис. 3. При расчетах учитывался процесс сегрегации примеси на границе раздела фаз. Значение коэффициента сегрегации выбрано по литературным данным ($k_s = 0,01$ [12]).

Двумерное решение диффузионного уравнения осуществлялось конечно-разностным методом, предложенным в [13]. Данный метод позволяет получить решение требуемой точности на равномерной сетке с небольшим числом точек дискретизации (20×30) и небольшим числом шагов по времени (20).

Полученные результаты двумерного моделирования позволяют оценить погрешность, возникающую при одномерном моделировании технологических процессов. Такие расчеты осуществляются с целью уменьшения «затрат» машинного времени и выполняются, как правило, по центральному сечению исследуемой области прибора. На рис. 4 приведены результаты расчетов распределений полной концентрации мышьяка для двух значений длительности термообработки, выполненные с использованием одно- и двумерной моделей. Соответствующие распределения концентрации электрически активной примеси представлены на рис. 5. Как видно из рисунков, значения концентраций примеси, рассчитанные с использованием двумерной модели, существенно отличаются от аналогичных значений одномерных расчетов. Это особенно касается значений полной концентрации примеси в высококонцентрационной области. В то же время видно, что значения глубин

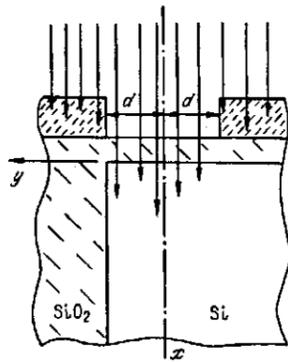


Рис. 2. Характерное сечение эмиттерной области биполярного транзистора на стадии имплантации ионов мышьяка: на поверхность двуокиси кремния нанесен слой фоторезиста, в котором вытравлено «окно» для локального легирования

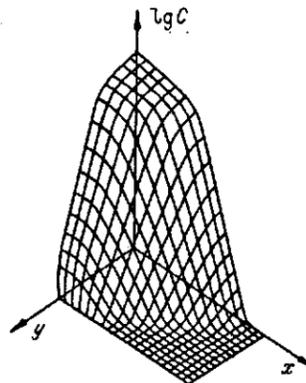


Рис. 3. Двумерное распределение ионно-имплантированного мышьяка после термообработки: характерный размер «окна» имплантации $d = 0,1$ мкм, длительность отжига 20 мин

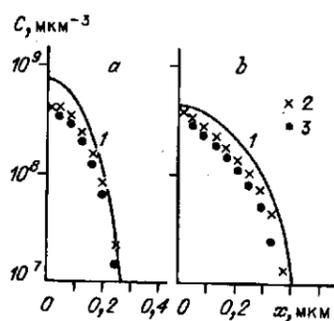


Рис. 4. Рассчитанные профили распределения полной концентрации мышьяка: 1 — одномерная диффузия в тестовой структуре; 2 — двумерная диффузия при характерном размере «окна» $d = 0,2$ мкм; 3 — двумерная диффузия при $d = 0,1$ мкм. Длительность отжига: а — 20; б — 60 мин

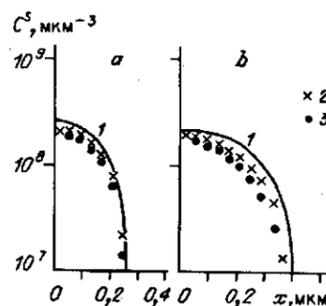


Рис. 5. Рассчитанные профили распределения концентрации электрически активного мышьяка: 1 — одномерная диффузия в тестовой структуре; 2 — двумерная диффузия при характерном размере «окна» $d = 0,2$ мкм; 3 — двумерная диффузия при $d = 0,1$ мкм. Длительность отжига: а — 20; б — 60 мин

залегания $p-n$ -переходов в области центрального сечения, рассчитанные с применением одно- и двумерных моделей, мало отличаются друг от друга.

ВЫВОДЫ

Разработана модель диффузии примесей для случая одновременного переноса примесных атомов вакансионным и межузельным механизмами.

Проведены численные одно- и двумерные расчеты высококонцентрационной диффузии ионно-имплантированного мышьяка и идентифицированы параметры в эффективном коэффициенте диффузии.

Показано, что при субмикронных размерах легированных областей приближенные расчеты распределений полной концентрации примеси, выполненные с использованием одномерной модели диффузии, существенно отличаются от результатов, полученных для двумерной модели. В то же время соответствующие значения глубин залегания $p-n$ -переходов в области центрального сечения эмиттера биполярного транзистора в некоторых случаях близки друг другу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фитчнер У. Моделирование технологических процессов // Технология СБИС / Под ред. С. Зи: Пер. с англ.—М.: Мир, 1986.—Кн. 2.
2. Цай Дж. Диффузия // Там же.—Кн. 1.
3. Емцев В. В., Машовец Т. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках.—М.: Радио и связь, 1981.
4. Antoniadis D. A., Moskowitz I. Diffusion of substitutional impurities in silicon at short oxidation times: An insight into point defects kinetics // J. Appl. Phys.—1982.—53, N 10.—P. 6788.
5. Tsai M. J., Morehead F. F., Baglin J. E. E., Michel A. E. Shallow junction by high-dose As implants in Si: experiments and modeling // J. Appl. Phys.—1980.—51, N 6.—P. 3230.
6. Величко О. И. Система уравнений для моделирования радиационно-стимулированной диффузии ионно-имплантированных примесей // Радиотехника и электроника: Республ. межвед. сб.—Минск: Вышэйш. шк., 1985.—Вып. 14.
7. Seeger A., Frank W., Gosele U. Diffusion in elemental semiconductors: new development // Inst. Phys. Conf.—1979.—Ser. 46.—Ch. 1.—P. 148.
8. Величко О. И., Лабунов В. А. Модель диффузии ионно-имплантированных примесей, учитывающая влияние на процесс диффузии радиационных дефектов, созданных имплантацией ионов // Микроэлектроника.—1985.—14, вып. 6.
9. Tsukamoto K., Akasaka K., Kijima K. Thermal diffusion of ion implanted arsenic in silicon // Japan J. Appl. Phys.—1980.—19, N 1.—P. 87.
10. Fair R. V. Physics and chemistry of impurity diffusion and oxidation of silicon // Silicon Integrated Circuits. Pt. B.—N. Y.: Acad. Press, 1981.
11. Fair R. V., Tsai J. C. C. The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon // J. Electrochem. Soc.: Solid-State Sci. and Technol.—1975.—122, N 12.—P. 1689.
12. Кац Л. Окисление // Технология СБИС / Под ред. С. Зи.—М.: Мир, 1986.—Кн. 1.
13. Абрашин В. Н. Об одном классе разностных схем для нелинейных нестационарных задач математической физики // Дифференц. уравнения.—1986.—22, № 7.

Поступила в редакцию 30 июля 1990 г.